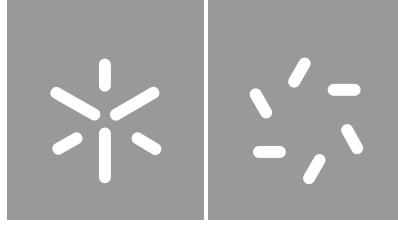


Universidade do Minho
Escola de Ciências

Bruno Silva Correia Alexandre

**Difração de Luz em
Aberturas Metálicas
Cobertas com Materiais 2D**



Universidade do Minho
Escola de Ciências

Bruno Silva Correia Alexandre

**Difração de Luz em Aberturas
Metálicas Cobertas
com Materiais 2D**

Dissertação de Mestrado
Mestrado em Física

Trabalho efetuado sob a orientação do

**Professor Doutor Nuno Miguel
Machado Reis Peres**

Declaração

Nome: Bruno Silva Correia Alexandre

Endereço electrónico: brunualex6@gmail.com

Telefone: (M) (+351) 915082990

Número do Cartão de cidadão: 14557165

Título da dissertação: Difração de Luz em Aberturas Metálicas Cobertas com Materiais 2D

Orientador: Professor Doutor Nuno Miguel Machado Reis Peres

Ano de conclusão: 2019

Designação do Mestrado: Mestrado em Física

É AUTORIZADA A REPRODUÇÃO INTEGRAL DESTA DISSERTAÇÃO APENAS PARA EFEITOS DE INVESTIGAÇÃO, MEDIANTE DECLARAÇÃO ESCRITA DO INTERESSADO, QUE A TAL SE COMPROMETE.

Universidade do Minho, Outubro de 2019

Assinatura:

Declaração de Integridade

Declaro ter atuado com integridade na elaboração do presente trabalho académico e confirmo que não recorri à prática de plágio nem a qualquer forma de utilização indevida ou falsificação de informações ou resultados em nenhuma das etapas conducente à sua elaboração. Mais declaro que conheço e que respeitei o Código de Conduta Ética da Universidade do Minho.

Agradecimentos

Em primeiro lugar gostaria de agradecer ao Professor Dr. Nuno Peres por ter aceitado ser meu orientador nesta Dissertação de Mestrado, por se ter mostrado sempre disponível para me ajudar na realização da mesma e, principalmente, por todos os conhecimentos que me tem vindo a transmitir ao longo dos últimos anos de trabalho. Gostaria também de agradecer ao Dr. Yuliy Bludov pelo esclarecimento de algumas dúvidas que surgiram em determinados problemas estudados nesta dissertação. Agradeço também ao José Nuno Gomes pelas discussões criativas e pelos conselhos sábios que sempre resultaram em algo produtivo para o avanço do presente trabalho. Finalmente, gostaria também de agradecer à minha família, em especial aos meus pais, que sempre me apoiaram e me ajudaram a chegar onde me encontro.

Agradeço também o apoio da Fundação para a Ciência e Tecnologia (FCT), no âmbito do projecto "LARGE AREA TWO DIMENSIONAL HETEROSTRUCTURES FOR PHOTODETECTORS", POCI-01-0145-FEDER-016903, PTDC/FIS-NAN/3668/2014.



Cofinanciado por:



UNIÃO EUROPEIA
Fundo Europeu
de Desenvolvimento Regional

Sumário

Neste trabalho estudamos o problema de difração de ondas eletromagnéticas em aberturas metálicas cobertas com grafeno, com o objetivo de excitar plasmões polaritões de superfície neste material bidimensional. Em primeiro lugar, consideramos a difração de um pacote de ondas numa abertura metálica perfeitamente condutora de dimensões finitas. Começamos por considerar o caso sem grafeno e, posteriormente, consideramos mais três casos: primeiro colocamos uma folha de grafeno suspensa na base da estrutura metálica; depois acrescentamos outra folha no topo da abertura do sistema anterior e finalmente, consideramos uma folha infinita posicionada a uma certa distância do metal (abertura). Por fim, consideramos a difração do modo fundamental de um guia de ondas semi-infinito tanto num metal perfeito como num metal real. Voltamos a considerar separadamente, a presença de grafeno na saída da cavidade e a uma certa distância da mesma. Em ambos os problemas (abertura finita e guia de ondas), calculamos as propriedades óticas do sistema, de forma a poder detetar a presença de plasmões na superfície do grafeno.

Abstract

In this work we study the diffraction of electromagnetic waves by metallic apertures covered with graphene, in order to excite surface plasmon polaritons in this two dimensional material. First, we consider the diffraction of a wave packet in a finite metallic aperture perfectly conductive. We start by the case with no graphene and then, consider three more cases: first we place a graphene sheet suspended in the bottom of the metallic structure; then we add another sheet on the top of the previous system and finally, we consider an infinite graphene sheet placed at a certain distance from the metal (cavity). Lastly, we consider the diffraction of the fundamental mode of a semi-infinite waveguide either in a perfect metal and in a real one. We consider again separatly, the presence of graphene in the bottom of the waveguide and the same material posicioned apart from the metal. In both problems (finite aperture and waveguide), we compute the optical properties of the system, so as to detect the presence of plasmons in the graphene surface.

Conteúdo

Lista de Figuras	vi
1 Introdução	1
1.1 Estado da Arte	1
1.2 Estrutura do Presente Trabalho	3
2 Eletrodinâmica de Metais	6
2.1 Equações de Maxwell e Condições Fronteira	6
2.2 Modelo de Drude-Lorentz	10
3 Plasmões no Grafeno: Relações de Dispersão e Perfil dos Campos	13
3.1 Folha de Grafeno Isolada	13
3.2 Folha de Grafeno nas Proximidades de um Metal Perfeito	16
3.3 Folha de Grafeno nas Proximidades de um Metal Real	20
3.4 Duas Folhas de Grafeno Embebidas em Dielétricos	24
4 Problema de Espalhamento de um Pacote de Ondas por um Orifício Retangular num Metal	31
4.1 Abertura num Metal Perfeito	31
4.2 Abertura Metálica com uma Folha de Grafeno na Base	39
4.3 Abertura Metálica Coberta com duas Folhas de Grafeno	48
4.4 Abertura Metálica seguida de uma Folha de Grafeno	52
5 Problema de Espalhamento de um Modo de um Guia de Ondas Semi-Infinito	60
5.1 Guia de Ondas Semi-Infinito num Metal Perfeito	60
5.2 Guia de Ondas Semi-Infinito num Metal Real	64
5.3 Guia de Ondas Semi-Infinito num Metal Perfeito Seguido de uma Folha Grafeno	70
5.4 Eficiência de Excitação de SPP's numa Folha de Grafeno	77
5.5 Guia de Ondas Semi-Infinito num Metal Real Seguido de uma Folha de Grafeno	79
5.6 Guia de Ondas Semi-Infinito num Metal Perfeito com uma Folha de Grafeno na base	83
6 Conclusão	91
A Relações de Ortogonalidade entre Modos Plasmônicos e Radiativos	95
B Função Dielétrica do Ouro	97

Lista de Figuras

2.1	Superfície cilíndrica fechada S composta pelas superfícies abertas S_1 , S_2 e S_3 . h é a altura do cilindro. $\hat{\mathbf{n}}$ é o versor normal à interface que separa os dois meios distintos de funções dielétricas ϵ_1 e ϵ_2 . $\hat{\mathbf{n}}_1$ e $\hat{\mathbf{n}}_2$ são os versores normais às superfícies S_1 e S_2 , respetivamente.	8
2.2	Contorno fechado C composto pelos contornos abertos C_1 , C_2 , C_3 e C_4 . $\hat{\mathbf{n}}$ é o versor normal à interface que separa os dois meios distintos de funções dielétricas ϵ_1 e ϵ_2 e $\hat{\mathbf{t}}$ o versor tangencial a esta interface e normal à superfície aberta englobada pelo contorno C , que aponta para fora da folha. $d\mathbf{l}_1$ e $d\mathbf{l}_2$ são os vetores tangenciais aos contornos C_1 e C_2 , respetivamente, e h a largura de C .	9
2.3	Representação gráfica da condutividade de Drude do grafeno. No lado esquerdo podemos observar a parte imaginária desta função e no lado direito a sua parte real, ambos os casos para duas energias de Fermi distintas. Os parâmetros considerados foram $E_F = 0.5$ eV e $\hbar\gamma = 0.004$ eV.	12
3.1	Folha de grafeno bidimensional de condutividade $\sigma(\omega)$. O eixo z aponta para fora da folha. ϵ_1 e ϵ_2 são as funções dielétricas dos dois meios considerados.	13
3.2	Relação de dispersão dos SPP's: energia como função da parte real (esquerda) e da parte imaginária (direita) de q , para $E_F = 0.5$ eV, $\hbar\gamma = 0.004$ eV e $\epsilon_1 = 1 = \epsilon_2$. À esquerda podemos também ver a relação de dispersão da luz no vácuo (linha castanha, meios 1 e 2).	15
3.3	Perfil do campo elétrico plasmónico de uma folha de grafeno no vácuo ($\epsilon_1 = 1 = \epsilon_2$). A energia de Fermi considerada é 0.5 eV e tomamos $\hbar\gamma = 0$. Consideramos também $\hbar\omega = 0.055$ eV e $q = 2.1 \mu\text{m}^{-1}$. A folha de grafeno está representada pela linha preta em $x = 0$.	16
3.4	Folha de grafeno bidimensional de condutividade $\sigma(\omega)$ colocada a uma distância d de um metal perfeito. O eixo z aponta para fora da folha. ϵ_1 e ϵ_2 são as funções dielétricas dos dois meios considerados.	17
3.5	Relação de dispersão dos SPP's: energia como função da parte real (esquerda) e da parte imaginária (direita) de q , para $E_F = 0.5$ eV, $\hbar\gamma = 0.004$ eV, $\epsilon_1 = 1 = \epsilon_2$ e $d = 0.01 \mu\text{m}$. As linhas a cheio representam a solução analítica e as ponteadas a numérica.	19
3.6	Comparação da relação de dispersão dos SPP's de uma folha de grafeno isolada com os de uma folha de grafeno nas proximidades de um metal perfeito: energia como função da parte real de q , para $E_F = 0.5$ eV, $\hbar\gamma = 0.004$ eV, $\epsilon_1 = 1 = \epsilon_2$ e $d = 0.01 \mu\text{m}$.	19

3.7	Perfil do campo elétrico plasmônico de uma folha de grafeno no vácuo ($\epsilon_1 = 1 = \epsilon_2$), a uma distância $d = 0.1 \mu\text{m}$ de um metal perfeito. A energia de Fermi considerada é 0.5 eV e tomamos $\hbar\gamma = 0$. Além disto temos $\hbar\omega = 0.126 \text{ eV}$ e $q = 12.04 \mu\text{m}^{-1}$. A folha de grafeno está representada pela linha preta em $x = 0.1 \mu\text{m}$ e a superfície do metal pela linha cinzenta em $x = 0$	20
3.8	Folha de grafeno bidimensional de condutividade $\sigma(\omega)$ colocada a uma distância d de um metal real. O eixo z aponta para fora da folha. ϵ_1 e ϵ_2 são as funções dielétricas dos dois meios considerados e ϵ_m a função dielétrica do metal.	21
3.9	Relação de dispersão dos SPP's: energia como função da parte real (esquerda) e da parte imaginária (direita) de q , para $E_F = 0.5 \text{ eV}$, $\hbar\gamma = 0.004 \text{ eV}$, $\epsilon_1 = 1 = \epsilon_2$ e $d = 0.1 \mu\text{m}$. ϵ_m corresponde à função dielétrica do ouro que se encontra apresentada no apêndice B.	23
3.10	Perfil do campo elétrico plasmônico de uma folha de grafeno no vácuo ($\epsilon_1 = 1 = \epsilon_2$), a uma distância $d = 0.1 \mu\text{m}$ de um metal real. A energia de Fermi considerada é 0.5 eV e tomamos $\hbar\gamma = 0$. Além disto temos $\hbar\omega = 0.126 \text{ eV}$ e $q = 12.11 \mu\text{m}^{-1}$. A folha de grafeno está representada pela linha preta em $x = 0.1 \mu\text{m}$ e a superfície do metal pela linha cinzenta em $x = 0$. ϵ_m corresponde à função dielétrica do ouro que se encontra apresentada no apêndice B.	23
3.11	Duas folhas de grafeno bidimensionais de condutividade $\sigma(\omega)$. O eixo z aponta para fora da folha. ϵ_1 , ϵ_2 e ϵ_3 são as funções dielétricas dos três meios considerados.	24
3.12	Relação de dispersão dos SPP's para a dupla camada de grafeno (linhas vermelhas para $0.1 \mu\text{m}$ e laranjas para $d = 0.5 \mu\text{m}$) e para uma única folha de grafeno (linha azul): energia como função da parte real de q , para $E_F = 0.5 \text{ eV}$, $\hbar\gamma = 0$ e $\epsilon_1 = 1 = \epsilon_2 = \epsilon_3$. As linhas vermelha e laranja que estão acima da linha azul correspondem aos modos óticos e as linha abaixo correspondem aos modos acústicos.	26
3.13	Perfil do campo elétrico plasmônico da dupla camada de grafeno no vácuo ($\epsilon_1 = 1 = \epsilon_2 = \epsilon_3$), para uma distância entre folhas dada por $d = 0.1 \mu\text{m}$. A energia de Fermi considerada é 0.5 eV e tomamos $\hbar\gamma = 0$. Além disto temos $\hbar\omega = 0.1 \text{ eV}$ (esquerda), $\hbar\omega = 0.14 \text{ eV}$ (direita) e $q = \pi/0.3 \mu\text{m}^{-1}$. As folhas de grafeno estão representadas pelas linhas pretas em $x = 0.1 \mu\text{m}$ e em $x = 0$	27
3.14	Perfil da componente y dos modos acústico (esquerda) e ótico (direita) da dupla camada de grafeno no vácuo ($\epsilon_1 = 1 = \epsilon_2 = \epsilon_3$), para uma distância entre folhas $d = 0.1 \mu\text{m}$. A energia de Fermi considerada é 0.5 eV e tomamos $\hbar\gamma = 0$. Além disto temos $\hbar\omega = 0.1 \text{ eV}$ (esquerda), $\hbar\omega = 0.14 \text{ eV}$ (direita) e $q = \pi/0.3 \mu\text{m}^{-1}$. As folhas de grafeno estão representadas pelas linhas pretas em $x = 0.1 \mu\text{m}$ e em $x = 0$	27
3.15	Relação de dispersão dos SPP's para a dupla camada de grafeno (linhas vermelhas para $0.1 \mu\text{m}$ e laranjas para $d = 0.5 \mu\text{m}$) e para uma única folha de grafeno (linhas azul e roxa): energia como função da parte real de q , para $E_F = 0.5 \text{ eV}$, $\hbar\gamma = 0$ e $\epsilon_1 = 1 = \epsilon_2 = \epsilon_3$. No caso da dupla camada de grafeno, umas das folhas tem $E_F = 0.5 \text{ eV}$ e a outra tem $E_F = 1 \text{ eV}$. Para cada valor de d , os modos óticos correspondem ao ramo de maior energia e os modos acústicos ao de menor.	28

3.16	Perfil do campo elétrico plasmônico da dupla camada de grafeno no vácuo ($\epsilon_1 = 1 = \epsilon_2 = \epsilon_3$), para uma distância entre folhas $d = 0.1 \mu\text{m}$. A energia de Fermi considerada é 0.5 eV e tomamos $\hbar\gamma = 0$. Além disto temos $\hbar\omega = 0.11 \text{ eV}$ (esquerda), $\hbar\omega = 0.18 \text{ eV}$ (direita) e $q = \pi/0.3 \mu\text{m}^{-1}$. As folhas de grafeno estão representadas pelas linhas pretas em $x = 0.1 \mu\text{m}$ e em $x = 0$	29
3.17	Perfil da componente y dos modos acústico (esquerda) e ótico (direita) da dupla camada de grafeno no vácuo ($\epsilon_1 = 1 = \epsilon_2 = \epsilon_3$), para uma distância entre folhas $d = 0.1 \mu\text{m}$. A energia de Fermi considerada é 0.5 eV e tomamos $\hbar\gamma = 0$. Além disto temos $\hbar\omega = 0.11 \text{ eV}$ (esquerda), $\hbar\omega = 0.18 \text{ eV}$ (direita) e $q = \pi/0.3 \mu\text{m}^{-1}$. As folhas de grafeno estão representadas pelas linhas pretas em $x = 0.1 \mu\text{m}$ e em $x = 0$	30
4.1	Abertura retangular perfurada num metal perfeito (PEC). O eixo z aponta para fora da folha. ϵ_1, ϵ_2 e ϵ_3 são as funções dielétricas dos três meios considerados. $2a$ é a largura e d o comprimento da abertura.	32
4.2	Representação gráfica dos modos próprios da cavidade considerada no problema. Consideramos $\epsilon_2 = 1, a = 0.3 \mu\text{m}$ e $d = 0.1 \mu\text{m}$	33
4.3	Transmitância e refletância do sistema em função da energia dos fótons para $a = 0.3 \mu\text{m}$, $d = 0.1 \mu\text{m}$ (esquerda) e $d = 3 \mu\text{m}$ (direita). Ambos os casos são para $\epsilon_1 = \epsilon_2 = \epsilon_3 = 1$	37
4.4	Esquerda: valores de ω para o qual ocorrem os primeiros máximos da transmitância para diferentes comprimentos de abertura. Os parâmetros considerados são $a = 0.3 \mu\text{m}$ e $\epsilon_1 = 1 = \epsilon_2 = \epsilon_3$. Direita: forma do pacote de ondas à entrada do orifício metálico ($x = 0$) e $\omega = 0.3 \text{ eV}$	37
4.5	Esquerda: refletância e transmitância do sistema em função de a para $d = 0.1 \mu\text{m}$. Direita: refletância e transmitância do sistema em função do comprimento d da abertura para $a = 0.3 \mu\text{m}$. Ambos os casos são para $\epsilon_1 = \epsilon_2 = \epsilon_3 = 1$ e $\hbar\omega = 0.29 \text{ eV}$	38
4.6	Esquerda: transmitância do sistema em função do comprimento d e da energia dos fótons para $\epsilon_1 = \epsilon_2 = \epsilon_3 = 1$ e $a = 0.3 \mu\text{m}$. Direita: transmitância do sistema em função de a e da energia dos fótons para $\epsilon_1 = \epsilon_2 = \epsilon_3 = 1$ e $d = 0.1 \mu\text{m}$. No eixo do lado direito dos gráficos podemos ver o comprimento de onda correspondente a cada energia apresentada no eixo do lado esquerdo.	39
4.7	Abertura retangular perfurada num metal perfeito (PEC), com uma folha de grafeno de condutividade $\sigma(\omega)$ na base. O eixo z aponta para fora da folha. ϵ_1, ϵ_2 e ϵ_3 são as funções dielétricas dos três meios considerados. $2a$ é a largura e d o comprimento da abertura.	40
4.8	Transmitância e refletância (esquerda) e absorvância (direita) do sistema em função da energia dos fótons para $E_F = 0.5 \text{ eV}$, $\hbar\gamma = 0.004 \text{ eV}$, $a = 0.3 \mu\text{m}$, $d = 0.1 \mu\text{m}$ e $\epsilon_1 = \epsilon_2 = \epsilon_3 = 1$	43
4.9	Parte real da condutividade do grafeno, no intervalo de frequências em que ocorrem os primeiros picos do lado direito da figura 4.8, para $E_F = 0.5 \text{ eV}$ e $\hbar\gamma = 0.004 \text{ eV}$	44
4.10	Valores de $\hbar\omega$ para os quais ocorrem os picos na absorvância do sistema para diversas energias de Fermi do grafeno. Os pontos a vermelho são determinados numericamente a partir do gráfico de A e a linha azul resulta de um ajuste aos pontos. Os parâmetros considerados são $\epsilon_1 = \epsilon_2 = \epsilon_3 = 1, a = 0.3 \mu\text{m}, d = 0.1 \mu\text{m}$ e $\hbar\gamma = 0.004 \text{ eV}$	44

4.11	Perfil dos campos elétricos nas três regiões do espaço para $E_F = 0.5$ eV, $\hbar\gamma = 0.004$ eV, $a = 0.3$ μm , $\hbar\omega = 0.127$ eV, $d = 0.1$ μm e $\epsilon_1 = \epsilon_2 = \epsilon_3 = 1$. A folha de grafeno é representada pela linha branca e a superfície do metal pelas linhas cinzentas. A região a preto é o interior do metal que, sendo perfeito, não tem campos no seu interior.	45
4.12	Transmitância e refletância (esquerda) e absorvância (direita) do sistema em função da energia dos fótons para $E_F = 0.5$ eV, $\hbar\gamma = 0.004$ eV, $a = 0.3$ μm , $d = 3$ μm e $\epsilon_1 = \epsilon_2 = \epsilon_3 = 1$	45
4.13	Transmitância e refletância (esquerda) e absorvância (direita) do sistema em função de a para $\hbar\omega = 0.2$ eV, $E_F = 0.5$ eV, $\hbar\gamma = 0.004$ eV, $d = 0.1$ μm e $\epsilon_1 = \epsilon_2 = \epsilon_3 = 1$	46
4.14	Absorvância do sistema em função de metade da largura, a , e da energia dos fótons para $\epsilon_1 = \epsilon_2 = \epsilon_3 = 1$, $E_F = 0.5$ eV, $\hbar\gamma = 0.004$ eV e $d = 0.1$ μm . No eixo do lado direito dos gráficos podemos ver o comprimento de onda correspondente a cada energia apresentada no eixo do lado esquerdo.	46
4.15	Transmitância e refletância (esquerda) e absorvância (direita) do sistema em função de d para $\hbar\omega = 0.29$ eV, $E_F = 0.5$ eV, $\hbar\gamma = 0.004$ eV, $a = 0.3$ μm e $\epsilon_1 = \epsilon_2 = \epsilon_3 = 1$	47
4.16	Absorvância do sistema em função do comprimento d e da energia dos fótons para $\epsilon_1 = \epsilon_2 = \epsilon_3 = 1$, $E_F = 0.5$ eV, $\hbar\gamma = 0.004$ eV e $a = 0.3$ μm . No eixo do lado direito dos gráficos podemos ver o comprimento de onda correspondente a cada energia apresentada no eixo do lado esquerdo.	47
4.17	Abertura retangular perfurada num metal perfeito (PEC), coberta com duas folhas de grafeno de condutividade $\sigma(\omega)$. O eixo z aponta para fora da folha. ϵ_1 , ϵ_2 e ϵ_3 são as funções dielétricas dos três meios considerados. $2a$ é a largura e d o comprimento da abertura.	48
4.18	Refletância (esquerda) e transmitância (direita) do sistema em função da energia dos fótons para $E_F = 0.5$ eV, $\hbar\gamma = 0.004$ eV, $a = 0.3$ μm , $d = 0.1$ μm e $\epsilon_1 = \epsilon_2 = \epsilon_3 = 1$	49
4.19	Absorvância do sistema em função da energia dos fótons para $E_F = 0.5$ eV, $\hbar\gamma = 0.004$ eV, $a = 0.3$ μm , $d = 0.1$ μm e $\epsilon_1 = \epsilon_2 = \epsilon_3 = 1$	50
4.20	Absorvância do sistema com apenas uma folha de grafeno (linha azul) e com duas folhas de grafeno (linha vermelha) em função da energia dos fótons para $E_F = 0.5$ eV, $\hbar\gamma = 0.004$ eV, $a = 0.3$ μm , $d = 0.1$ μm e $\epsilon_1 = \epsilon_2 = \epsilon_3 = 1$	51
4.21	Perfil dos campos elétricos nas três regiões do espaço para o caso em que as folhas de grafeno têm a mesma condutividade (esquerda) e para o caso em que têm diferentes energias de Fermi (direita). Para o primeiro caso temos $E_F = 0.5$ eV para ambas as folhas de grafeno e para o segundo temos $E_F = 0.5$ eV para a camada que se encontra em $x = 0$ e $E_F = 1$ eV para a camada em $x = d$. Os restantes parâmetros são $\hbar\gamma = 0.004$ eV, $a = 0.3$ μm , $\hbar\omega = 0.1492$ eV (esquerda), $\hbar\omega = 0.1898$ eV (direita), $d = 0.1$ μm e $\epsilon_1 = \epsilon_2 = \epsilon_3 = 1$. As folhas de grafeno são representadas pelas linha brancas e a superfície do metal pelas linhas cinzentas. A região a preto é o interior do metal que, sendo perfeito, não tem campos no seu interior.	51
4.22	Abertura retangular perfurada num metal perfeito (PEC) seguida uma folha de grafeno de condutividade $\sigma(\omega)$ em $x = b$. O eixo z aponta para fora da folha. ϵ_1 , ϵ_2 , ϵ_3 e ϵ_4 são as funções dielétricas dos quatro meios considerados. $2a$ é a largura e d o comprimento da abertura e $(b - d)$ a distância do grafeno ao metal.	52

4.23	Transmitância e refletância (esquerda) e absorvância (direita) do sistema em função da energia dos fótons para $E_F = 0.5$ eV, $\hbar\gamma = 0.004$ eV, $a = 0.3$ μm , $d = 0.1$ μm , $b = 0.11$ μm e $\epsilon_1 = \epsilon_2 = \epsilon_3 = \epsilon_4 = 1$	55
4.24	Valores de $\hbar\omega$ para os quais ocorrem os picos na absorvância do sistema para diversas energias de Fermi do grafeno. Os pontos a vermelho são determinados numericamente a partir do gráfico de A e a linha azul resulta de um ajuste aos pontos. Os parâmetros considerados são $\epsilon_1 = \epsilon_2 = \epsilon_3 = \epsilon_4 = 1$, $a = 0.3$ μm , $d = 0.1$ μm , $b = 0.11$ μm e $\hbar\gamma = 0.004$ eV.	55
4.25	Transmitância e refletância (esquerda) e absorvância (direita) do sistema em função da energia dos fótons para $E_F = 0.5$ eV, $\hbar\gamma = 0.004$ eV, $a = 0.3$ μm , $d = 3$ μm , $b = 3.01$ μm e $\epsilon_1 = \epsilon_2 = \epsilon_3 = \epsilon_4 = 1$	56
4.26	Transmitância e refletância (esquerda) e absorvância (direita) do sistema em função de d para $\hbar\omega = 0.29$ eV, $E_F = 0.5$ eV, $\hbar\gamma = 0.004$ eV, $a = 0.3$ μm , $b = d + 0.01$ μm e $\epsilon_1 = \epsilon_2 = \epsilon_3 = \epsilon_4 = 1$	56
4.27	Transmitância e refletância (esquerda) e absorvância (direita) do sistema em função de b para $\hbar\omega = 0.05$ eV, $E_F = 0.5$ eV, $\hbar\gamma = 0.004$ eV, $a = 0.3$ μm , $d = 0.1$ μm e $\epsilon_1 = \epsilon_2 = \epsilon_3 = \epsilon_4 = 1$	57
4.28	Transmitância e refletância (esquerda) e absorvância (direita) do sistema em função de a para $\hbar\omega = 0.29$ eV, $E_F = 0.5$ eV, $\hbar\gamma = 0.004$ eV, $d = 0.1$ μm , $b = 0.11$ μm e $\epsilon_1 = \epsilon_2 = \epsilon_3 = \epsilon_4 = 1$	57
4.29	Absorvância do sistema em função do parâmetro b e da energia dos fótons para $\epsilon_1 = \epsilon_2 = \epsilon_3 = \epsilon_4 = 1$, $E_F = 0.5$ eV, $\hbar\gamma = 0.004$ eV, $a = 0.3$ μm e $d = 0.1$ μm . No eixo do lado direito dos gráficos podemos ver o comprimento de onda correspondente a cada energia apresentada no eixo do lado esquerdo.	58
4.30	Absorvância do sistema em função do comprimento d e da energia dos fótons para $\epsilon_1 = \epsilon_2 = \epsilon_3 = \epsilon_4 = 1$, $E_F = 0.5$ eV, $\hbar\gamma = 0.004$ eV, $b = d + 0.01$ μm e $a = 0.3$ μm . No eixo do lado direito dos gráficos podemos ver o comprimento de onda correspondente a cada energia apresentada no eixo do lado esquerdo.	58
4.31	Absorvância do sistema em função do parâmetro a e da energia dos fótons para $\epsilon_1 = \epsilon_2 = \epsilon_3 = \epsilon_4 = 1$, $E_F = 0.5$ eV, $\hbar\gamma = 0.004$ eV, $b = 0.11$ μm e $d = 0.1$ μm . No eixo do lado direito dos gráficos podemos ver o comprimento de onda correspondente a cada energia apresentada no eixo do lado esquerdo.	59
5.1	Guia de ondas semi-infinito perfurado num metal perfeito (PEC). O eixo z aponta para fora da folha. ϵ_1 e ϵ_2 são as funções dielétricas dos dois meios considerados. $2a$ é a largura do guia de ondas.	61
5.2	Refletância e transmitância do sistema em função da energia da onda eletromagnética incidente para $\epsilon_1 = \epsilon_2 = 1$ e $a = 0.3$ μm	63
5.3	Perfil espacial dos campos elétricos nos dois meios considerados para $a = 0.3$ μm , $\epsilon_1 = \epsilon_2 = 1$, $\hbar\omega = 0.8$ eV (esquerda) e $\hbar\omega = 0.06$ eV (direita). A superfície do metal é denotada pelas linhas cinzentas.	64

5.4	Guia de ondas semi-infinito perfurado num metal real. O eixo z aponta para fora da folha. ϵ_1 é a função dielétrica no interior do guia de ondas, ϵ_m a função dielétrica do metal e ϵ_2 a função dielétrica do meio abaixo do guia. $2a$ é a largura do guia de ondas.	65
5.5	Modos próprios do guia de ondas perfurado num metal real, para $a = 0.3 \mu m$ e $\epsilon_1 = 1$. ϵ_m corresponde à função dielétrica do ouro que se encontra apresentada no apêndice B. . . .	66
5.6	Refletância e transmitância do sistema em função da energia da onda eletromagnética incidente para $\epsilon_1 = \epsilon_2 = 1$ e $a = 0.3 \mu m$. As linhas a cheio correspondem ao caso em que o metal é real e as linhas tracejadas ao metal perfeito. ϵ_m corresponde à função dielétrica do ouro que se encontra apresentada no apêndice B.	69
5.7	Perfil espacial dos campos elétricos nos dois meios considerados para $a = 0.3 \mu m$, $\epsilon_1 = \epsilon_2 = 1$, $\hbar\omega = 0.8$ eV (esquerda) e $\hbar\omega = 0.06$ eV (direita). A superfície do metal é denotada pelas linhas cinzentas. ϵ_m corresponde à função dielétrica do ouro que se encontra apresentada no apêndice B.	69
5.8	Guia de ondas semi-infinito perfurado num metal perfeito (PEC). O eixo z aponta para fora da folha. ϵ_1 , ϵ_2 e ϵ_3 são as funções dielétricas dos três meios considerados. $2a$ é a largura do guia de ondas e b a distância deste à folha de grafeno de condutividade $\sigma(\omega)$	70
5.9	Esquerda: absorvância em função da energia da radiação para duas energias de Fermi distintas. Direita: refletância e transmitância em função da energia da radiação para duas energias de Fermi distintas. Em ambos os casos temos $\epsilon_1 = 1 = \epsilon_3 = \epsilon_2$, $a = 0.3 \mu m$, $b = 0.01 \mu m$, $\hbar\gamma = 0.004$ eV e $E_F = 0.5$ eV.	73
5.10	Valores de $\hbar\omega$ para os quais ocorrem os picos na absorvância do sistema para diversas energias de Fermi do grafeno. Os pontos a vermelho são determinados numericamente a partir do gráfico de A e a linha azul resulta de um ajuste aos pontos. Os parâmetros considerados são $\epsilon_1 = 1 = \epsilon_3 = \epsilon_2$, $a = 0.3 \mu m$, $b = 0.01 \mu m$ e $\hbar\gamma = 0.004$ eV.	73
5.11	Perfil dos campos elétricos nas várias regiões do espaço para $\epsilon_1 = 1 = \epsilon_3 = \epsilon_2$, $a = 0.3 \mu m$, $b = 0.01 \mu m$, $\hbar\omega = 0.073$ eV, $\hbar\gamma = 0.004$ eV e $E_F = 0.5$ eV. A folha de grafeno é representada pela linha branca e a superfície do metal pelas linhas cinzentas.	74
5.12	Esquerda: absorvância em função da energia da radiação para duas energias de Fermi distintas. Direita: refletância e transmitância em função da energia da radiação para duas energias de Fermi distintas. Em ambos os casos temos $\epsilon_1 = 1 = \epsilon_3 = \epsilon_2$, $a = 0.3 \mu m$, $b = 0.01 \mu m$, $\hbar\gamma = 0.004$ eV e $E_F = 0.5$ eV.	76
5.13	Perfil dos campos elétricos nas várias regiões do espaço para $\epsilon_1 = 1 = \epsilon_3 = \epsilon_2$, $a = 0.3 \mu m$, $b = 0.01 \mu m$, $\hbar\omega = 0.1038$ eV (esquerda), $\hbar\omega = 0.1263$ eV (direita), $\hbar\gamma = 0.004$ eV e $E_F = 0.5$ eV. A folha de grafeno é representada pela linha branca e a superfície do metal pelas linhas cinzentas.	76
5.14	Densidade de probabilidade espacial de excitação de SPP's como função da energia da luz, para $a = 0.3 \mu m$, $b = 0.01 \mu m$, $\epsilon_1 = 1 = \epsilon_2 = \epsilon_3$, $E_F = 0.5$ eV e $\hbar\gamma = 0.004$ eV.	79
5.15	Guia de ondas semi-infinito perfurado num metal real. O eixo z aponta para fora da folha. ϵ_1 , ϵ_2 , ϵ_3 são as funções dielétricas dos três meios considerados e ϵ_m a função dielétrica do metal. $2a$ é a largura do guia de ondas e b a distância deste à folha de grafeno de condutividade $\sigma(\omega)$	79

5.16	Refletância (esquerda) e transmitância (direita) em função da energia da radiação para duas energias de Fermi distintas. As linhas a cheio correspondem às grandezas obtidas no problema em que consideramos o metal perfeito e as linhas tracejado ao caso em que o metal é real. Em ambos os casos temos $\epsilon_1 = 1 = \epsilon_3 = \epsilon_2$, $a = 0.3 \mu m$, $b = 0.01 \mu m$, $\hbar\gamma = 0.004 \text{ eV}$ e $E_F = 0.5 \text{ eV}$. ϵ_m corresponde à função dielétrica do ouro que se encontra apresentada no apêndice B.	81
5.17	Esquerda: absorvância para o caso do metal perfeito (linha a cheio) e do metal real (linha tracejada) em função da energia da radiação para duas energias de Fermi distintas. Direita: valores de $\hbar\omega$ para os quais ocorrem os primeiros picos na absorvância do sistema para diversas energias de Fermi do grafeno. Os pontos a vermelho são determinados numericamente a partir do gráfico de A e a linha azul resulta de um ajuste aos pontos. Os parâmetros considerados são $\epsilon_1 = 1 = \epsilon_3 = \epsilon_2$, $a = 0.3 \mu m$, $b = 0.01 \mu m$ e $\hbar\gamma = 0.004 \text{ eV}$. ϵ_m corresponde à função dielétrica do ouro que se encontra apresentada no apêndice B.	82
5.18	Perfil dos campos elétricos plasmônicos nas várias regiões do espaço para $\epsilon_1 = 1 = \epsilon_3 = \epsilon_2$, $a = 0.3 \mu m$, $b = 0.01 \mu m$, $\hbar\omega = 0.072 \text{ eV}$, $\hbar\gamma = 0.004 \text{ eV}$ e $E_F = 0.5 \text{ eV}$. ϵ_m corresponde à função dielétrica do ouro que se encontra apresentada no apêndice B. A folha de grafeno é representada pela linha branca e a superfície do metal pelas linhas cinzentas.	82
5.19	Guia de ondas semi-infinito perfurado num metal perfeito (PEC). O eixo z aponta para fora da folha. ϵ_1 e ϵ_2 são as funções dielétricas dos dois meios considerados. $2a$ é a largura do guia de ondas e a folha de grafeno de condutividade $\sigma(\omega)$ é representada pela linha vermelha.	83
5.20	Esquerda: refletância e transmitância em função da energia da radiação para duas energias de Fermi distintas. Direita: absorvância em função da energia da radiação para duas energias de Fermi distintas. Em ambos os casos temos $\epsilon_1 = 1 = \epsilon_2$, $a = 0.3 \mu m$, $\hbar\gamma = 0.004 \text{ eV}$ e $E_F = 0.5 \text{ eV}$	85
5.21	Valores de $\hbar\omega$ para os quais ocorrem os picos na absorvância do sistema para diversas energias de Fermi do grafeno. Os pontos a vermelho são determinados numericamente a partir do gráfico de A e a linha azul resulta de um ajuste aos pontos. Os parâmetros considerados são $\epsilon_1 = 1 = \epsilon_2$, $a = 0.3 \mu m$ e $\hbar\gamma = 0.004 \text{ eV}$	86
5.22	Esquerda: refletância e transmitância em função da energia da radiação para duas energias de Fermi distintas. Direita: absorvância em função da energia da radiação para duas energias de Fermi distintas. Em ambos os casos temos $\epsilon_1 = 1 = \epsilon_2$, $a = 0.3 \mu m$, $\hbar\gamma = 0.004 \text{ eV}$ e $E_F = 0.5 \text{ eV}$	87
5.23	Perfil dos campos elétricos nas várias regiões do espaço para $\epsilon_1 = 1 = \epsilon_2$, $a = 0.3 \mu m$, $\hbar\omega = 0.126 \text{ eV}$, $\hbar\gamma = 0.004 \text{ eV}$ e $E_F = 0.5 \text{ eV}$. A folha de grafeno é representada pela linha branca e a superfície do metal pelas linhas cinzentas. A figura da esquerda corresponde à consideração de dois modos e a da direita de três modos.	88
5.24	Perfil dos campos elétricos plasmônicos nas várias regiões do espaço para $\epsilon_1 = 1 = \epsilon_2$, $a = 0.3 \mu m$, $\hbar\omega = 0.126 \text{ eV}$, $\hbar\gamma = 0.004 \text{ eV}$ e $E_F = 0.5 \text{ eV}$. A folha de grafeno é representada pela linha branca e a superfície do metal pelas linhas cinzentas.	90
B.1	Função dielétrica do ouro utilizada no presente trabalho em função da energia da luz. O painel esquerdo corresponde à parte real desta função e o direito à parte imaginária.	97

Lista de Abreviaturas

DLG *Double Layer Graphene* (Dupla Camada de Grafeno)

PEC *Perfect Electric Conductor* (Condutor Elétrico Perfeito)

SLG *Single Layer Graphene* (Camada Única de Grafeno)

SPP *Surface Plasmon Polariton* (Plasmão Polaritão de Superfície)

u.a. Unidades Arbitrárias

1

Introdução

1.1 Estado da Arte

O fenômeno de difração de ondas eletromagnéticas em aberturas metálicas tem sido amplamente estudado ao longo dos anos [1]- [15]. Recorrendo à expansão em modos de Fourier dos campos eletromagnéticos difratados e ao acoplamento destes aos modos da cavidade, é possível obter soluções analíticas computacionalmente eficientes [1]. Os problemas de espalhamento a partir de uma única abertura são fundamentais, na medida em que funcionam como base para aqueles em que estão presentes múltiplas cavidades, exibindo estes últimos muito mais alta eficiência de transmissão ótica para as mesmas frequências. Estas ressonâncias de magnitude elevada na transmitância do sistema têm importantes aplicações tecnológicas, como por exemplo a fotolitografia [16]. Além disto, Fernández-Domínguez et al. [17] demonstraram que quando a posição destes máximos é próxima do período da rede, ela é extremamente influenciada pelo número de fendas perfuradas no metal. Se considerarmos que o diâmetro das aberturas é muito inferior ao comprimento de onda da radiação incidente, gera-se um fenômeno conhecido como transmissão ótica extraordinária [18, 19], no qual a quantidade de energia transmitida através das aberturas é muito superior à esperada para a gama ótica em questão, sendo por isso observados picos bem definidos no espectro da transmitância.

Analisando mais detalhadamente o problema de uma única abertura, vemos que podemos estudar a dependência das suas propriedades óticas com múltiplos parâmetros, todos eles manipuláveis experimentalmente, como a largura e comprimento da mesma, meio dielétrico colocado no seu interior, frequência da radiação incidente, ângulo de incidência, etc. Bravo-Abad et al. [20] focam-se precisamente na variação do ângulo de incidência, na largura da fenda e no índice de refração da cavidade. Nesta referência, é discutido o facto de que no regime em que a largura da abertura é muito menor que o comprimento de onda da radiação, as ressonâncias que surgem nos gráficos da transmitância são devidas à excitação de modos guiados dentro da cavidade. Além disto, a largura destas ressonâncias e a intensidade dos campos elétricos, estão diretamente relacionados com a largura da abertura. São também observadas ressonâncias de Fabry-Perot [13, 14, 21, 22] para incidência normal. Contudo, quando esta largura é comparável ao comprimento de onda, surgem rápidas oscilações no espectro da transmitância para comprimentos de onda em que determinados modos da abertura se tornam propagantes. Verifica-se também uma variação

das frequências das referidas ressonâncias com o índice de refração do material no interior da abertura.

Este problema pode tornar-se ainda mais interessante se incluirmos uma folha de grafeno nas proximidades do metal, na medida em que desta forma é possível excitar plasmões polaritões na superfície do mesmo [23, 24]. Estes últimos correspondem a ondas eletromagnéticas que se acoplam a oscilações de carga dos elétrons da banda de condução e que se propagam na interface entre um dielétrico/ar e um condutor [25, 26]. Relativamente aos SPP's dos metais [27], os do grafeno têm como vantagem o facto de terem um maior tempo de vida, um mais elevado grau de confinamento [28–30] sendo ainda passíveis de sintonização química e eletrónica [31–33]. A sintonização eletrónica é efetuada com recurso a uma diferença de potencial V_g , aplicada entre o grafeno e uma placa condutora, formando assim um condensador de placas paralelas, no qual o campo elétrico é dado por $E = V_g/d$, onde d é a distancia entre as placas. Recordando a lei de Gauss do eletromagnetismo sabemos que $E = n_e e / \epsilon_0$, sendo n_e a densidade eletrónica, e a carga do eletrão e ϵ_0 a permitividade do vácuo. Ora isto permite-nos obter que $n_e = \frac{V_g \epsilon_0}{ed}$ e tendo em conta que a energia de Fermi do grafeno varia com $\sqrt{n_e}$ vemos que é possível controlar o seu valor variando o valor da tensão aplicada ao sistema. Ren et al. [34] recorrem à espectroscopia terahertz e infravermelha para modular a energia de Fermi de uma folha de grafeno com um centímetro, conseguindo obter resultados que demonstram as funcionalidades chave dos aparelhos de grafeno de larga área na optoeletrónica dos terahertz e infravermelho. O grafeno é também excelente para a construção de moduladores [35] eletro-absorventes [36], capazes de controlar extraordinariamente a refletância da radiação terahertz. Estes aparelhos conseguem atingir uma profundidade de modulação de 64% com perdas mínimas, concentrando a intensidade do campo elétrico na camada de grafeno. Ainda na mesma região do espetro eletromagnético, este material é útil na construção de biossensores, pois introduzindo-o numa cavidade de metamaterial absorvente nos THz e inserindo nela os alvos de deteção, a ressonância de absorção da cavidade sofre uma grande alteração devido à forte interação destes alvos com o grafeno [37].

Estas são apenas algumas das razões pelas quais este material bidimensional isolado em 2004 por Novoselov et al. [38] é alvo de tanto interesse atualmente. O mesmo apresenta notáveis propriedades óticas, mecânicas e eletrónicas [39–44], tendo por isso, aplicações diversas como biossensores óticos [45], nanoantenas óticas [46] e processamento de informação quântica [47].

Assim, este problema de difração de ondas eletromagnéticas a partir de uma abertura metálica coberta com uma folha de grafeno é de importante estudo, na medida em que é uma nova forma de excitar plasmões de superfície no grafeno, principlamente, se ao invés de uma onda plana, considerarmos a incidência de um pacote de ondas, cujo acoplamento aos campos plasmónicos é mais eficiente [28].

Um problema muito semelhante que também possibilita a excitação de SPP's numa folha de grafeno é a difração de um modo de um guia de ondas semi-infinito [48]. Desta forma, cobrindo o guia com o material 2D, o espalhamento da onda emergente nas extremidades da abertura dá origem a modos eletromagnéticos entre a folha de grafeno e o metal, cujo acoplamento ao grafeno corresponde aos plasmões.

Além disto, o grafeno colocado após o metal (isto é, a uma certa distância da abertura) comporta-se como um guia de ondas aberto, suportando por isso modos radiativos e plasmónicos [48, 49]. Expandido então os campos como combinações lineares destes modos é possível obter a densidade de probabilidade espacial de excitar plasmões.

O estudo de problemas de espalhamento num guia de ondas é também muito conhecido na literatura tanto para um metal perfeito como para um metal real [49–52]. Sturman et al. [51] consideram precisamente este sistema com o metal perfeito e têm em conta duas situações distintas: uma em que a onda

incidente vem de dentro da cavidade e é o modo fundamental da mesma e outra em que a onda incidente vem de fora do guia de ondas. Os autores desenvolvem um método semi-analítico para a resolução do problema e mostram que os cálculos associados à incidência do modo fundamental da abertura se reduz ao problema da onda vinda do exterior com incidência normal. Com isto, estudam então as grandezas associadas a um problema de difração em função do ângulo de incidência e do comprimento de onda da radiação. São também reportadas ressonâncias de Fabry-Perot. Além disto, é referido que o problema estudado serve como base à análise daquele em que se considera uma estrutura periódica de aberturas [53] e ao caso do metal real com uma função dielétrica complexa [52].

Lalanne et al. [49, 50] também analisam estes mesmos problemas para o caso em que o metal é real, mas levam a cabo um estudo mais detalhado da geração de plasmões nas interfaces metal-dielétrico. A sua análise é suportada por um formalismo teórico baseado na técnica de decomposição em modos normais do sistema (modos radiativos e plasmônicos) e por um modelo semi-analítico que providencia fórmulas precisas para a probabilidade de excitação de plasmões. Os seus resultados estão em excelente acordo com os experimentais, mesmo para metais nobres com baixa condutividade, como é o caso do ouro na região visível do espectro, para os quais foi demonstrado que existe um maior fração da radiação incidente que se acopla aos modos plasmônicos. Deve notar-se que estes plasmões que se formam na interface dielétrico-metal têm uma energia muito superior aos SPP's no grafeno, uma vez que como referido no caso do ouro está na região visível, enquanto que para o grafeno a excitação ocorre para a gama do infravermelho médio e dos THz. Lalanne et al. [54–56] alargam o estudo da formação de SPP's a uma rede de múltiplas fendas, onde mostram, que os plasmões estão na base do fenómeno da transmissão ótica extradionária, referido acima.

1.2 Estrutura do Presente Trabalho

Neste trabalho estudamos o processo de difração de radiação eletromagnética em aberturas metálicas, tendo como base alguns dos problemas descritos acima. Consideramos então dois problemas centrais: uma abertura retangular perfurada num metal perfeito (PEC) e um guia de ondas retangular semi-infinito. Começamos por considerar a transmissão de ondas através destes sistemas simples e posteriormente, adicionamos uma folha de grafeno a cada um e estudamos duas configurações, uma em que a folha está suspensa diretamente nas estruturas metálicas e outra em que é inserida a uma determinada distância das mesmas. O objetivo nestes últimos casos é então obter a excitação de plasmões polaritões de superfície no grafeno, por meio da difração das ondas eletromagnéticas.

Com isto, torna-se também importante fazer um estudo dos modos plasmônicos do grafeno, tanto para uma folha isolada, como para uma nas proximidades de um metal. Assim, consideramos também estes dois problemas, de forma a obter as relações de dispersão dos SPP's e a representar o perfil espacial dos campos elétricos. É importante referir que estamos apenas interessados nos modos com polarização TM, pois são estes que são responsáveis pela excitação de SPP's no grafeno.

Resolvendo então as equações de Maxwell e aplicando as condições fronteira apropriadas, conseguimos obter a relação de dispersão dos plasmões e as relações entre os coeficientes dos campos eletromagnéticos. Esta correspondência entre o momento do plasmão e a sua energia mostra-nos que a assinatura destas quasi-partículas é o facto da sua frequência variar com a raiz quadrada da energia de Fermi do grafeno. Quanto à representação gráfica dos campos, temos apenas que escolher uma frequência e obter o respetivo

momento por meio da relação de dispersão.

Quanto ao primeiro problema, consideramos a incidência normal de um pacote de ondas, localizado no espaço e contendo apenas momentos de modos propagantes, na referida abertura metálica. Este problema é tratado resolvendo a equação de Helmholtz nas várias regiões do espaço de forma a obter os campos. Aplicando em seguida as condições fronteira electromagnéticas, podemos determinar a relação entre os campos nas várias regiões espaciais do sistema. Posteriormente, para podermos quantificar a energia que é refletida e a que é transmitida, calculamos os vetores de Poynting respetivos, que nos permitem obter a refletância e a transmitância. Sendo o metal perfeito, não existem perdas de energia e consequentemente a absorvância é nula.

Em segundo lugar, consideramos os casos com a folha de grafeno inserida no sistema, que se resolvem de uma maneira muito semelhante ao inicial, mas tendo em conta a condutividade do grafeno nas condições fronteira. A presença deste material manifesta-se por meio da absorvância, que passa a ter um valor finito. A excitação de SPP's no material é verificada pela dispersão dos máximos da absorvância com a energia de Fermi do grafeno. Temos então um pacote de ondas que ao ser difratado nas bordas do metal se acopla aos modos da cavidade, dando origem a ondas evanescentes na superfície do grafeno.

Em terceiro e último lugar, temos o problema do guia de ondas semi-infinito. O que difere neste caso, é o facto da onda incidente ser um modo que já se propaga no interior da abertura metálica. O modo escolhido do guia de ondas é o fundamental, tendo portanto um momento bem definido, ao invés do pacote de ondas. O procedimento a adotar para resolver o problema é o mesmo que o anterior. Além disto, consideramos também uma pequena variação do sistema, em que o metal do guia de ondas é real em vez de perfeito e efetuamos uma breve comparação entre os resultados obtidos para os dois metais.

Assim, neste terceiro problema, temos o modo fundamental do guia de ondas a sofrer difração à saída do mesmo, o que provoca a excitação dos plasmões no grafeno.

A estrutura do trabalho é a seguinte: está dividido em 6 capítulos, sendo este o primeiro. No segundo, fazemos uma breve revisão das equações de Maxwell na forma diferencial e integral e uma derivação das condições fronteira que delas advêm. Além disto, analisamos também o modelo de Drude-Lorentz, que nos permite obter uma expressão matemática para a condutividade de Drude do grafeno. Passando para o capítulo 3, fazemos uma derivação das relações de dispersão de uma folha de grafeno, tanto isolada como nas proximidades de um metal e em seguida, representamos graficamente os campos evanescentes dos problemas. Consideramos também o caso da dupla camada de grafeno inserida entre meios dielétricos.

No quarto capítulo começa a parte mais importante do trabalho, aquela em que iniciamos o estudo dos problemas de difração. Primeiramente, consideramos o espalhamento de um pacote de ondas apenas numa abertura metálica perfurada num metal perfeito. Em seguida temos mais dois sistemas: primeiro colocamos apenas uma folha de grafeno na base da abertura e posteriormente, acrescentamos outra folha de grafeno no topo da mesma, de forma a existirem duas folhas de grafeno a cobrir completamente a cavidade. Finalmente, consideramos o caso em que temos apenas uma folha de grafeno inserida a uma determinada distância da estrutura metálica. Em todas as secções deste capítulo são calculadas a refletância, transmitância e absorvância do sistema, ou seja, as quantidades mais relevantes no problema de espalhamento. O mesmo se aplica ao capítulo posterior.

No capítulo 5, consideramos então a difração do modo fundamental de um guia de ondas em 5 sistemas diferentes: os dois primeiros são apenas o guia de ondas num metal perfeito e num metal real, respetivamente; os dois sistemas que se seguem são iguais aos anteriores, mas com uma folha de grafeno

posicionada após o metal; para o caso do metal perfeito avaliamos a eficiência de excitação de plasmões; o último sistema é novamente o guia de ondas num metal perfeito, mas com uma folha de grafeno à saída da abertura. Finalmente, temos o sétimo capítulo, dedicado à discussão das conclusões que podemos retirar do trabalho realizado.

2

Eletrodinâmica de Metais

Neste capítulo pretendemos fazer uma breve introdução aos conceitos fundamentais que estão na base do desenvolvimento do presente trabalho. Princípios com a introdução das equações de Maxwell e das suas condições fronteira numa interface entre dois meios distintos. Além disto, efetuamos também um breve estudo do modelo de Drude-Lorentz, que nos permite obter a função dielétrica de um sistema eletrónico e, finalmente, aplicamos este modelo aos eletrões do grafeno para assim obter a sua condutividade, a qual será útil no decorrer do trabalho.

2.1 Equações de Maxwell e Condições Fronteira

Neste trabalho estudamos o problema de espalhamento de ondas eletromagnéticas em diferentes sistemas. Assim, é útil começar por introduzir as equações de Maxwell na sua forma diferencial, em meios dielétricos lineares, homogêneos e isotrópicos. Nestes meios o vetor deslocamento elétrico (\mathbf{D}) relaciona-se com o campo elétrico (\mathbf{E}) por meio da equação constitutiva $\mathbf{D} = \epsilon\epsilon_0\mathbf{E}$, onde ϵ é a função dielétrica do meio considerado e ϵ_0 a permissividade do vácuo. Por sua vez, a indução magnética (\mathbf{B}) relaciona-se com o campo magnético (\mathbf{H}) pela equação constitutiva $\mathbf{B} = \mu\mu_0\mathbf{H}$, onde μ é a permeabilidade magnética relativa do meio e μ_0 a permeabilidade magnética do vácuo. Como vamos apenas considerar meios não magnéticos, daqui para a frente consideraremos $\mu = 1$.

Começamos então com as quatro equações de Maxwell:

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho \quad (2.1)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (2.2)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\partial_t \mathbf{B} \quad (2.3)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{J} + \partial_t \mathbf{D} \quad (2.4)$$

onde \mathbf{J} é a densidade de corrente elétrica e ρ a densidade volúmica de carga elétrica.

A primeira equação codifica a lei de Gauss e relaciona um campo elétrico estático com as cargas elétricas que lhe dão origem. A segunda é conhecida como a lei de Gauss para o magnetismo e mostra que não existem monopolos magnéticos. A terceira equação é a lei de indução de Faraday que descreve

o aparecimento de um campo elétrico a partir da variação temporal de um campo magnético. Por fim, temos a lei de Ampère-Maxwell que estabelece a criação de um campo magnético a partir de uma corrente elétrica ou da variação temporal de um campo elétrico.

Como no seguimento deste trabalho apenas vamos considerar ondas eletromagnéticas com polarização TM, optamos por escrever e resolver a equação de onda em termos do campo magnético. Para tal, começamos por fazer o rotacional da equação (2.4) para corrente elétrica nula:

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{H} = \partial_t \nabla \times \mathbf{D} \quad (2.5)$$

$$\Leftrightarrow \nabla(\nabla \cdot \mathbf{H}) - \nabla^2 \mathbf{H} = \partial_t \nabla \times \mathbf{D} \quad (2.6)$$

e tendo agora em conta as equações (2.2) e (2.3) chegamos à equação de onda para o campo magnético:

$$\nabla^2 \mathbf{H} - \mu_0 \epsilon_0 \epsilon \partial_t^2 \mathbf{H} = 0. \quad (2.7)$$

$$\Leftrightarrow \nabla^2 \mathbf{H} - \frac{\epsilon}{c^2} \partial_t^2 \mathbf{H} = 0. \quad (2.8)$$

sendo c a velocidade da luz no vácuo.

Se considerarmos que a dependência temporal dos campos é harmónica e dada pela função $e^{-i\omega t}$, ficamos com a equação de Helmholtz, na qual o campo tem apenas dependência espacial:

$$\left(\nabla^2 + \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon \right) \mathbf{H} = 0. \quad (2.9)$$

Com esta equação podemos obter o campo magnético em cada um dos meios que iremos considerar e seguidamente, utilizar a equação (2.4), para $\mathbf{J} = 0$, na forma

$$\mathbf{E} = \frac{i\mu_0 c^2}{\omega \epsilon} \nabla \times \mathbf{H}, \quad (2.10)$$

para obter o respetivo campo elétrico.

Além disto, é também necessário relacionar os campos elétrico e magnético dos diferentes meios. Para isso, são necessárias as condições fronteira que derivam das equações de Maxwell na sua forma integral. Estas são:

$$\oint_S \mathbf{D} \cdot d\mathbf{A} = \int_V \rho d^3\mathbf{r} \quad (2.11)$$

$$\oint_S \mathbf{B} \cdot d\mathbf{A} = 0 \quad (2.12)$$

$$\oint_C \mathbf{E} \cdot d\mathbf{l} = -\partial_t \int_S \mathbf{B} \cdot d\mathbf{A} \quad (2.13)$$

$$\oint_C \mathbf{H} \cdot d\mathbf{l} = \int_S (\mathbf{J} + \partial_t \mathbf{D}) \cdot d\mathbf{A}, \quad (2.14)$$

sendo que nas primeiras duas equações, S é uma superfície fechada que engloba um volume V e $d\mathbf{A}$ o vetor normal à superfície S que define o elemento de área e aponta para o exterior do volume. Já nas duas últimas equações, C define um contorno fechado que engloba uma superfície S aberta, $d\mathbf{l}$ o vetor tangencial a C que define o elemento de linha e $d\mathbf{A}$ o vetor normal à superfície aberta que define o elemento de área e cujo sentido é dado de acordo com a regra da mão direita, dependendo do sentido de integração do contorno.

De seguida, pretendemos obter as condições fronteira a que os campos eletromagnéticos devem obedecer na interface entre dois meios dielétricos distintos, de funções dielétricas ϵ_1 e ϵ_2 . Vamos considerar que a interface tem uma densidade superficial de carga σ e uma densidade superficial de corrente \mathbf{K} . Além disto, o versor $\hat{\mathbf{n}}$ normal a esta interface aponta do meio 2 para o 1. Esta derivação é feita a partir das equações de Maxwell na sua forma integral.

Para o caso das equações (2.11) e (2.12), começamos por considerar a superfície cilíndrica fechada S , representada na figura 2.1, composta pelas superfícies S_1 , S_2 e S_3 . Esta superfície engloba uma caixa de volume V que tem altura h .

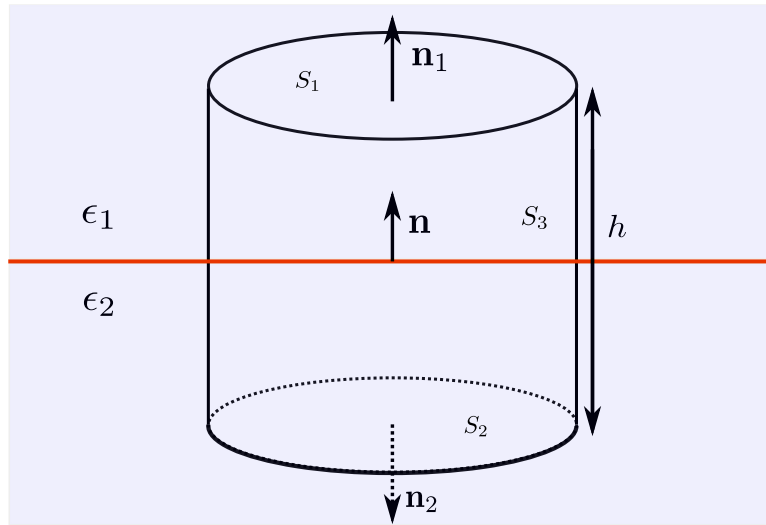


Figura 2.1: Superfície cilíndrica fechada S composta pelas superfícies abertas S_1 , S_2 e S_3 . h é a altura do cilindro. $\hat{\mathbf{n}}$ é o versor normal à interface que separa os dois meios distintos de funções dielétricas ϵ_1 e ϵ_2 . $\hat{\mathbf{n}}_1$ e $\hat{\mathbf{n}}_2$ são os versores normais às superfícies S_1 e S_2 , respetivamente.

Consideramos também que as áreas de S_1 e S_2 são iguais, dadas por ΔA e que $d\mathbf{A}_i = \hat{\mathbf{n}}_i \Delta A$, onde $i = 1, 2$. No limite em que $h \rightarrow 0$, a contribuição da superfície S_3 para o integral é nula. Utilizando o lado esquerdo da equação (2.11) e aplicando-o a S , no limite em que ΔA é infinitesimal, temos:

$$\oint_S \mathbf{D} \cdot d\mathbf{A} = \int_{S_1} \mathbf{D}_1 \cdot d\mathbf{A}_1 + \int_{S_2} \mathbf{D}_2 \cdot d\mathbf{A}_2 = (\mathbf{D}_1 - \mathbf{D}_2) \cdot \hat{\mathbf{n}} \Delta A \quad (2.15)$$

uma vez que o campo elétrico é constante na superfície de integração. Já o lado direito da mesma equação resulta em

$$\int_V \rho d^3\mathbf{r} = \sigma \Delta A. \quad (2.16)$$

Assim, temos a condição fronteira a que a componente normal do campo elétrico deve obedecer na interface considerada:

$$\Rightarrow D_{1n} - D_{2n} = \sigma \quad (2.17)$$

e por consequência, aplicando o mesmo procedimento à equação (2.12) chegamos à condição para a componente normal do campo magnético

$$\Rightarrow B_{1n} - B_{2n} = 0. \quad (2.18)$$

Por outro lado, para as equações (2.13) e (2.14) consideramos um contorno retangular C , representado na figura 2.2, composto pelas linhas C_1 , C_2 , C_3 e C_4 , estando C_1 e C_2 nos meios 1 e 2, respetivamente.

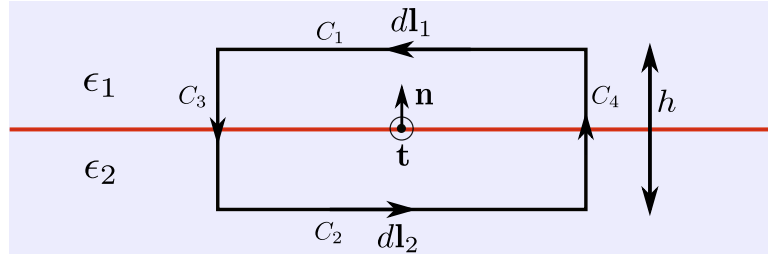


Figura 2.2: Contorno fechado C composto pelos contornos abertos C_1 , C_2 , C_3 e C_4 . $\hat{\mathbf{n}}$ é o versor normal à interface que separa os dois meios distintos de funções dielétricas ϵ_1 e ϵ_2 e $\hat{\mathbf{t}}$ o versor tangencial a esta interface e normal à superfície aberta englobada pelo contorno C , que aponta para fora da folha. $d\mathbf{l}_1$ e $d\mathbf{l}_2$ são os vetores tangenciais aos contornos C_1 e C_2 , respetivamente, e h a largura de C .

Consideramos ainda que o comprimento de C é Δl e a sua largura é h . Mais uma vez consideramos o limite em que $h \rightarrow 0$ e portanto C_3 e C_4 não contribuem para o integral. Consideramos também que Δl é infinitesimal e conseqüentemente, \mathbf{E} e \mathbf{H} tornam-se constantes no contorno de integração. Podemos então escrever para o lado esquerdo de (2.14):

$$\oint_C \mathbf{H} \cdot d\mathbf{l} = \int_{C_1} \mathbf{H}_1 d\mathbf{l}_1 + \int_{C_2} \mathbf{H}_2 d\mathbf{l}_2 = (\mathbf{H}_1 - \mathbf{H}_2) \cdot d\mathbf{l}. \quad (2.19)$$

Notamos agora que $d\mathbf{l} = (\hat{\mathbf{t}} \times \hat{\mathbf{n}})\Delta l$, sendo que $\hat{\mathbf{t}}$ é o vetor normal à superfície englobada pelo contorno C e cujo sentido é dado pela regra da mão direita, de acordo com o sentido de integração do contorno, dado por $d\mathbf{l}$. Isto permite então escrever a equação anterior como:

$$(\mathbf{H}_1 - \mathbf{H}_2) \cdot (\hat{\mathbf{t}} \times \hat{\mathbf{n}})\Delta l = \hat{\mathbf{t}} \cdot (\hat{\mathbf{n}} \times (\mathbf{H}_1 - \mathbf{H}_2))\Delta l. \quad (2.20)$$

Já para o lado direito de (2.14) temos

$$\int_S \mathbf{J} \cdot d\mathbf{A} = \mathbf{J} \cdot \hat{\mathbf{t}}\Delta A = \mathbf{K} \cdot \hat{\mathbf{t}}\Delta l \quad (2.21)$$

É de notar que o termo com a derivada temporal não está presente na equação anterior pois é nulo, uma vez que $\Delta A \rightarrow 0$ mas $\partial_t \mathbf{D}$ é finito.

Igualando então os resultados obtidos chegamos à condição fronteira para as componentes tangenciais do campo magnético

$$\Rightarrow \mathbf{H}_{1t} - \mathbf{H}_{2t} = \mathbf{K} \times \hat{\mathbf{n}} \quad (2.22)$$

e de forma análoga à condição para as componentes tangenciais do campo elétrico.

$$\Rightarrow \mathbf{E}_{1t} - \mathbf{E}_{2t} = 0 \quad (2.23)$$

Em síntese, temos então as quatro condições fronteira:

$$\left\{ \begin{array}{l} D_{1n} - D_{2n} = \sigma \\ B_{1n} - B_{2n} = 0 \\ \mathbf{H}_{1t} - \mathbf{H}_{2t} = \mathbf{K} \times \hat{\mathbf{n}} \\ \mathbf{E}_{1t} - \mathbf{E}_{2t} = 0, \end{array} \right. \quad (2.24)$$

nas quais podemos verificar que a componente do campo magnético normal à interface e as componentes tangenciais do campo elétrico devem ser contínuas na interface entre os dois meios. Já a componente do campo elétrico normal à interface apresenta uma descontinuidade proporcional à densidade de carga superficial da mesma e as componentes tangenciais do campo magnético uma descontinuidade proporcional à densidade de corrente de superfície.

2.2 Modelo de Drude-Lorentz

Nesta secção fazemos um breve estudo do modelo de Drude-Lorentz por forma a obter a função dielétrica de um sistema composto por elétrons ligados a núcleos atômicos na presença de um campo elétrico dependente do tempo.

Este modelo considera os elétrons ligados como osciladores harmônicos forçados e amortecidos. Portanto, a equação de movimento de um elétron será

$$m_e \ddot{\mathbf{r}}(t) = -m_e \omega_0^2 \mathbf{r}(t) - m_e \gamma \dot{\mathbf{r}}(t) - e \mathbf{E}(t) \quad (2.25)$$

sendo e o módulo da carga do elétron, m_e a sua massa efetiva, $\mathbf{E}(t)$ o campo elétrico aplicado, ω_0 a frequência natural de oscilação dos elétrons e γ a constante de amortecimento. Considerando que o campo elétrico apresenta uma dependência temporal harmónica da forma $\mathbf{E}(t) = \mathbf{E}_0(\omega)e^{-i\omega t}$, podemos propor para solução da equação diferencial $\mathbf{r}(t) = \mathbf{r}_0(\omega)e^{-i\omega t}$, sendo $\mathbf{E}_0(\omega)$ a amplitude do campo elétrico e $\mathbf{r}_0(\omega)$ uma variável a determinar. Substituindo esta proposta de solução na equação 2.25 e resolvendo para $\mathbf{r}_0(\omega)$ chegamos a

$$\Rightarrow \mathbf{r}_0(\omega) = \frac{e \mathbf{E}_0(\omega)}{m_e} \frac{1}{\omega^2 + i\gamma\omega - \omega_0^2}. \quad (2.26)$$

Tendo o vetor posição \mathbf{r} , podemos facilmente obter a polarização do sistema. Esta apresenta não só uma dependência neste vetor, como também no campo elétrico, por meio da suscetibilidade elétrica:

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{P} = -n_e e \mathbf{r} \\ \mathbf{P} = \epsilon_0 \chi \mathbf{E} \end{array} \right. \quad (2.27)$$

onde n_e é a densidade eletrónica e χ a suscetibilidade elétrica do sistema.

Como vimos anteriormente, \mathbf{r} depende do campo elétrico aplicado por meio da equação (2.26) e portanto, podemos obter uma expressão para a suscetibilidade, igualando as duas equações para a polarização:

$$\Rightarrow \chi(\omega) = \frac{n_e e^2}{m_e \epsilon_0} \frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\gamma\omega}. \quad (2.28)$$

Sabendo que a relação entre a função dielétrica e a suscetibilidade é $\epsilon(\omega) = \chi(\omega) + 1$ obtemos imediatamente

$$\Rightarrow \epsilon(\omega) = 1 + \frac{\omega_P^2}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\gamma\omega}, \quad \omega_P^2 = \frac{n_e e^2}{m_e \epsilon_0}. \quad (2.29)$$

Esta é a função dielétrica do sistema eletrônico, sendo ω_P a frequência de plasma.

Este modelo reduz-se ao de Drude no caso em que consideramos que os elétrons não se encontram ligados aos núcleos atômicos, mas que se movem livremente num metal, colidindo com os núcleos a uma taxa $1/\tau = \gamma$, sendo τ o tempo de relaxação. Assim, fazendo $\omega_0 = 0$, a função dielétrica reduz-se a:

$$\epsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_P^2}{\omega^2 + i\gamma\omega}. \quad (2.30)$$

É importante agora derivar a equação de Helmholtz na presença de correntes elétricas, com o intuito de obter uma relação entre a função dielétrica e a condutividade do sistema.

Começamos então por fazer o rotacional da equação (2.3) e, em simultâneo, utilizar a equação (2.4) (com $\epsilon = 1$) para assim escrevermos:

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{E} = -\partial_t \nabla \times \mathbf{B} = -\mu_0 \partial_t \mathbf{J} - \mu_0 \epsilon_0 \partial_t^2 \mathbf{E}. \quad (2.31)$$

Utilizando agora a lei de Ohm que relaciona a densidade de corrente elétrica com o campo elétrico, $\mathbf{J} = \sigma \mathbf{E}$, e recorrendo à dependência harmónica dos campos anteriormente referida, chegamos à equação de Helmholtz num meio condutor, em que surgiu uma função dielétrica dependente da frequência:

$$\Leftrightarrow \left[\nabla^2 + \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon(\omega) \right] \mathbf{E} = 0 \quad (2.32)$$

sendo esta dada por

$$\epsilon(\omega) = 1 + \frac{i\sigma(\omega)}{\epsilon_0 \omega}. \quad (2.33)$$

Podemos então obter uma expressão para a condutividade de Drude, igualando a equação (2.30) a (2.33)

$$\Rightarrow \sigma(\omega) = \frac{\epsilon_0 \omega_P^2}{\gamma - i\omega} = \frac{n_e e^2}{m_e} \frac{1}{\gamma - i\omega}. \quad (2.34)$$

Com isto, importa agora obter uma expressão para a condutividade de Drude do grafeno, utilizada posteriormente no presente trabalho. Para tal, começamos por considerar a energia cinética dos elétrons, $E = \pm \hbar v_F k$, onde v_F é a velocidade de Fermi e k o módulo do vetor de onda \mathbf{k} . Além disto, a densidade de elétrons no sistema é dada por (considerando o spin e a existência de dois cones de Dirac)

$$n_e = \frac{N_e}{A} = 2 \times 2 \int \frac{d^2 \mathbf{k}}{(2\pi)^2} \Theta(k_F - k) = \frac{k_F^2}{\pi} \quad (2.35)$$

$$\Leftrightarrow n_e = \frac{E_F^2}{\pi \hbar^2 v_F^2} \quad (2.36)$$

sendo o integral anterior resolvido em coordenadas polares, k_F o módulo do vetor de onda de Fermi e $\Theta(k_F - k)$ a função de Heaviside que restringe os \mathbf{k} 's à esfera de Fermi. Note-se que na equação anterior fizemos a substituição de k_F em função da energia de Fermi (E_F), utilizando a expressão da energia cinética.

Deste modo, podemos substituir n_e em (2.34) para assim obter

$$\Rightarrow \sigma(\omega) = \frac{E_F^2 e^2}{\pi \hbar^2 v_F^2 m_e} \frac{1}{\gamma - i\omega}. \quad (2.37)$$

É agora necessário calcular a massa efetiva dos elétrons, m_e , que no caso do grafeno é representada por m_D , a massa de Drude. Para tal, notamos que o momento linear de Fermi é $p_F = \hbar k_F \approx m_D v_F$ e portanto,

$$m_D = \frac{\hbar k_F}{v_F} = \frac{E_F}{v_F^2}. \quad (2.38)$$

Chegamos então à condutividade do grafeno na forma:

$$\sigma(\omega) = \frac{E_F e^2}{\pi \hbar^2} \frac{1}{\gamma - i\omega} \quad (2.39)$$

que pode ser convenientemente escrita em termos da constante de estrutura fina $\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} \approx 1/137$:

$$\sigma(\omega) = \frac{4\alpha c \epsilon_0}{\hbar} \frac{E_F}{\gamma - i\omega}. \quad (2.40)$$

Derivamos assim a condutividade de Drude de uma folha de grafeno que será útil no decorrer no trabalho.

Por fim, é importante referir que esta fórmula para a condutividade é isotrópica e portanto temos $\sigma(\omega) = \sigma_{xx} = \sigma_{yy}$.

Na figura 2.3, podemos observar uma representação gráfica das partes real e imaginária desta grandeza física.

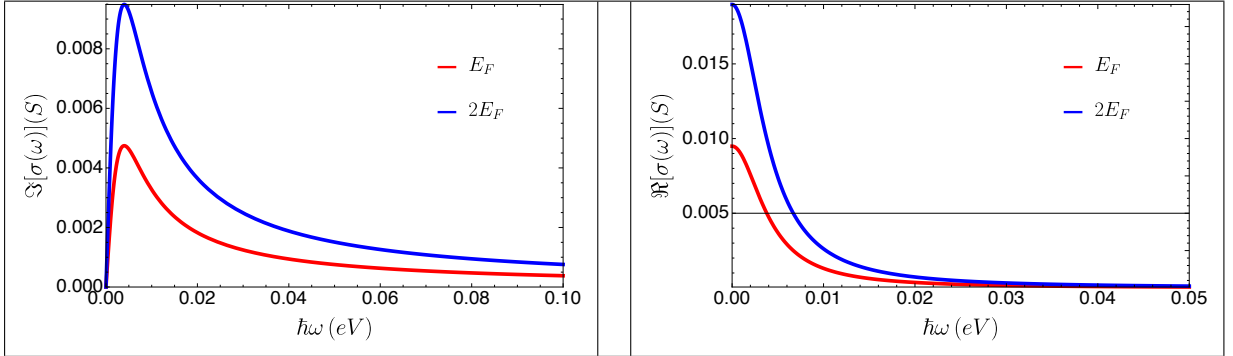


Figura 2.3: Representação gráfica da condutividade de Drude do grafeno. No lado esquerdo podemos observar a parte imaginária desta função e no lado direito a sua parte real, ambos os casos para duas energias de Fermi distintas. Os parâmetros considerados foram $E_F = 0.5$ eV e $\hbar\gamma = 0.004$ eV.

3

Plasmões no Grafeno: Relações de Dispersão e Perfil dos Campos

Neste capítulo pretendemos obter a relação de dispersão dos plasmões no grafeno em quatro casos distintos: primeiro consideramos uma folha de grafeno isolada inserida entre dois meios dielétricos distintos; seguidamente, estudamos o mesmo sistema nas proximidades de um metal perfeito e depois de um metal real e finalmente, consideramos o caso da dupla camada de grafeno inserida entre meios dielétricos.

Além disto, fazemos também uma representação gráfica do perfil dos campos elétricos nos sistemas considerados, de forma a podermos observar as oscilações na densidade de carga que se formam ao longo da superfície do grafeno.

3.1 Folha de Grafeno Isolada

Começamos por considerar uma folha de grafeno isolada, no plano $x = 0$, infinita nas direções y e z , a separar dois meios dielétricos distintos de funções dielétricas ϵ_1 e ϵ_2 , sendo o meio 1 a região $x < 0$ e o meio 2 a região $x > 0$, como é visível na figura 3.1.

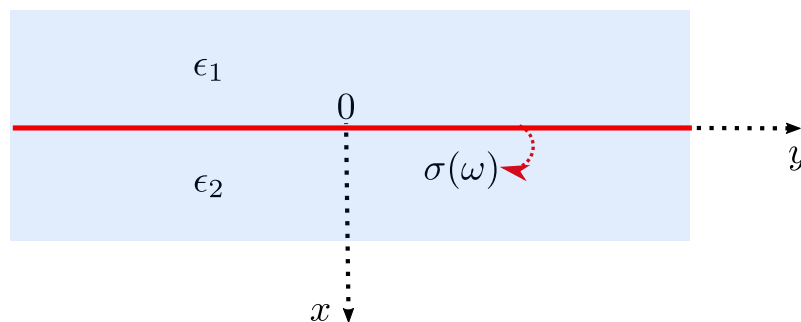


Figura 3.1: Folha de grafeno bidimensional de condutividade $\sigma(\omega)$. O eixo z aponta para fora da folha. ϵ_1 e ϵ_2 são as funções dielétricas dos dois meios considerados.

Tendo em conta apenas ondas eletromagnéticas com polarização TM, temos como solução da equação (2.9) no meio 1, o campo magnético na direção z , dado por

$$H_1(x, y) = h_1 e^{iqy} e^{\kappa_1 x}, \quad (3.1)$$

pois pretendemos obter os modos plasmônicos do grafeno e portanto, os campos devem decair exponencialmente na direção perpendicular ao grafeno e propagarem-se ao longo do mesmo. Por sua vez, o campo elétrico pode ser obtido por meio da equação (2.10) a qual permite escrever

$$\begin{cases} E_{1x}(x, y) = -\frac{\mu_0 c^2}{\omega \epsilon_1} q h_1 e^{iqy} e^{\kappa_1 x} \\ E_{1y}(x, y) = -\frac{i\mu_0 c^2}{\omega \epsilon_1} \kappa_1 h_1 e^{iqy} e^{\kappa_1 x}. \end{cases} \quad (3.2)$$

Analogamente, podemos escrever os campos na região 2 como

$$\begin{cases} H_2(x, y) = h_2 e^{iqy} e^{-\kappa_2 x} \\ E_{2x}(x, y) = -\frac{\mu_0 c^2}{\omega \epsilon_2} q h_2 e^{iqy} e^{-\kappa_2 x} \\ E_{2y}(x, y) = \frac{i\mu_0 c^2}{\omega \epsilon_2} \kappa_2 h_2 e^{iqy} e^{-\kappa_2 x}. \end{cases} \quad (3.3)$$

Para ambos os meios temos $\kappa_i = \sqrt{q^2 - k_i^2}$ e $k_i = \sqrt{\epsilon_i} \omega / c$, sendo $i = 1, 2$.

Com isto, podemos agora aplicar as condições fronteira para os campos elétricos e magnéticos tangenciais à folha de grafeno (2.23) e (2.22), em $x = 0$ para chegar à relação de dispersão dos plasmões na superfície do grafeno. A primeira condição permite escrever:

$$E_{1y}(0, y) = E_{2y}(0, y) \Rightarrow \frac{\kappa_1 h_1}{\epsilon_1} = -\frac{\kappa_2 h_2}{\epsilon_2} \quad (3.4)$$

e a segunda:

$$H_1(0, y) - H_2(0, y) = (\mathbf{J} \times \mathbf{n})_z \quad (3.5)$$

sendo $\mathbf{n} = (-1, 0, 0)$ e $\mathbf{J} = J_y \mathbf{u}_y = \sigma(\omega) E_y \mathbf{u}_y$, onde $\sigma(\omega)$ é a condutividade do grafeno, e portanto,

$$H_1(0, y) - H_2(0, y) = \sigma(\omega) E_y(0, y). \quad (3.6)$$

Escolhendo $E_y(0, y) = E_{1y}(0, y)$, a equação anterior simplifica para

$$h_1 - h_2 = -\frac{i\sigma\kappa_1}{\omega\epsilon_0\epsilon_1} h_1. \quad (3.7)$$

Por fim, combinando a equação anterior com (3.4) podemos obter a relação de dispersão desejada

$$\frac{\epsilon_1}{\kappa_1} + \frac{\epsilon_2}{\kappa_2} + \frac{i\sigma(\omega)}{\omega\epsilon_0} = 0. \quad (3.8)$$

Para obtermos ω como função de q é necessário resolver esta equação numericamente. No entanto, é importante começar por resolve-la aproximadamente. Para isso, consideramos o limite eletrostático em que temos $c \rightarrow \infty$ e portanto, $\kappa_i \approx q$, que permite escrever a relação de dispersão na forma simplificada

$$\frac{\epsilon_1}{q} + \frac{\epsilon_2}{q} + \frac{i\sigma(\omega)}{\omega\epsilon_0} = 0 \quad (3.9)$$

$$\Rightarrow \omega = \frac{-i\sigma(\omega)}{\epsilon_0(\epsilon_1 + \epsilon_2)} q \quad (3.10)$$

que pode então ser resolvida analiticamente se considerarmos a condutividade do grafeno obtida anteriormente

$$\sigma(\omega) = \frac{4\alpha c \epsilon_0}{\hbar} \frac{1}{\gamma - i\omega} E_F. \quad (3.11)$$

Assim, substituindo $\sigma(\omega)$ na relação de dispersão, temos

$$\hbar q = \frac{\epsilon_1 + \epsilon_2}{4\alpha c E_F} [(\hbar\omega)^2 + i\hbar^2\omega\gamma]. \quad (3.12)$$

Podemos ver que q é complexo devido ao termo de amortecimento γ do grafeno e podemos tirar a relação entre ω e as partes real e imaginária de q :

$$\hbar\omega = \sqrt{\frac{4\alpha c E_F}{\epsilon_1 + \epsilon_2}} \hbar \Re[q] \quad (3.13)$$

$$\hbar\omega = \frac{4\alpha c E_F}{(\epsilon_1 + \epsilon_2)\gamma} \Im[q], \quad (3.14)$$

onde podemos observar que ω apresenta uma dependência na raiz quadrada da parte real de q e uma dependência linear na sua parte imaginária. É também importante notar que, sendo q complexo, os campos plasmônicos, além de decaírem na direção perpendicular ao grafeno, também sofrem atenuação ao longo do mesmo, com um fator $e^{-\Im(q)y}$ e esta é tanto maior, quanto maior for a absorção γ do grafeno.

Posto isto, passamos para a solução numérica que nos permite obter uma representação gráfica de ω como função destas quantidades físicas, para podermos assim comparar com a solução analítica aproximada.

Na figura 3.2, podemos ver à esquerda a energia dos plasmões como função da parte real do seu momento e à direita como função da parte imaginária, para duas energias de Fermi distintas.

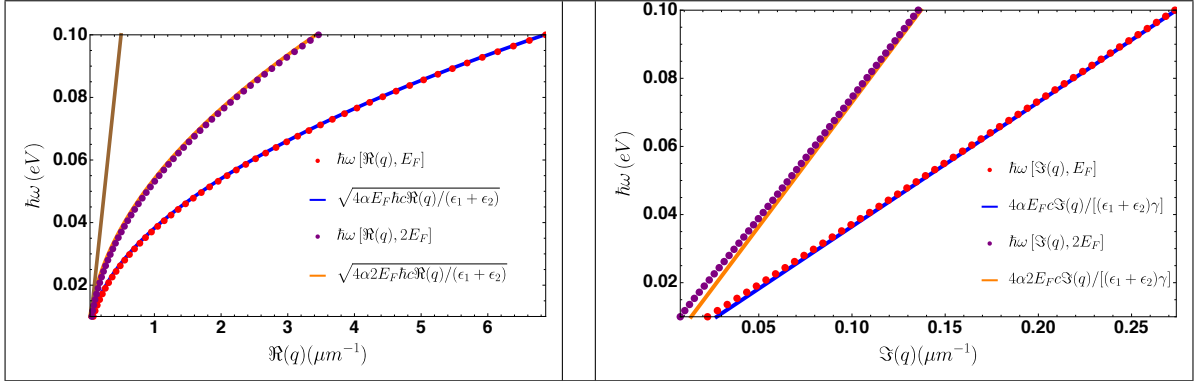


Figura 3.2: Relação de dispersão dos SPP's: energia como função da parte real (esquerda) e da parte imaginária (direita) de q , para $E_F = 0.5$ eV, $\hbar\gamma = 0.004$ eV e $\epsilon_1 = 1 = \epsilon_2$. À esquerda podemos também ver a relação de dispersão da luz no vácuo (linha castanha, meios 1 e 2).

Verifica-se então que o referido limite eletrostático é válido longe da linha de dispersão da luz, isto é, para $q \gg \sqrt{\epsilon}\omega/c$, pois existe uma total coincidência entre as linhas a cheio e ponteadas.

Além disto, é possível observar que para o mesmo momento linear, passamos a ter plasmões de frequência mais elevada se aumentarmos a energia de Fermi do grafeno.

Por fim, pretendemos representar o perfil do campo eléctrico dos plasmões com polarização TM na folha de grafeno. Para tal, começamos por relembrar as equações (3.2) e (3.3) onde estão definidas as componentes do campo eléctrico nos dois meios. Tendo também em conta a equação (3.4), conseguimos ficar com todas as componentes escritas em termos do coeficiente h_1 .

Assim, fazendo $\mu_0 h_1 = 1$, podemos representar espacialmente a parte real do campo eléctrico. Resta apenas escolher uma frequência ω e obter o respetivo q por meio da relação de dispersão.

Na figura 3.3 consideramos como medida de intensidade a função $\text{sgn}(x)E_x(x, y)$, de forma a obtermos uma melhor visualização da distribuição de carga ao longo da folha de grafeno. Identificamos assim as manchas vermelhas como cargas positivas e as azuis como negativas, pelo sentido tomado pelas linhas de campo. Esta oscilação entre cargas positivas e negativas é então o nosso plasmão polaritão de superfície (SPP, *surface plasmon polariton*).

Podemos também ver que a intensidade do campo diminui perpendicularmente à folha de grafeno, pois tratam-se de campos localizados.

Finalmente é também importante reparar no facto de que, quanto menor a energia escolhida, menor será o momento correspondente e portanto, maior o comprimento de onda, o que leva a uma maior separação entre as cargas eléctricas. Dito de outro modo, quanto maior for a frequência do SPP maior é o momento e maior é o grau de localização espacial dos campos electromagnéticos.

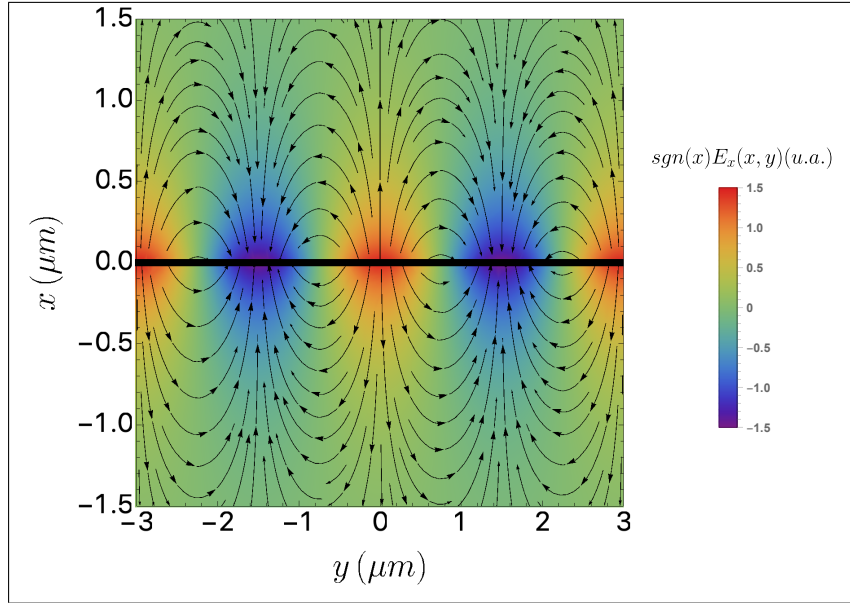


Figura 3.3: Perfil do campo eléctrico plasmónico de uma folha de grafeno no vácuo ($\epsilon_1 = 1 = \epsilon_2$). A energia de Fermi considerada é 0.5 eV e tomamos $\hbar\gamma = 0$. Consideramos também $\hbar\omega = 0.055$ eV e $q = 2.1 \mu\text{m}^{-1}$. A folha de grafeno está representada pela linha preta em $x = 0$.

3.2 Folha de Grafeno nas Proximidades de um Metal Perfeito

Vamos agora considerar que o grafeno se encontra nas proximidades de um metal perfeito. A superfície do metal está no plano $x = 0$ e a folha de grafeno no plano $x = d$. O meio 1, de função dieléctrica ϵ_1 ,

corresponde à região entre o metal e o grafeno e o meio 2, de função dielétrica ϵ_2 , à região $x > d$, como podemos observar na figura 3.4.

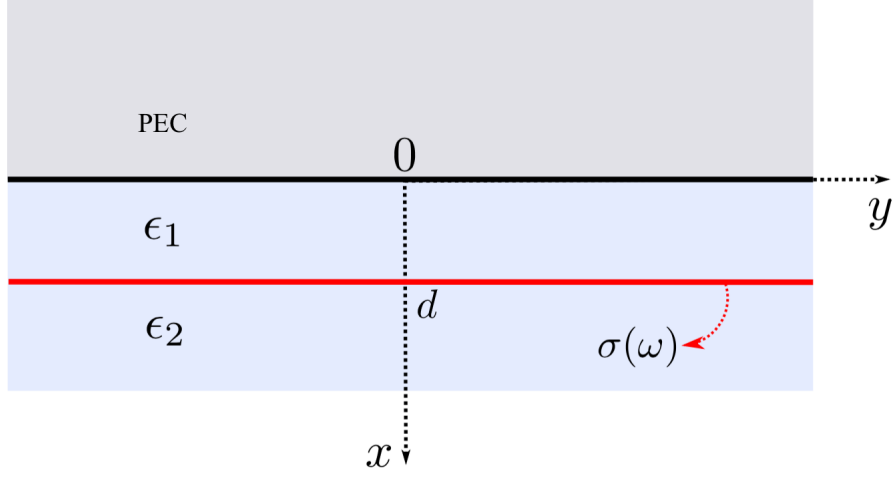


Figura 3.4: Folha de grafeno bidimensional de condutividade $\sigma(\omega)$ colocada a uma distância d de um metal perfeito. O eixo z aponta para fora da folha. ϵ_1 e ϵ_2 são as funções dielétricas dos dois meios considerados.

Seguindo o mesmo procedimento da seção anterior e considerando também apenas ondas com polarização TM, escrevemos os campos no meio 1 como

$$\begin{cases} H_1(x, y) = [h_1^+ e^{\kappa_1 x} + h_1^- e^{-\kappa_1 x}] e^{iqy} \\ E_{1x}(x, y) = -\frac{\mu_0 c^2 q}{\omega \epsilon_1} H_1(x, y) \\ E_{1y}(x, y) = -\frac{i\mu_0 c^2 \kappa_1}{\omega \epsilon_1} [h_1^+ e^{\kappa_1 x} - h_1^- e^{-\kappa_1 x}] e^{iqy}, \end{cases} \quad (3.15)$$

estando o campo magnético no eixo z tal como anteriormente.

No meio 2 temos

$$\begin{cases} H_2(x, y) = h_2 e^{-\kappa_2(x-d)} e^{iqy} \\ E_{2x}(x, y) = -\frac{\mu_0 c^2 q}{\omega \epsilon_2} H_2(x, y) \\ E_{2y}(x, y) = \frac{i\mu_0 c^2 \kappa_2}{\omega \epsilon_2} H_2(x, y), \end{cases} \quad (3.16)$$

onde temos para ambos os casos $\kappa_i = \sqrt{q^2 - k_i^2}$ e $k_i = \sqrt{\epsilon_i} \omega / c$, sendo $i = 1, 2$.

Passamos agora para as condições fronteiras dos campos apresentados. Para os campos elétricos tangenciais ao metal em $x = 0$ temos

$$E_{1y}(0, y) = 0 \quad (3.17)$$

e conseqüentemente, $h_1^+ = h_1^- \equiv h_1$. Com isto podemos reescrever os campos do meio 1 como

$$\begin{cases} H_1(x, y) = 2h_1 \cosh(\kappa_1 x) e^{iqy} \\ E_{1x}(x, y) = -\frac{2\mu_0 c^2 q}{\omega \epsilon_1} h_1 \cosh(\kappa_1 x) e^{iqy} \\ E_{1y}(x, y) = -\frac{2i\mu_0 c^2 \kappa_1}{\omega \epsilon_1} h_1 \sinh(\kappa_1 x) e^{iqy}. \end{cases} \quad (3.18)$$

Em $x = d$ temos para os campos elétricos tangenciais ao grafeno

$$E_{1y}(d, y) = E_{2y}(d, y) \quad (3.19)$$

o que permite obter

$$\implies h_1 = -\frac{\kappa_2 \epsilon_1}{\kappa_1 \epsilon_2} \frac{h_2}{2 \sinh(\kappa_1 d)}. \quad (3.20)$$

Por fim, temos a condição para os campos magnéticos tangenciais

$$H_1(d, y) - H_2(d, y) = \sigma(\omega) E_{2y}(d, y) \quad (3.21)$$

que em conjunto com a equação (3.20) permite obter a relação de dispersão do grafeno nas proximidades de um metal

$$\frac{\epsilon_1}{\kappa_1} \coth(\kappa_1 d) + \frac{\epsilon_2}{\kappa_2} + \frac{i\sigma(\omega)}{\epsilon_0 \omega} = 0. \quad (3.22)$$

Tal como na secção anterior, podemos começar por resolver aproximadamente esta equação. Assim, começamos por considerar que a folha de grafeno se encontra muito próxima do metal e portanto temos $\kappa_1 d \ll 1$ e conseqüentemente $\coth(\kappa_1 d) \approx \frac{1}{\kappa_1 d}$. Além disto, tomamos o limite eletrostático $c \rightarrow \infty$ e consideramos a condutividade do grafeno, o que permite obter:

$$\frac{\epsilon_1}{q^2 d} + \frac{\epsilon_2}{q} + \frac{4i\alpha \hbar c E_F}{\hbar \omega (\hbar \gamma - i \hbar \omega)} = 0 \quad (3.23)$$

e ignorando o segundo termo da equação anterior por ser muito menor que os outros no limite considerado, ficamos com

$$\Leftrightarrow q = \sqrt{\frac{\epsilon_1}{4\alpha \hbar c d E_F} [(\hbar \omega)^2 + i \hbar^2 \omega \gamma]} \quad (3.24)$$

$$\Rightarrow q = \sqrt{\frac{\epsilon_1 \hbar \omega}{8\alpha c d E_F}} (\omega^2 + \gamma^2)^{1/4} \left[\sqrt{1 + \frac{\omega}{\sqrt{\gamma^2 + \omega^2}}} + i \sqrt{1 - \frac{\omega}{\sqrt{\gamma^2 + \omega^2}}} \right]. \quad (3.25)$$

Temos novamente q complexo e portanto, os campos decaem com um fator $e^{-\Im(q)y}$ ao longo do grafeno.

Podemos então fazer uma representação gráfica da energia dos plasmões em função das partes reais e imaginárias de q , para comparar a solução analítica aproximada com a solução numérica da relação de dispersão.

Observando a figura 3.5, vemos que a solução aproximada é praticamente coincidente com a exata para o gráfico da esquerda que corresponde à variação de ω com a parte real de q e é também muito próxima no gráfico da direita, correspondente à parte imaginária.

Podemos também notar que estas soluções coincidem tanto mais, quanto menor for o valor de qd e que tal como para o caso da folha de grafeno isolada, para o mesmo momento, a energia do plasmão é tanto maior quanto maior for a energia de Fermi do grafeno. No entanto, vemos na figura 3.6, que para o mesmo momento, os SPP's apresentam uma energia menor quando o grafeno se encontra próximo do metal do que quando se encontra isolado. Isto deve-se à descida do potencial elétrico do sistema causada pela presença do metal.

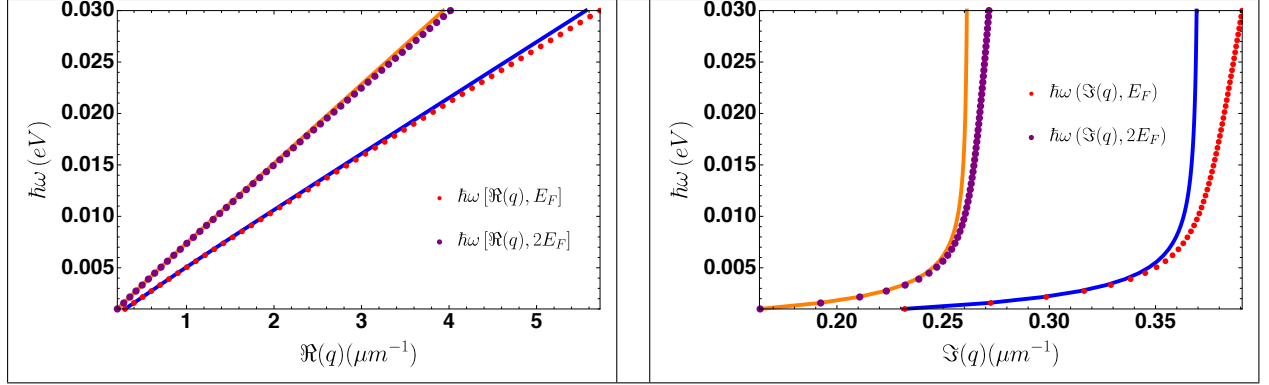


Figura 3.5: Relação de dispersão dos SPP's: energia como função da parte real (esquerda) e da parte imaginária (direita) de q , para $E_F = 0.5$ eV, $\hbar\gamma = 0.004$ eV, $\epsilon_1 = 1 = \epsilon_2$ e $d = 0.01$ μm . As linhas a cheio representam a solução analítica e as ponteadas a numérica.

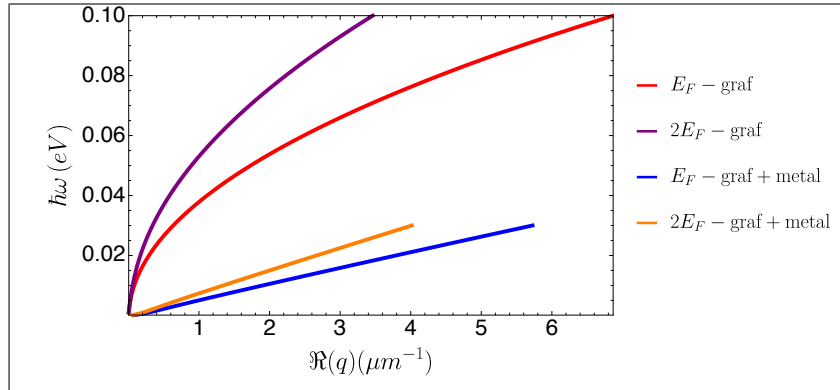


Figura 3.6: Comparação da relação de dispersão dos SPP's de uma folha de grafeno isolada com os de uma folha de grafeno nas proximidades de um metal perfeito: energia como função da parte real de q , para $E_F = 0.5$ eV, $\hbar\gamma = 0.004$ eV, $\epsilon_1 = 1 = \epsilon_2$ e $d = 0.01$ μm .

Por outro lado, é também importante notar que no limite oposto, ou seja, quando $\kappa_1 d \gg 1$, temos $\coth(\kappa_1 d) \approx 1$ e a equação (3.22) reduz-se à relação de dispersão (3.8) e portanto, o sistema comporta-se como se a folha de grafeno estivesse isolada.

Finalmente, para traçar o perfil do campo elétrico plasmónico, seguimos o mesmo procedimento da secção anterior, sendo desta vez as componentes do campo dadas pelas equações (3.18) e (3.16). Além disto, a equação (3.20) garante que existe apenas um coeficiente independente.

Assim, escolhendo uma frequência e obtendo o respetivo momento por meio da relação de dispersão, chegamos à figura 3.7, onde podemos observar a oscilação de cargas elétricas ao longo da folha de grafeno. Além disto, podemos também ver que as linhas de campo são perpendiculares à superfície do metal (como seria de esperar perto da superfície de um metal perfeito) e que, embora a intensidade do campo diminua na direção perpendicular ao grafeno, esta mantém-se aproximadamente constante na região entre o metal e o grafeno devido à proximidade entre os dois. O sistema comporta-se então, localmente, como um condensador de placas paralelas em que a folha de grafeno é uma placa e a superfície do metal é a outra.

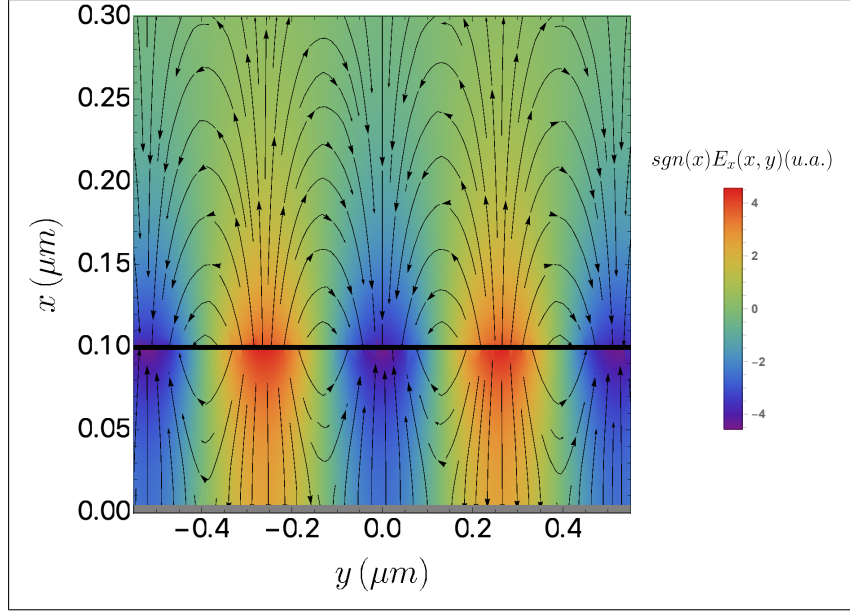


Figura 3.7: Perfil do campo elétrico plasmónico de uma folha de grafeno no vácuo ($\epsilon_1 = 1 = \epsilon_2$), a uma distância $d = 0.1 \mu\text{m}$ de um metal perfeito. A energia de Fermi considerada é 0.5 eV e tomamos $\hbar\gamma = 0$. Além disto temos $\hbar\omega = 0.126 \text{ eV}$ e $q = 12.04 \mu\text{m}^{-1}$. A folha de grafeno está representada pela linha preta em $x = 0.1 \mu\text{m}$ e a superfície do metal pela linha cinzenta em $x = 0$.

3.3 Folha de Grafeno nas Proximidades de um Metal Real

Nesta secção temos por objetivo resolver o problema anterior, mas para o caso em que o metal é real e portanto, é caracterizado por uma função dielétrica ϵ_m dependente da frequência da luz. O sistema considerado está representado na figura 3.8.

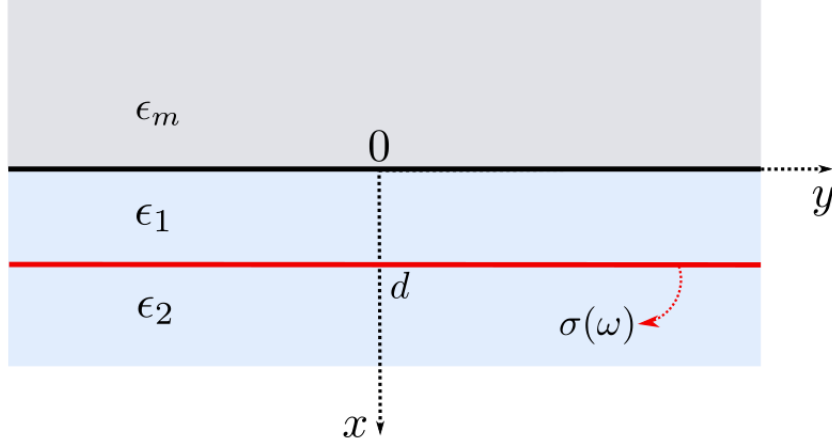


Figura 3.8: Folha de grafeno bidimensional de condutividade $\sigma(\omega)$ colocada a uma distância d de um metal real. O eixo z aponta para fora da folha. ϵ_1 e ϵ_2 são as funções dielétricas dos dois meios considerados e ϵ_m a função dielétrica do metal.

Assim sendo, desta vez existem campos dentro do metal que têm a forma

$$\begin{cases} H_m(x, y) = h_m e^{\kappa_m x} e^{iqy} \\ E_{mx}(x, y) = -\frac{\mu_0 c^2 q}{\omega \epsilon_m} H_m(x, y) \\ E_{my}(x, y) = \frac{-i\mu_0 c^2 \kappa_m}{\omega \epsilon_m} H_m(x, y), \end{cases} \quad (3.26)$$

onde $\kappa_m = \sqrt{q^2 - k_m^2}$ e $k_m = \frac{\omega \sqrt{\epsilon_m}}{c}$.

No meio 1 voltamos a ter

$$\begin{cases} H_1(x, y) = [h_1^+ e^{\kappa_1 x} + h_1^- e^{-\kappa_1 x}] e^{iqy} \\ E_{1x}(x, y) = -\frac{\mu_0 c^2 q}{\omega \epsilon_1} H_1(x, y) \\ E_{1y}(x, y) = -\frac{i\mu_0 c^2 \kappa_1}{\omega \epsilon_1} [h_1^+ e^{\kappa_1 x} - h_1^- e^{-\kappa_1 x}] e^{iqy}, \end{cases} \quad (3.27)$$

com $\kappa_1 = \sqrt{q^2 - k_1^2}$ e no meio 2

$$\begin{cases} H_2(x, y) = h_2 e^{-\kappa_2(x-d)} e^{iqy} \\ E_{2x}(x, y) = -\frac{\mu_0 c^2 q}{\omega \epsilon_2} H_2(x, y) \\ E_{2y}(x, y) = \frac{i\mu_0 c^2 \kappa_2}{\omega \epsilon_2} H_2(x, y), \end{cases} \quad (3.28)$$

sendo $\kappa_2 = \sqrt{q^2 - k_2^2}$.

Com isto, a condição fronteira em $x = 0$ dos campos magnéticos altera-se para $H_m(0, y) = H_1(0, y)$, o que permite escrever

$$h_m = h_1^+ + h_1^-. \quad (3.29)$$

Também a condição dos campos elétricos nesta mesma interface passa a $E_{my}(0, y) = E_{1y}(0, y)$:

$$h_m = \frac{\epsilon_m \kappa_1}{\kappa_m \epsilon_1} (h_1^+ - h_1^-) \quad (3.30)$$

e, juntando estas duas equações chegamos à relação entre h_1^+ e h_1^- :

$$h_1^+ = \frac{\kappa_m \epsilon_1 + \epsilon_m \kappa_1}{\epsilon_m \kappa_1 - \kappa_m \epsilon_1} h_1^-. \quad (3.31)$$

Para simplificar a notação daqui em diante escrevemos $h_1 \equiv h_1^-$ e portanto, o campo magnético no meio 1 fica então

$$H_1(x, y) = \left[\frac{\kappa_m \epsilon_1 + \epsilon_m \kappa_1}{\epsilon_m \kappa_1 - \kappa_m \epsilon_1} e^{\kappa_1 x} + e^{-\kappa_1 x} \right] h_1 e^{iqy}. \quad (3.32)$$

Passando agora para $x = d$ onde se encontra a folha de grafeno, a condição fronteira dos campos magnéticos, $H_1(d, y) - H_2(d, y) = \sigma(\omega) E_{2y}(d, y)$ dá origem a

$$\left[\frac{\kappa_m \epsilon_1 + \epsilon_m \kappa_1}{\epsilon_m \kappa_1 - \kappa_m \epsilon_1} e^{\kappa_1 d} + e^{-\kappa_1 d} \right] h_1 - h_2 = i\sigma(\omega) \gamma_2 \kappa_2 h_2 \quad (3.33)$$

onde $\gamma_2 \equiv \frac{\mu_0 \epsilon^2}{\omega \epsilon_2}$.

Já a equação para a continuidade dos campos elétricos tangenciais, $E_{1y}(d, y) = E_{2y}(d, y)$, resulta em

$$-i\gamma_1 \kappa_1 \left[\frac{\kappa_m \epsilon_1 + \epsilon_m \kappa_1}{\epsilon_m \kappa_1 - \kappa_m \epsilon_1} e^{\kappa_1 d} - e^{-\kappa_1 d} \right] h_1 = i\gamma_2 \kappa_2 h_2. \quad (3.34)$$

Finalmente, combinando estas duas últimas equações de forma a eliminar os coeficientes dos campos, obtemos a relação de dispersão dos SPP's no grafeno na presença de um metal real:

$$[\sigma(\omega) i\gamma_2 \kappa_2 + 1] \frac{\kappa_m \epsilon_1 \cosh(\kappa_1 d) + \epsilon_m \kappa_1 \sinh(\kappa_1 d)}{\kappa_m \epsilon_1 \sinh(\kappa_1 d) + \epsilon_m \kappa_1 \cosh(\kappa_1 d)} + \frac{\kappa_2 \epsilon_1}{\kappa_1 \epsilon_2} = 0. \quad (3.35)$$

Resolvendo-a numericamente, podemos obter as frequências dos plasmões a partir dos seus momentos q ou vice-versa.

Assim, na figura 3.9, podemos ver uma representação gráfica da relação de dispersão (3.35), onde fazemos uma comparação desta com a que obtivemos anteriormente para o caso em que o metal é perfeito, para duas energias de Fermi do grafeno. Podemos ver que há uma sobreposição das linhas, o que indica que para as energias consideradas, o metal blindava de forma muito eficiente o campo elétrico e é uma excelente aproximação considerar o metal perfeito.

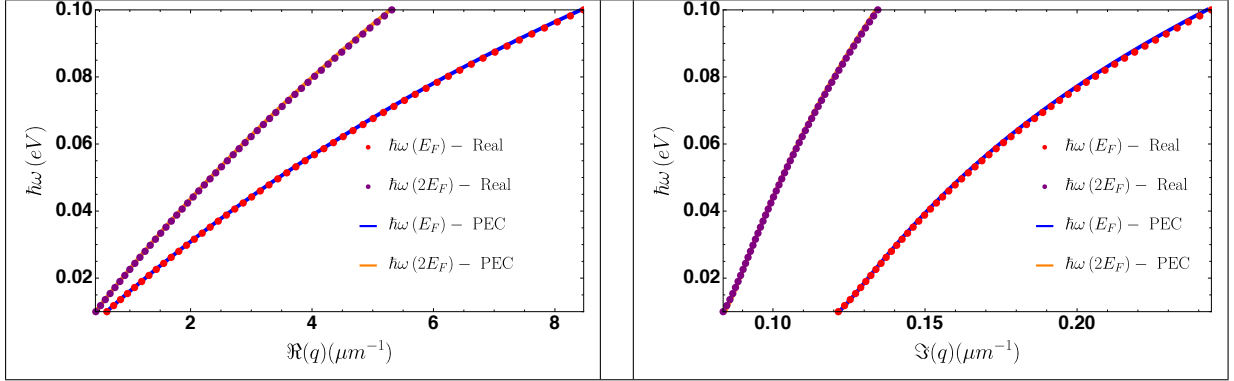


Figura 3.9: Relação de dispersão dos SPP's: energia como função da parte real (esquerda) e da parte imaginária (direita) de q , para $E_F = 0.5$ eV, $\hbar\gamma = 0.004$ eV, $\epsilon_1 = 1 = \epsilon_2$ e $d = 0.1$ μm . ϵ_m corresponde à função dielétrica do ouro que se encontra apresentada no apêndice B.

Por fim, seguindo os mesmos passos explicados nas duas secções anteriores, representamos o perfil espacial dos campos elétricos plasmónicos do sistema, visíveis na figura 3.10 e, tal como seria de esperar pela análise das relações de dispersão, estes assemelham-se muito aos da figura 3.3, diferindo apenas no facto de agora existirem campos no interior do metal.

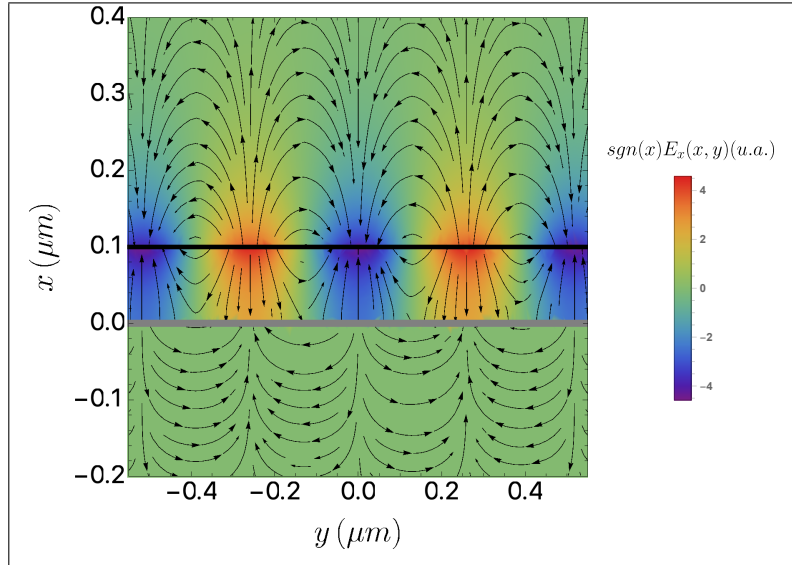


Figura 3.10: Perfil do campo eléctrico plasmónico de uma folha de grafeno no vácuo ($\epsilon_1 = 1 = \epsilon_2$), a uma distância $d = 0.1$ μm de um metal real. A energia de Fermi considerada é 0.5 eV e tomamos $\hbar\gamma = 0$. Além disto temos $\hbar\omega = 0.126$ eV e $q = 12.11$ μm^{-1} . A folha de grafeno está representada pela linha preta em $x = 0.1$ μm e a superfície do metal pela linha cinzenta em $x = 0$. ϵ_m corresponde à função dielétrica do ouro que se encontra apresentada no apêndice B.

3.4 Duas Folhas de Grafeno Embebidas em Dielétricos

Nesta secção estudamos os modos plasmónicos de duas folhas de grafeno infinitas e separadas por uma distância d , inseridas em meios dielétricos, como é possível observar na figura 3.11. O meio 1 (ϵ_1) corresponde à região $x < 0$, em $x = 0$ está uma folha de grafeno, na região $0 < x < d$ temos o meio 2 (ϵ_2), em $x = d$ está a outra folha de grafeno e o meio 3 (ϵ_3) corresponde à região $x > d$.

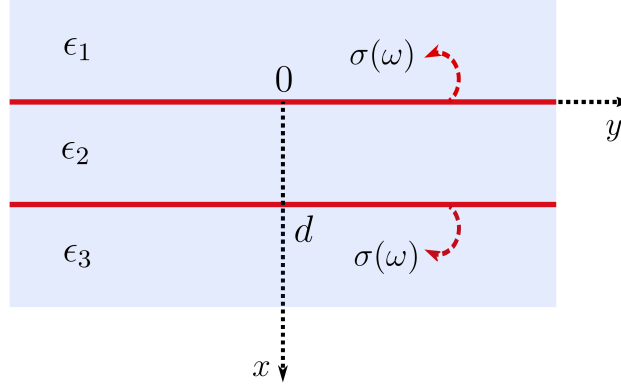


Figura 3.11: Duas folhas de grafeno bidimensionais de condutividade $\sigma(\omega)$. O eixo z aponta para fora da folha. ϵ_1 , ϵ_2 e ϵ_3 são as funções dielétricas dos três meios considerados.

Com isto, começamos com os campos eletromagnéticos para o meio 1, obtidos da forma já descrita nas secções anteriores:

$$\begin{cases} H_1(x, y) = h_1 e^{\kappa_1 x} e^{iqy} \\ E_{1x}(x, y) = -\frac{\mu_0 c^2 q}{\omega \epsilon_1} H_1(x, y) \\ E_{1y}(x, y) = -\frac{i\mu_0 c^2 \kappa_1}{\omega \epsilon_1} H_1(x, y), \end{cases} \quad (3.36)$$

onde $\kappa_1 = \sqrt{q^2 - k_1^2}$ e $k_1 = \omega\sqrt{\epsilon_1}/c$.

Para o meio 2 temos

$$\begin{cases} H_2(x, y) = [h_2^+ e^{\kappa_2 x} + h_2^- e^{-\kappa_2 x}] e^{iqy} \\ E_{2x}(x, y) = -\frac{\mu_0 c^2 q}{\omega \epsilon_2} H_2(x, y) \\ E_{2y}(x, y) = -\frac{i\mu_0 c^2 \kappa_2}{\omega \epsilon_2} [h_2^+ e^{\kappa_2 x} - h_2^- e^{-\kappa_2 x}] e^{iqy}, \end{cases} \quad (3.37)$$

com $\kappa_2 = \sqrt{q^2 - k_2^2}$ e $k_2 = \omega\sqrt{\epsilon_2}/c$.

Finalmente, no meio 3 escrevemos

$$\begin{cases} H_3(x, y) = h_3 e^{-\kappa_3(x-d)} e^{iqy} \\ E_{3x}(x, y) = -\frac{\mu_0 c^2 q}{\omega \epsilon_3} H_3(x, y) \\ E_{3y}(x, y) = \frac{i\mu_0 c^2 \kappa_3}{\omega \epsilon_3} H_3(x, y), \end{cases} \quad (3.38)$$

sendo $\kappa_3 = \sqrt{q^2 - k_3^2}$ e $k_3 = \omega\sqrt{\epsilon_3}/c$.

Podemos então ligar os campos nas diversas regiões por meio das condições fronteira nas interfaces do problema. Começamos por $x = 0$, onde escrevemos para a componente tangencial dos campos elétricos:

$$E_{1y}(0, y) = E_{2y}(0, y) \quad (3.39)$$

$$\Rightarrow h_1 = \frac{\kappa_2 \epsilon_1}{\kappa_1 \epsilon_2} (h_2^+ - h_2^-). \quad (3.40)$$

Na mesma interface, a componente tangencial dos campos magnéticos deve obedecer a:

$$H_1(0, y) - H_2(0, y) = \sigma(\omega) E_{1y}(0, y) \quad (3.41)$$

$$\Rightarrow h_1 = \frac{h_2^+ + h_2^-}{1 + i \frac{\sigma(\omega)}{\epsilon_0 \omega} \kappa_1 / \epsilon_1}. \quad (3.42)$$

Em $x = d$, as condições fronteira homólogas são:

$$E_{2y}(d, y) = E_{3y}(d, y) \quad (3.43)$$

$$\Rightarrow h_3 = - \frac{(h_2^+ e^{\kappa_2 d} - h_2^- e^{-\kappa_2 d}) \kappa_2 \epsilon_3}{\kappa_3 \epsilon_2} \quad (3.44)$$

$$H_2(d, y) - H_3(d, y) = \sigma(\omega) E_{3y}(d, y) \quad (3.45)$$

$$\Rightarrow h_3 = \frac{h_2^+ e^{\kappa_2 d} + h_2^- e^{-\kappa_2 d}}{1 + i \frac{\sigma(\omega)}{\epsilon_0 \omega} \kappa_3 / \epsilon_3} \quad (3.46)$$

As equações (3.40), (3.42), (3.44) e (3.46) formam então um sistema homogêneo de 4 equações com 4 coeficientes, cuja resolução dá origem à equação

$$\begin{aligned} & e^{\kappa_2 d} \left(\frac{\epsilon_3}{\kappa_3} + \frac{\epsilon_2}{\kappa_2} + \frac{i\sigma(\omega)}{\omega\epsilon_0} \right) \left(\frac{\epsilon_1}{\kappa_1} + \frac{\epsilon_2}{\kappa_2} + \frac{i\sigma(\omega)}{\omega\epsilon_0} \right) = \\ & = e^{-\kappa_2 d} \left(\frac{\epsilon_3}{\kappa_3} - \frac{\epsilon_2}{\kappa_2} + \frac{i\sigma(\omega)}{\omega\epsilon_0} \right) \left(\frac{\epsilon_1}{\kappa_1} - \frac{\epsilon_2}{\kappa_2} + \frac{i\sigma(\omega)}{\omega\epsilon_0} \right) \end{aligned} \quad (3.47)$$

que representa a relação de dispersão dos modos plasmônicos que se formam no sistema.

No limite em que $\kappa_2 d \rightarrow +\infty$, obtemos a relação de dispersão dos plasmões para cada uma das folhas de grafeno, sem interação entre elas:

$$\left(\frac{\epsilon_3}{\kappa_3} + \frac{\epsilon_2}{\kappa_2} + \frac{i\sigma(\omega)}{\omega\epsilon_0} \right) \left(\frac{\epsilon_1}{\kappa_1} + \frac{\epsilon_2}{\kappa_2} + \frac{i\sigma(\omega)}{\omega\epsilon_0} \right) = 0, \quad (3.48)$$

que é equivalente à equação (3.8).

Resolvendo numericamente a equação (3.47) é possível chegar à relação entre o momento e a energia dos SPP's, que se encontra representada na figura 3.12, juntamente com a relação de dispersão de apenas uma folha de grafeno. Da análise da figura, vemos que a função apresenta dois ramos: um que se encontra acima da relação de dispersão de uma única folha e outro que se encontra abaixo. O primeiro corresponde aos modos óticos, que são simétricos relativamente ao plano $x = d/2$, e o segundo aos modos acústicos, que são antisimétricos relativamente ao mesmo plano. A simetria dos modos está associada à igualdade $E_y(0, y) = E_y(d, y)$, enquanto que a antisimetria corresponde ao caso em que temos $E_y(0, y) = -E_y(d, y)$.

É também importante notar que quanto mais afastadas estiverem as folhas (maior valor de d), mais a relação de dispersão de dupla camada se aproxima da relação de dispersão de uma única folha de grafeno.

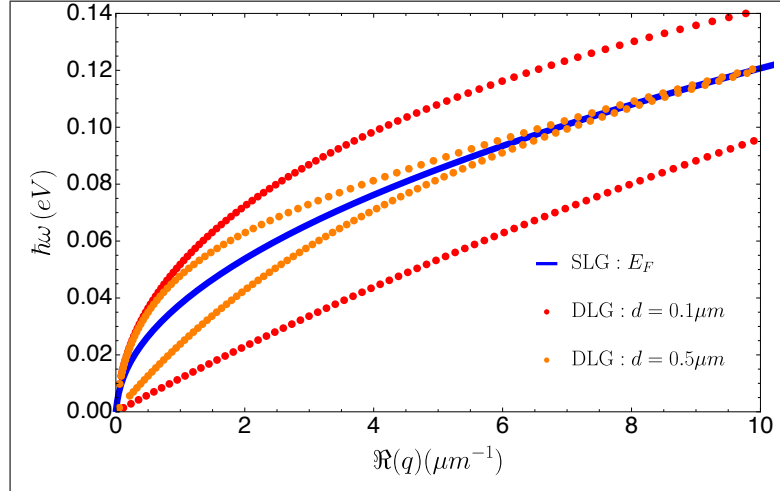


Figura 3.12: Relação de dispersão dos SPP's para a dupla camada de grafeno (linhas vermelhas para $0.1 \mu m$ e laranjas para $d = 0.5 \mu m$) e para uma única folha de grafeno (linha azul): energia como função da parte real de q , para $E_F = 0.5 \text{ eV}$, $\hbar\gamma = 0$ e $\epsilon_1 = 1 = \epsilon_2 = \epsilon_3$. As linhas vermelha e laranja que estão acima da linha azul correspondem aos modos óticos e as linha abaixo correspondem aos modos acústicos.

Finalmente, na figura 3.13 fazemos uma representação gráfica do perfil espacial dos campos elétricos do problema, tanto para um modo ótico (lado direito) como para um modo acústico (lado esquerdo) do sistema. Para isto seguimos o mesmo procedimento das secções anteriores.

Podemos observar que nos modos óticos existe uma oscilação de cargas coletiva em fase ao longo das duas folhas, enquanto que nos modos acústicos esta oscilação se encontra em oposição de fases. Estes fenómenos são determinados pela componente tangencial às folhas de grafeno do campo eléctrico: se observarmos a figura 3.14, vemos que no caso dos modos óticos, esta componente dos campos tem o mesmo valor quando avaliado em cada uma das folhas, ao passo que nos modos acústicos tem sinal contrário quando avaliada em folhas diferentes.

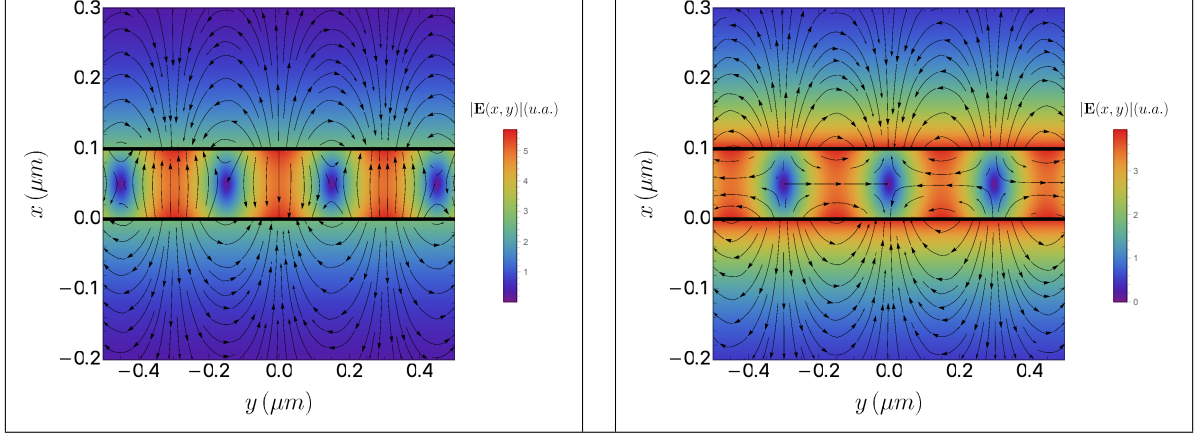


Figura 3.13: Perfil do campo elétrico plasmônico da dupla camada de grafeno no vácuo ($\epsilon_1 = 1 = \epsilon_2 = \epsilon_3$), para uma distância entre folhas dada por $d = 0.1 \mu\text{m}$. A energia de Fermi considerada é 0.5 eV e tomamos $\hbar\gamma = 0$. Além disto temos $\hbar\omega = 0.1 \text{ eV}$ (esquerda), $\hbar\omega = 0.14 \text{ eV}$ (direita) e $q = \pi/0.3 \mu\text{m}^{-1}$. As folhas de grafeno estão representadas pelas linhas pretas em $x = 0.1 \mu\text{m}$ e em $x = 0$.

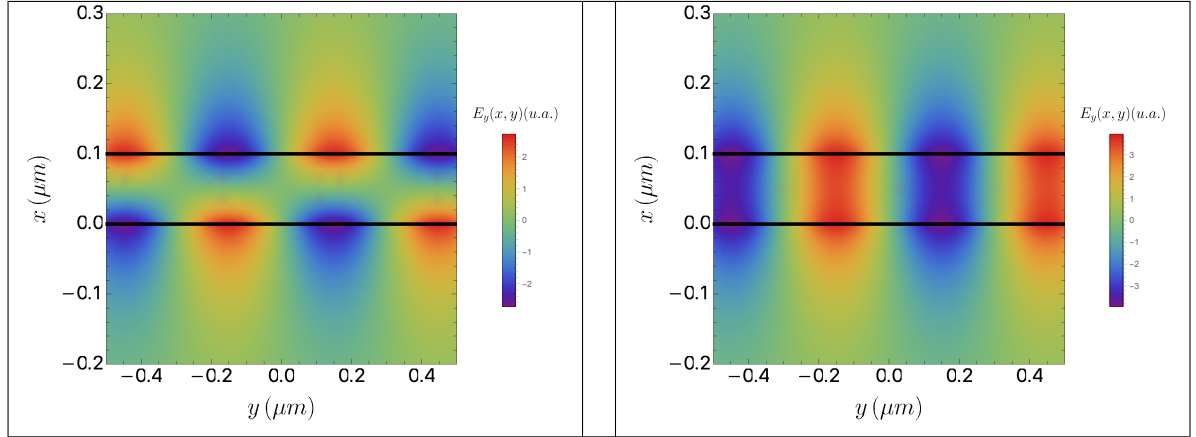


Figura 3.14: Perfil da componente y dos modos acústico (esquerda) e ótico (direita) da dupla camada de grafeno no vácuo ($\epsilon_1 = 1 = \epsilon_2 = \epsilon_3$), para uma distância entre folhas $d = 0.1 \mu\text{m}$. A energia de Fermi considerada é 0.5 eV e tomamos $\hbar\gamma = 0$. Além disto temos $\hbar\omega = 0.1 \text{ eV}$ (esquerda), $\hbar\omega = 0.14 \text{ eV}$ (direita) e $q = \pi/0.3 \mu\text{m}^{-1}$. As folhas de grafeno estão representadas pelas linhas pretas em $x = 0.1 \mu\text{m}$ e em $x = 0$.

Outro problema de interesse é aquele em que consideramos que as duas folhas de grafeno do sistema têm energias de Fermi diferentes. Consequentemente, são também descritas por condutividades óticas diferentes. Assim sendo, para obtermos a relação de dispersão dos SPP's, temos apenas que considerar numa das condições fronteira dos campos eletromagnéticos apresentadas no início da presente secção, um $\sigma'(\omega)$ para uma das folhas (no caso consideramos na interface $x = d$). Com isto e resolvendo o sistema de equações para os coeficientes dos campos da mesma forma, chegamos a uma equação muito semelhante a

(3.47):

$$\begin{aligned}
& e^{\kappa_2 d} \left(\frac{\epsilon_3}{\kappa_3} + \frac{\epsilon_2}{\kappa_2} + \frac{i\sigma'(\omega)}{\omega\epsilon_0} \right) \left(\frac{\epsilon_1}{\kappa_1} + \frac{\epsilon_2}{\kappa_2} + \frac{i\sigma(\omega)}{\omega\epsilon_0} \right) = \\
& = e^{-\kappa_2 d} \left(\frac{\epsilon_3}{\kappa_3} - \frac{\epsilon_2}{\kappa_2} + \frac{i\sigma'(\omega)}{\omega\epsilon_0} \right) \left(\frac{\epsilon_1}{\kappa_1} - \frac{\epsilon_2}{\kappa_2} + \frac{i\sigma(\omega)}{\omega\epsilon_0} \right), \tag{3.49}
\end{aligned}$$

cujo limite $\kappa_2 d \rightarrow +\infty$, desta vez resulta em

$$\left(\frac{\epsilon_3}{\kappa_3} + \frac{\epsilon_2}{\kappa_2} + \frac{i\sigma'(\omega)}{\omega\epsilon_0} \right) \left(\frac{\epsilon_1}{\kappa_1} + \frac{\epsilon_2}{\kappa_2} + \frac{i\sigma(\omega)}{\omega\epsilon_0} \right) = 0. \tag{3.50}$$

Esta última equação representa então a relação de dispersão dos plasmões em duas folhas de grafeno não acopladas com condutividades diferentes.

Na figura 3.15 podemos observar novamente a relação de dispersão dos SPP's, mas desta vez para este último caso em que as folhas de grafeno têm energias de Fermi diferentes. Representamos também duas curvas de dispersão de uma única folha de grafeno, uma para cada valor de E_F escolhido para as folhas da dupla camada, com o objetivo de mostrar que, com o aumento da distância entre as folhas, a curva associada aos modos óticos tende para a relação de dispersão de uma única camada com maior energia de Fermi e a curva dos modos acústicos aproxima-se daquela com menor valor de E_F .

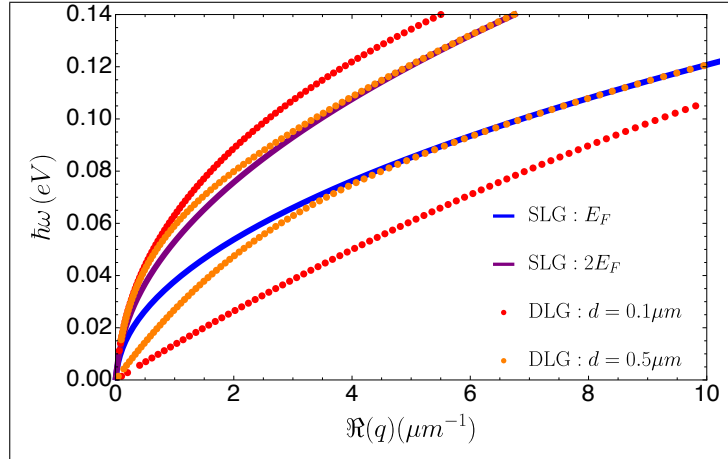


Figura 3.15: Relação de dispersão dos SPP's para a dupla camada de grafeno (linhas vermelhas para $0.1 \mu m$ e laranjas para $d = 0.5 \mu m$) e para uma única folha de grafeno (linhas azul e roxa): energia como função da parte real de q , para $E_F = 0.5 \text{ eV}$, $\hbar\gamma = 0$ e $\epsilon_1 = 1 = \epsilon_2 = \epsilon_3$. No caso da dupla camada de grafeno, umas das folhas tem $E_F = 0.5 \text{ eV}$ e a outra tem $E_F = 1 \text{ eV}$. Para cada valor de d , os modos óticos correspondem ao ramo de maior energia e os modos acústicos ao de menor.

Por fim, podemos observar na figura 3.16, a distribuição espacial dos campos elétricos na dupla camada de grafeno para o caso em que as folhas têm condutividades óticas diferentes. Neste caso, os modos óticos e acústicos não são simétricos nem antisimétricos. Isto pode ser explicado pelo facto da componente tangencial do campo elétrico não ser nem simétrica nem antisimétrica em relação ao plano $x = d/2$, como podemos observar na figura 3.17. Observamos também que para o ramo ótico, o campo elétrico é mais intenso perto da folha de grafeno com energia de Fermi mais elevada e que, para o ramo acústico, acontece

precisamente o oposto. Apesar destas alterações nos modos do sistema, os de maior energia continuam a ser oscilações de carga em fase em ambas as camadas e os de menor energia continuam a ser oscilações de carga em oposição de fase.

Uma variante deste sistema de duas folhas infinitas de grafeno com energias de Fermi distintas é considerar uma geometria idêntica, mas composta por nanofitas de grafeno. Este problema foi considerado em [57], onde os autores observaram que, quando dopadas, estas nanofitas suportam a propagação de plasmões até largas distâncias, quando comparadas com o comprimento de onda dos SPP's. Nota-se também que a intensidade dos campos plasmônicos é mais elevada nas arestas do material. Além disto, é possível alterar a relação de dispersão dos plasmões variando a distância e a configuração relativa dos pares de nanofitas, tal como no caso das folhas infinitas estudadas no presente trabalho.

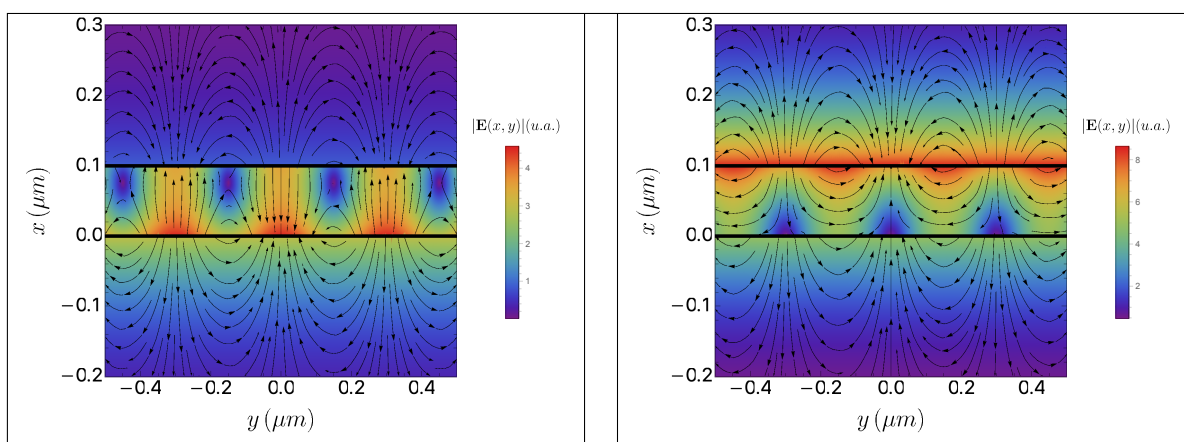


Figura 3.16: Perfil do campo elétrico plasmônico da dupla camada de grafeno no vácuo ($\epsilon_1 = 1 = \epsilon_2 = \epsilon_3$), para uma distância entre folhas $d = 0.1 \mu\text{m}$. A energia de Fermi considerada é 0.5 eV e tomamos $\hbar\gamma = 0$. Além disto temos $\hbar\omega = 0.11 \text{ eV}$ (esquerda), $\hbar\omega = 0.18 \text{ eV}$ (direita) e $q = \pi/0.3 \mu\text{m}^{-1}$. As folhas de grafeno estão representadas pelas linhas pretas em $x = 0.1 \mu\text{m}$ e em $x = 0$.

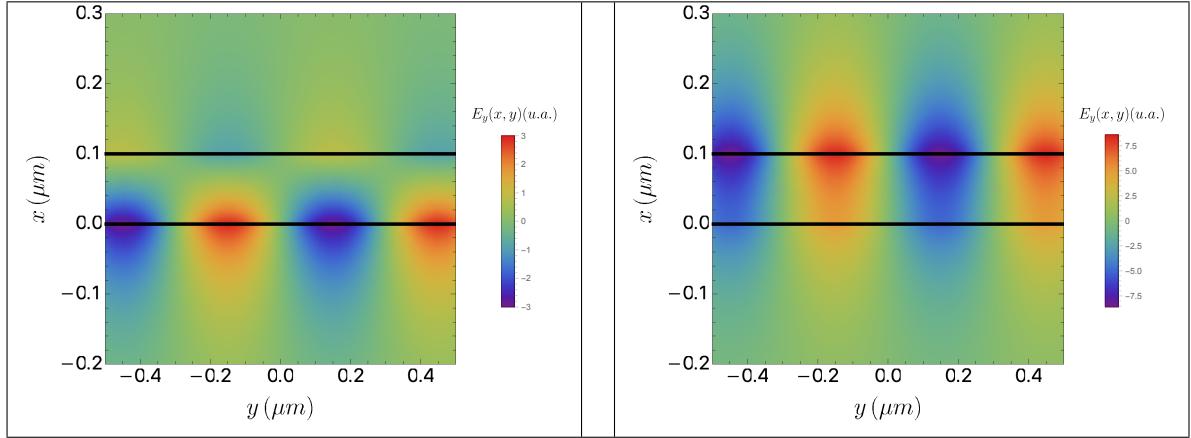


Figura 3.17: Perfil da componente y dos modos acústico (esquerda) e ótico (direita) da dupla camada de grafeno no vácuo ($\epsilon_1 = 1 = \epsilon_2 = \epsilon_3$), para uma distância entre folhas $d = 0.1 \mu\text{m}$. A energia de Fermi considerada é 0.5 eV e tomamos $\hbar\gamma = 0$. Além disto temos $\hbar\omega = 0.11 \text{ eV}$ (esquerda), $\hbar\omega = 0.18 \text{ eV}$ (direita) e $q = \pi/0.3 \mu\text{m}^{-1}$. As folhas de grafeno estão representadas pelas linhas pretas em $x = 0.1 \mu\text{m}$ e em $x = 0$.

4

Problema de Espalhamento de um Pacote de Ondas por um Orifício Retangular num Metal

Neste capítulo vamos considerar o problema de espalhamento de um pacote de ondas, com polarização TM, por um orifício de metal perfeito em diferentes contextos. Começamos por considerar apenas a abertura metálica. Seguidamente, passamos para o caso em que colocamos uma folha de grafeno na base da abertura e posteriormente acrescentamos outra folha de grafeno no topo da mesma. Finalmente, consideramos o problema em que a folha de grafeno está colocada a uma determinada distância após o metal.

O objetivo é então calcular a quantidade de energia que atravessa o sistema em causa e, nos casos em que consideramos a folha de grafeno, estudar a excitação de plasmões de superfície no mesmo. Para tal calculamos a refletância, a transmitância e a absorvância dos diversos sistemas. Os referidos plasmões manifestar-se-ão como um pico nas curvas da absorvância e refletância em função da energia da radiação incidente.

Para o cálculo destas três quantidades começamos por definir os campos elétrico e magnético nas diversas regiões espaciais que constituem o nosso sistema. Para a abertura metálica é necessário determinar os seus modos eletromagnéticos e nas restantes zonas escrevemos, em geral, os campos como transformadas de Fourier. Em seguida, aplicamos as condições fronteira a que obedecem as equações de Maxwell nas interfaces do sistema. Estando os campos escritos como integrais no espaço dos momentos (as referidas transformadas de Fourier), será necessário projetar as equações resultantes nas funções da base dos respetivos campos, ou seja, integrar estas equações multiplicadas pelas funções da base, no espaço. Com isto, obtemos um sistema de equações acopladas para os coeficientes dos campos eletromagnéticos. Resolvendo-o, ficamos com os campos totalmente determinados e podemos então calcular os vetores de Poynting associados e finalmente a refletância, transmitância e absorvância.

4.1 Abertura num Metal Perfeito

Nesta secção vamos considerar o caso em que temos apenas uma abertura finita num metal perfeito.

Para iniciar a resolução do problema é necessário começar por escrever os campos elétrico e magnético nas diferentes regiões do espaço. Começamos também por estabelecer que a onda se propaga no plano

$z = 0$ e na direção x e que a abertura está situada em $-a \leq y \leq a$ e $0 \leq x \leq d$, como podemos ver na figura 4.1.

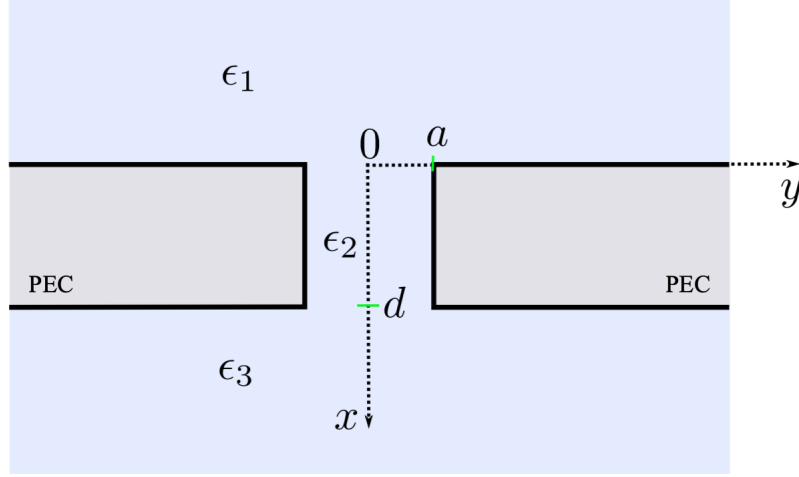


Figura 4.1: Abertura retangular perfurada num metal perfeito (PEC). O eixo z aponta para fora da folha. ϵ_1 , ϵ_2 e ϵ_3 são as funções dielétricas dos três meios considerados. $2a$ é a largura e d o comprimento da abertura.

Para a polarização da onda em questão temos, de forma geral:

$$\mathbf{H} = H_z(x, y)\mathbf{e}_z \quad (4.1)$$

$$\mathbf{E} = E_x(x, y)\mathbf{e}_x + E_y(x, y)\mathbf{e}_y \quad (4.2)$$

sendo este último obtido a partir do primeiro, por meio da equação (2.10), escrita na forma explícita:

$$\mathbf{E} = \frac{i\mu_0 c^2}{\omega \epsilon} (\partial_y H_z, -\partial_x H_z, 0). \quad (4.3)$$

Assim, tomando $H \equiv H_z$ e assumindo a dependência temporal harmónica da forma $e^{-i\omega t}$, definida anteriormente, da equação de Helmholtz (2.9) temos para o meio inicial de propagação da onda (meio 1, $x < 0$) as seguintes componentes para os campos elétricos e magnéticos:

$$\left\{ \begin{array}{l} H_1(x, y) = \int_{-k_1}^{k_1} e^{i(q_1 x + p y)} dp + \int_{-\infty}^{\infty} r_p e^{i(-q_1 x + p y)} dp \\ E_{1x}(x, y) = -\frac{\mu_0 c^2}{\omega \epsilon_1} \left[\int_{-k_1}^{k_1} p e^{i(q_1 x + p y)} dp + \int_{-\infty}^{\infty} p r_p e^{i(-q_1 x + p y)} dp \right] \\ E_{1y}(x, y) = \frac{\mu_0 c^2}{\omega \epsilon_1} \left[\int_{-k_1}^{k_1} q_1 e^{i(q_1 x + p y)} dp - \int_{-\infty}^{\infty} q_1 r_p e^{i(-q_1 x + p y)} dp \right] \end{array} \right. \quad (4.4)$$

sendo r_p a amplitude de reflexão, $q_1 = \sqrt{k_1^2 - p^2}$ e $k_1 = \sqrt{\epsilon_1} \omega / c$. Temos então o nosso pacote de ondas incidente, localizado no eixo y e a propagar-se na direção positiva do eixo x , com todos os momentos

possíveis no intervalo $[-k_1, k_1]$, contendo portanto apenas modos propagantes. Já a componente refletida dos campos é escrita como uma transformada de Fourier.

Para o interior da abertura, ou seja, no meio 2 temos:

$$\left\{ \begin{array}{l} H_2(x, y) = \sum_{n=0}^{\infty} [A_n \cos(\alpha_n x) + B_n \sin(\alpha_n x)] \cos(\beta_n (y + a)) \\ E_{2x}(x, y) = -\frac{i\mu_0 c^2}{\omega \epsilon_2} \sum_{n=0}^{\infty} [A_n \cos(\alpha_n x) + B_n \sin(\alpha_n x)] \beta_n \sin(\beta_n (y + a)) \\ E_{2y}(x, y) = -\frac{i\mu_0 c^2}{\omega \epsilon_2} \sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n [-A_n \sin(\alpha_n x) + B_n \cos(\alpha_n x)] \cos(\beta_n (y + a)) \end{array} \right. \quad (4.5)$$

com A_n e B_n sendo coeficientes a determinar, $\beta_n = \frac{n\pi}{2a}$, $\alpha_n = \sqrt{k_2^2 - \beta_n^2}$ e $k_2 = \sqrt{\epsilon_2} \omega / c$.

Finalmente, para o meio posterior à abertura (meio 3, $x > d$), temos os campos transmitidos dados por

$$\left\{ \begin{array}{l} H_t(x, y) = \int_{-\infty}^{\infty} t_p e^{i(q_3(x-d) + py)} dp \\ E_x^t(x, y) = -\frac{\mu_0 c^2}{\omega \epsilon_3} \int_{-\infty}^{\infty} p t_p e^{i(q_3(x-d) + py)} dp \\ E_y^t(x, y) = \frac{\mu_0 c^2}{\omega \epsilon_3} \int_{-\infty}^{\infty} q_3 t_p e^{i(q_3(x-d) + py)} dp \end{array} \right. \quad (4.6)$$

onde t_p é a amplitude de transmissão, $q_3 = \sqrt{k_3^2 - p^2}$ e $k_3 = \sqrt{\epsilon_3} \omega / c$ e estando também estes campos escritos como transformadas de Fourier.

Na figura 4.2, podemos ver representados os primeiros quatro modos próprios da cavidade definida pelo orifício.

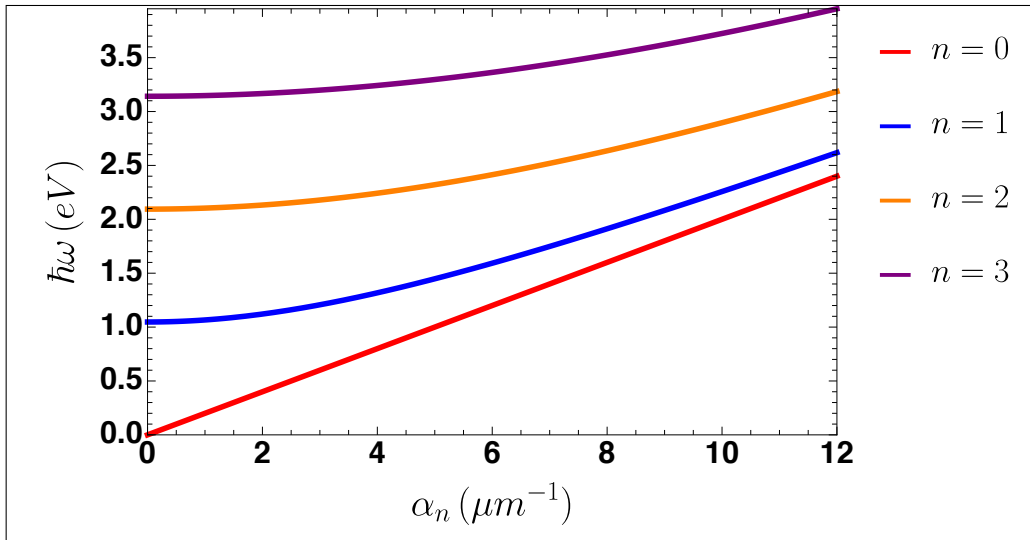


Figura 4.2: Representação gráfica dos modos próprios da cavidade considerada no problema. Consideramos $\epsilon_2 = 1$, $a = 0.3 \mu\text{m}$ e $d = 0.1 \mu\text{m}$.

Da análise da figura 4.2, vemos que o único modo que contribui para os campos com energias abaixo de 1 eV, é o $n = 0$ (modo fundamental). Como estamos interessados em ondas eletromagnéticas nesta gama de energias, podemos assumir que, no meio 2, os campos tomam a forma aproximada:

$$\begin{cases} H_2(x, y) = [A_0 \cos(k_2 x) + B_0 \sin(k_2 x)]\Theta(a - |y|) \\ E_{2x}(x, y) = 0 \\ E_{2y}(x, y) = \frac{i\mu_0 c^2 k_2}{\omega \epsilon_2} [A_0 \sin(k_2 x) - B_0 \cos(k_2 x)]\Theta(a - |y|). \end{cases} \quad (4.7)$$

Torna-se agora necessário relacionar os campos das diferentes regiões nas interfaces do sistema. Para tal, recorreremos às condições fronteira das equações de Maxwell, anteriormente introduzidas. A primeira é a igualdade dos campos magnéticos tangenciais em $x = 0$:

$$H_1(0, y) = H_2(0, y) \quad (4.8)$$

$$\Leftrightarrow \int_{-k_1}^{k_1} e^{ipy} dp + \int_{-\infty}^{\infty} r_p e^{ipy} dp = A_0 \Theta(a - |y|). \quad (4.9)$$

Para resolver esta equação de forma a obter o coeficiente A_0 , fazemos $\int_{-a}^a (4.9) dy$, que permite obter:

$$\Rightarrow A_0 = \int_{-k_1}^{k_1} \text{sinc}(pa) dp + \int_{-\infty}^{\infty} r_p \text{sinc}(pa) dp. \quad (4.10)$$

Temos então uma equação para o coeficiente A_0 em função de r_p .

A segunda condição fronteira a considerar é a igualdade das componentes tangenciais dos campos elétricos

$$E_{1y}(0, y) = E_{2y}(0, y) \quad (4.11)$$

$$\Leftrightarrow \int_{-k_1}^{k_1} \frac{q_1}{\epsilon_1} e^{ipy} dp - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{q_1}{\epsilon_1} r_p e^{ipy} dp = \frac{-ik_2}{\epsilon_2} B_0 \Theta(a - |y|) \quad (4.12)$$

Desta vez, para resolver para B_0 fazemos $\int_{-\infty}^{\infty} (4.12) e^{-i\gamma y} dy$ e utilizamos as relações de ortogonalidade das ondas planas para obter uma equação para o coeficiente r_p :

$$\Rightarrow r_p = \frac{i\epsilon_1 k_2 a}{\pi q_1 \epsilon_2} B_0 \text{sinc}(pa) + \Theta(k_1 - |p|). \quad (4.13)$$

Substituindo agora (4.13) em (4.10) ficamos com uma equação para os coeficientes A_0 e B_0 :

$$\Rightarrow A_0 = 2I_1 + ik_2 \frac{\epsilon_1 a}{\epsilon_2 \pi} I_2 B_0 \quad (4.14)$$

em que I_1 e I_2 são os seguintes integrais:

$$I_1 = \int_{-k_1}^{k_1} \text{sinc}(pa) dp \quad (4.15)$$

$$I_2 = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\text{sinc}^2(pa)}{q_1} dp. \quad (4.16)$$

Em $x = d$ temos mais duas condições fronteira. Começando pelo campo magnético temos

$$H_2(d, y) = H_t(d, y) \quad (4.17)$$

$$\Leftrightarrow [A_0 \cos(k_2 d) + B_0 \sin(k_2 d)]\Theta(a - |y|) = \int_{-\infty}^{+\infty} t_p e^{ipy} dp \quad (4.18)$$

e fazendo $\int_{-a}^a (4.18) dy$ obtemos

$$A_0 \cos(k_2 d) + B_0 \sin(k_2 d) = \int_{-\infty}^{+\infty} t_p \text{sinc}(pa) dp. \quad (4.19)$$

Aplicando agora a condição que dá a continuidade do campo elétrico tangencial:

$$E_{2y}(d, y) = E_y^t(d, y) \quad (4.20)$$

$$\Leftrightarrow \frac{ik_2}{\epsilon_2} [A_0 \sin(k_2 d) - B_0 \cos(k_2 d)]\Theta(a - |y|) = \frac{1}{\epsilon_3} \int_{-\infty}^{\infty} q_3 t_p e^{ipy} dp \quad (4.21)$$

que por meio de $\int_{-\infty}^{+\infty} (4.21) e^{-i\gamma y} dy$ permite escrever

$$t_p = \frac{-ia\epsilon_3 k_2}{\pi q_3 \epsilon_2} [B_0 \cos(k_2 d) - A_0 \sin(k_2 d)] \text{sinc}(pa) \quad (4.22)$$

e conseqüentemente, combinando esta última com (4.19), obter outra equação para os coeficientes A_0 e B_0 :

$$\Rightarrow A_0 \cos(k_2 d) + B_0 \sin(k_2 d) = \frac{-ia\epsilon_3 k_2}{\pi \epsilon_2} [B_0 \cos(k_2 d) - A_0 \sin(k_2 d)] I_3 \quad (4.23)$$

$$\Leftrightarrow B_0 = -G A_0, \quad (4.24)$$

sendo G definido por

$$G \equiv \frac{\cos(k_2 d) - i\epsilon_3/\epsilon_2 k_2 a/\pi \sin(k_2 d) I_3}{\sin(k_2 d) + i\epsilon_3/\epsilon_2 k_2 a/\pi \cos(k_2 d) I_3} \quad (4.25)$$

e com

$$I_3 = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\text{sinc}^2(pa)}{q_3} dp. \quad (4.26)$$

Assim, combinando as equações (4.14) e (4.24) e resolvendo para A_0 obtemos:

$$A_0 = \frac{2I_1}{1 + ik_2 \epsilon_1/\epsilon_2 a/\pi I_2 G}. \quad (4.27)$$

Temos assim determinados os coeficientes A_0 e B_0 que juntamente com as equações (4.13) e (4.22), nos dão os coeficientes r_p e t_p a partir dos primeiros e que nos permitem definir completamente os campos em todas as regiões do espaço.

Finalmente, é necessário calcular os vetores de Poynting incidente, refletido e transmitido por meio da equação

$$\mathbf{S} = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{2} \Re[\mathbf{E} \times \mathbf{H}^*] dy \quad (4.28)$$

e tendo em conta que apenas a componente normal à superfície do metal contribui para a transferência de energia através da abertura, escrevemos:

$$\left\{ \begin{array}{l} S_x^i = \frac{\mu_0 c^2 \pi}{\omega} \Re \left[\frac{1}{\epsilon_1} \int_{-k_1}^{k_1} q_1 dp \right] = \frac{\mu_0 c^2 \pi^2}{2\omega} \Re \left[\frac{k_1^2}{\epsilon_1} \right] \\ S_x^r = -\frac{\mu_0 c^2 \pi}{\omega} \Re \left[\frac{1}{\epsilon_1} \int_{-k_1}^{k_1} |r_p|^2 q_1 dp \right] \\ S_x^t = \frac{\mu_0 c^2 \pi}{\omega} \Re \left[\frac{1}{\epsilon_3} \int_{-k_3}^{k_3} |t_p|^2 q_3 dp \right] \end{array} \right. \quad (4.29)$$

que correspondem às componentes x (direção de propagação) dos vetores incidentes, refletido e transmitido.

Consequentemente, temos a refletância e a transmitância do sistema dadas por

$$R = \left| \frac{S_x^r}{S_x^i} \right| \quad (4.30)$$

$$T = \left| \frac{S_x^t}{S_x^i} \right|. \quad (4.31)$$

Passamos agora para a representação gráfica destas grandezas físicas. Na figura 4.3, fazemos uma representação das mesmas como função da energia da onda incidente, para dois comprimentos (d) de abertura distintos: um com $d = 0.1 \mu m$ (lado esquerdo) e outro com $d = 3 \mu m$ (lado direito). Em ambos os casos consideramos uma largura ($2a$) de $0.6 \mu m$ e que os três meios são o vazio. Podemos ver que com a diminuição da energia, a refletância tende para 1 e a transmitância para 0, uma vez que o comprimento de onda associado a esta é maior e portanto o pacote de ondas interage menos com a abertura. No limite em que este for muito maior que a largura do orifício a onda reflete-se como se este não existisse. Com o aumento da frequência, a abertura é cada vez mais significativa, pois a sua largura passa a ser da mesma ordem de grandeza do comprimento de onda da luz e portanto, ocorre um aumento da transmitância.

Além disto, é importante notar que com orifícios mais compridos existem oscilações de Fabry-Perot [13, 14, 21, 22], visíveis no gráfico do lado direito da figura. Os extremos da transmitância e da refletância têm uma periodicidade de aproximadamente $\frac{\pi c}{d}$ e o valor de ω para o qual ocorre o primeiro máximo da transmitância segue a seguinte relação $0.015 + 0.466 \sin(0.305\pi/d)$ como função de d , que resulta de um ajuste numérico e se encontra representado no lado esquerdo da figura 4.4.

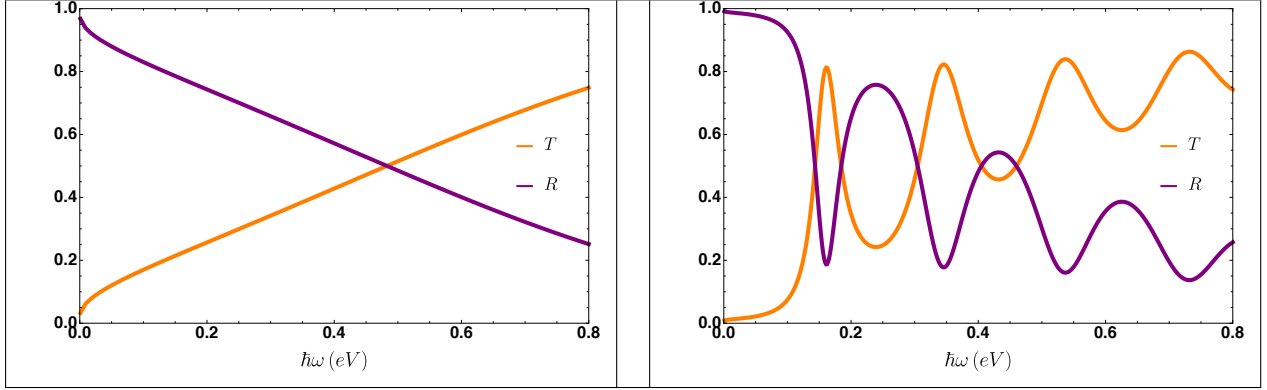


Figura 4.3: Transmitância e refletância do sistema em função da energia dos fótons para $a = 0.3 \mu m$, $d = 0.1 \mu m$ (esquerda) e $d = 3 \mu m$ (direita). Ambos os casos são para $\epsilon_1 = \epsilon_2 = \epsilon_3 = 1$.

Em seguida, efetuamos um estudo de T e R com a variação do comprimento d da abertura. Podemos ver no lado direito da figura 4.5 as suas representações gráficas, estando o eixo do x normalizado ao comprimento de onda da radiação incidente. O comprimento de onda referido é na realidade, a largura do pico do pacote de ondas incidente, à entrada da abertura, isto é, em $x = 0$, estando este representado no lado direito da figura 4.4. O valor desta largura é dado pela mesma expressão que o comprimento de onda de uma onda eletromagnética num meio dielétrico: $\frac{2\pi c}{\omega\sqrt{\epsilon}}$. A distância entre os zeros desta função é então dada por $\frac{\pi c}{\omega\sqrt{\epsilon_2}}$.

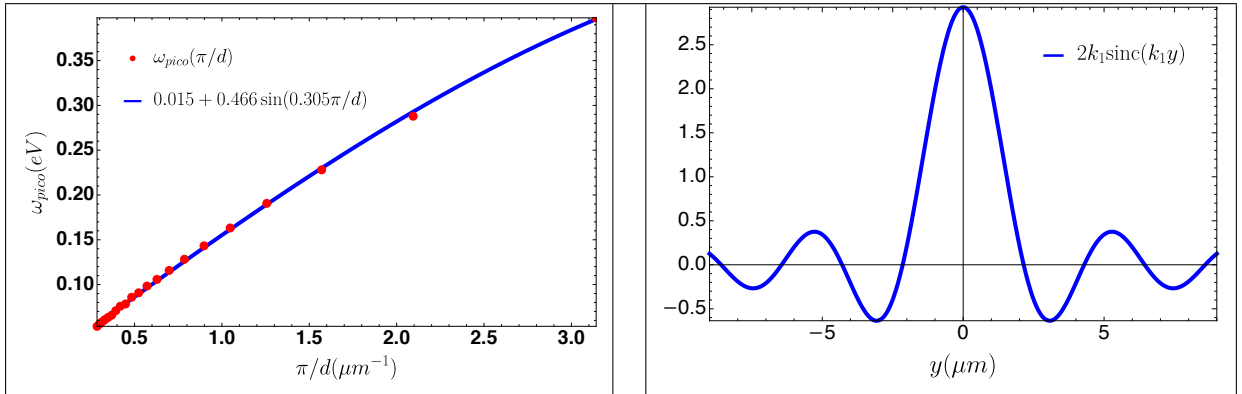


Figura 4.4: Esquerda: valores de ω para o qual ocorrem os primeiros máximos da transmitância para diferentes comprimentos de abertura. Os parâmetros considerados são $a = 0.3 \mu m$ e $\epsilon_1 = 1 = \epsilon_2 = \epsilon_3$. Direita: forma do pacote de ondas à entrada do orifício metálico ($x = 0$) e $\omega = 0.3 \text{ eV}$.

Assim, vemos que com a variação do comprimento da abertura voltamos a ter oscilações periódicas, tal como com a variação da frequência para valores de d elevados. Estes extremos na transmitância mostram que existem certos comprimentos de onda que maximizam a energia transmitida através do mesmo. O período destas oscilações é $1/2$ e estando neste gráfico o comprimento da abertura normalizado ao comprimento de onda considerado, a distância entre os picos é então meio comprimento de onda, ou seja, escolhendo um valor de d para o qual temos um máximo da transmitância T e adicionando lhe o valor da

distancia entre os zeros do pacote de ondas à entrada do orifício, voltamos a ter um máximo de T com a mesma intensidade, isto é, $T_{max}(d) = T_{max}(d + \frac{\pi c}{\omega \sqrt{\epsilon_2}})$

Além disto, no lado esquerdo da figura 4.5, efetuamos um estudo com a variação da largura do orifício. Como seria de esperar, com o aumento de a temos um aumento de T , pois temos um comprimento de onda fixo e aberturas cada vez maiores. No fundo, aumentar o valor de a tem o mesmo efeito na refletância e transmitância que aumentar a frequência da luz, uma vez que ter um comprimento de onda fixo e aumentar o valor da largura é o equivalente a manter fixa a largura e diminuir o comprimento de onda.

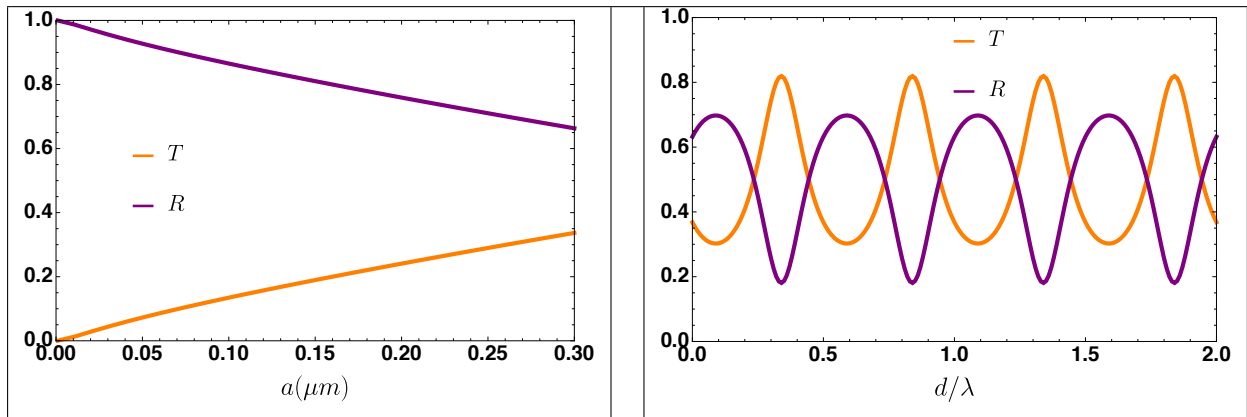


Figura 4.5: Esquerda: refletância e transmitância do sistema em função de a para $d = 0.1 \mu m$. Direita: refletância e transmitância do sistema em função do comprimento d da abertura para $a = 0.3 \mu m$. Ambos os casos são para $\epsilon_1 = \epsilon_2 = \epsilon_3 = 1$ e $\hbar\omega = 0.29 eV$.

Finalmente, na figura 4.6 podemos observar a variação da transmitância com d (esquerda)/ a (direita) e com $\hbar\omega$ em simultâneo, o que permite ter uma visão mais geral que as anteriormente apresentadas para uma variável única. Por exemplo, no lado esquerdo da figura, fixando $d = 3 \mu m$ e analisando um corte vertical do gráfico podemos ver as oscilações de T com a frequência visíveis na figura 4.3 e fixando $\hbar\omega = 0.29 eV$ e fazendo um corte horizontal, observam-se as oscilações com o comprimento da abertura, presentes na figura 4.5.

A análise feita nesta secção serve então como base para as seguintes, pois embora os sistemas que iremos tratar daqui em diante tenham também grafeno na sua constituição, o princípio fundamental é o mesmo.

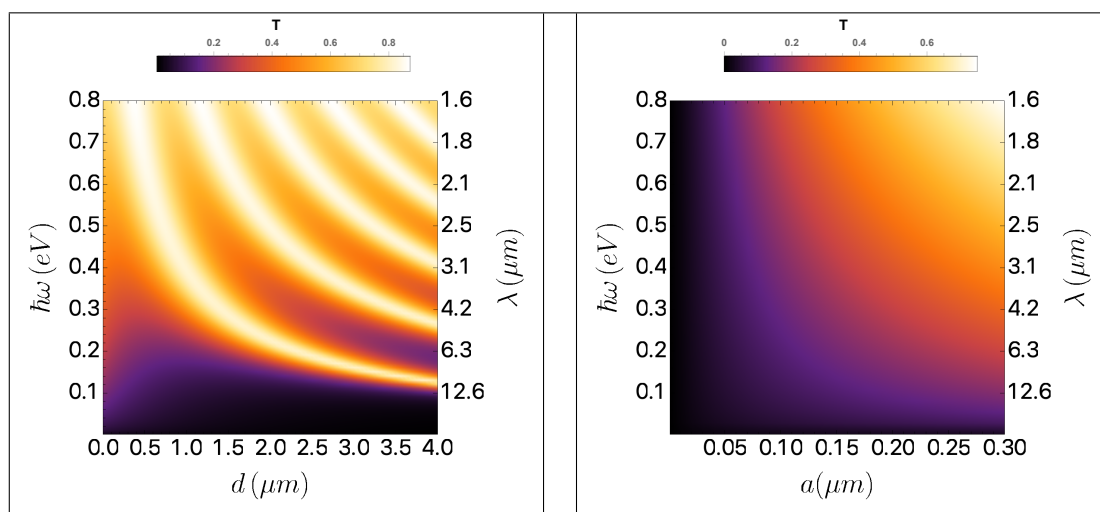


Figura 4.6: Esquerda: transmitância do sistema em função do comprimento d e da energia dos fótons para $\epsilon_1 = \epsilon_2 = \epsilon_3 = 1$ e $a = 0.3 \mu\text{m}$. Direita: transmitância do sistema em função de a e da energia dos fótons para $\epsilon_1 = \epsilon_2 = \epsilon_3 = 1$ e $d = 0.1 \mu\text{m}$. No eixo do lado direito dos gráficos podemos ver o comprimento de onda correspondente a cada energia apresentada no eixo do lado esquerdo.

4.2 Abertura Metálica com uma Folha de Grafeno na Base

Consideramos agora que temos uma folha de grafeno em $x = d$ e $-a \leq y \leq a$, isto é, na fronteira entre a parte inferior do orifício e o meio 3, como é visível na figura 4.7.

O objetivo desta secção é então excitar plasmões de superfície no grafeno, com a incidência do pacote de ondas introduzido no início do capítulo, que se manifestarão por uma ressonância na curva da absorvância do sistema.

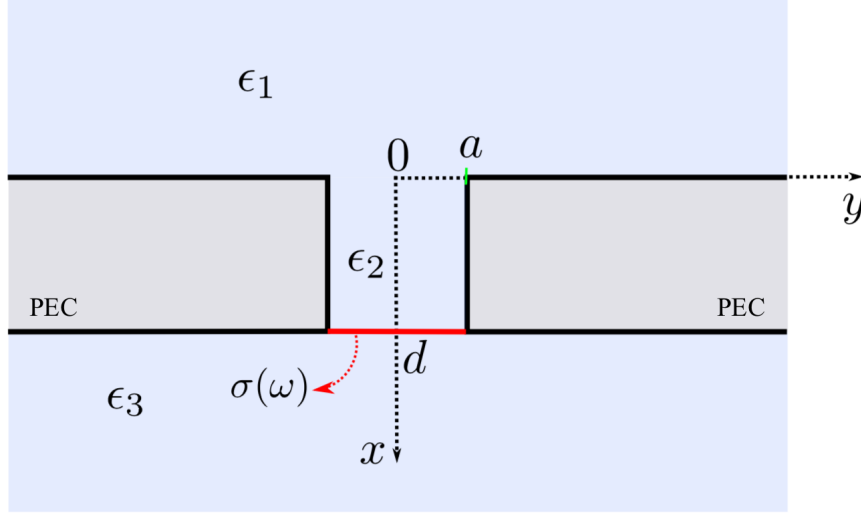


Figura 4.7: Abertura retangular perfurada num metal perfeito (PEC), com uma folha de grafeno de condutividade $\sigma(\omega)$ na base. O eixo z aponta para fora da folha. ϵ_1 , ϵ_2 e ϵ_3 são as funções dielétricas dos três meios considerados. $2a$ é a largura e d o comprimento da abertura.

Assim sendo, começamos por considerar apenas o modo fundamental da cavidade como nos problemas anteriores. Relativamente ao caso estudado na secção 4.1, só a condição fronteira dos campos magnéticos tangenciais na superfície onde é inserido o grafeno se altera e toma a forma

$$H_2(d, y) - H_t(d, y) = (\mathbf{J} \times \mathbf{n})_z \quad (4.32)$$

sendo $\mathbf{n} = (-1, 0, 0)$, $\mathbf{J} = J_y \mathbf{u}_y = \sigma(\omega) E_y \mathbf{u}_y$, onde $\sigma(\omega)$ é a condutividade do grafeno derivada anteriormente, dada pela equação (2.40), e portanto,

$$H_2(d, y) - H_t(d, y) = \sigma(\omega) E_{2y}(d, y) \quad (4.33)$$

$$\Leftrightarrow [A_0 \cos(k_2 d) + B_0 \sin(k_2 d)] \Theta(a - |y|) - \int_{-\infty}^{+\infty} t_p e^{ipy} dp = \sigma(\omega) \gamma_2 i k_2 [A_0 \sin(k_2 d) - B_0 \cos(k_2 d)] \Theta(a - |y|). \quad (4.34)$$

Fazendo agora $\int_{-a}^a (4.34) dy$ chegamos a

$$A_0 \cos(k_2 d) + B_0 \sin(k_2 d) - \int_{-\infty}^{+\infty} t_p \text{sinc}(pa) dp = \sigma(\omega) \gamma_2 i k_2 [A_0 \sin(k_2 d) - B_0 \cos(k_2 d)]. \quad (4.35)$$

Substituindo agora nesta última a equação (4.22), podemos obter mais uma vez a relação $B_0 = -GA_0$, sendo a função G definida na secção 4.1 desta vez dada por

$$G = \frac{\cos(k_2 d) - i[\gamma_2 \sigma(\omega) + \epsilon_3 / \epsilon_2 a / \pi I_3] k_2 \sin(k_2 d)}{\sin(k_2 d) + i[\gamma_2 \sigma(\omega) + \epsilon_3 / \epsilon_2 a / \pi I_3] k_2 \cos(k_2 d)}, \quad (4.36)$$

estando todas as quantidades presentes em G definidas nas secções anteriores. Todas as restantes equações para os coeficientes dos campos se mantêm inalteradas, incluindo a equação que define A_0 na qual a única diferença relativamente à equação (4.27) é a alteração referida na função G .

Com isto, temos tudo o que precisamos para calcular os vetores de Poynting da mesma forma que nas secções anteriores e assim obter a transmitância, refletância e absorvância do sistema.

Alternativamente, podemos considerar dois modos na cavidade para a resolução do problema, ou seja, além do modo fundamental consideramos também o modo par que se segue, o $n = 2$ (devido à simetria do problema o pacote de ondas só acopla aos modos pares).

Para isso, reescrevemos os campos elétrico e magnético no meio 2 como:

$$\begin{cases} H_2(x, y) = [A_0 \cos(k_2x) + B_0 \sin(k_2x) + [A_2 \cos(\alpha_2x) + B_2 \sin(\alpha_2x)] \cos(\beta_2(y + a))] \Theta(a - |y|) \\ E_{2x}(x, y) = -i\gamma_2\beta_2[A_2 \cos(\alpha_2x) + B_2 \sin(\alpha_2x)] \sin(\beta_2(y + a)) \Theta(a - |y|) \\ E_{2y}(x, y) = i\gamma_2[k_2(A_0 \sin(k_2x) - B_0 \cos(k_2x)) + \alpha_2(A_2 \sin(\alpha_2x) - B_2 \cos(\alpha_2x)) \cos(\beta_2(y + a))] \Theta(a - |y|) \end{cases} \quad (4.37)$$

sendo $\beta_2 = \frac{\pi}{a}$ e $\alpha_2 = \sqrt{k_2^2 - \beta_2^2}$.

Passando para a aplicação das condições fronteira, começamos em $x = 0$ e integrando a equação da continuidade do campo magnético, $\int_{-a}^a H_1(0, y) = H_2(0, y) dy$, temos

$$A_0 = I_1 + \int_{-\infty}^{+\infty} r_p \text{sinc}(pa) dp \quad (4.38)$$

onde

$$I_1 = \int_{-k_1}^{k_1} \text{sinc}(pa) dp \quad (4.39)$$

Fazendo agora $\int_{-a}^a H_1(0, y) = H_2(0, y) \cos(\beta_2(y + a)) dy$ obtemos

$$A_2 = 2aI_2 + 2a \int_{-\infty}^{+\infty} r_p \frac{p \sin(pa)}{a^2p^2 - \pi^2} dp \quad (4.40)$$

sendo

$$I_2 = \int_{-k_1}^{k_1} \frac{p \sin(pa)}{a^2p^2 - \pi^2} dp. \quad (4.41)$$

Passando para a equação do campo elétrico, $\int_{-\infty}^{+\infty} [E_{1y}(0, y) = E_{2y}(0, y)] e^{-ipy} dy$, chegamos a:

$$r_p = \frac{i\epsilon_1 a}{\epsilon_2 \pi q_1} \left[k_2 B_0 \text{sinc}(pa) + \alpha_2 B_2 \frac{pa \sin(pa)}{a^2p^2 - \pi^2} \right] + \Theta(k_1 - |p|). \quad (4.42)$$

Podemos agora substituir a equação anterior em (4.38) e (4.40), para assim obter:

$$\begin{cases} A_0 = 2I_1 + i\Delta_1 k_2 B_0 I_3 + i\Delta_1 \alpha_2 B_2 I_4 \\ A_2 = 4aI_2 + 2i\Delta_1 k_2 B_0 I_4 + 2i\Delta_1 a^2 \alpha_2 B_2 I_5 \end{cases} \quad (4.43)$$

onde

$$I_3 = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\text{sinc}^2(pa)}{q_1} dp \quad (4.44)$$

$$I_4 = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sin^2(pa)}{q_1(p^2 a^2 - \pi^2)} dp \quad (4.45)$$

$$I_5 = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{p^2 \sin^2(pa)}{q_1(p^2 a^2 - \pi^2)^2} dp \quad (4.46)$$

$$\Delta_1 = \frac{\epsilon_1 a}{\epsilon_2 \pi}. \quad (4.47)$$

A outra interface do sistema é em $x = d$. Considerando a condição fronteira do campo magnético, $\int_{-a}^a [H_2(d, y) - H_t(d, y) = \sigma(\omega) E_{2y}(d, y)] dy$, podemos chegar a

$$A_0 \cos(k_2 d) + B_0 \sin(k_2 d) - \int_{-\infty}^{+\infty} t_p \text{sinc}(pa) dp = \quad (4.48)$$

$$= i\sigma(\omega) \gamma_2 k_2 [A_0 \sin(k_2 d) - B_0 \cos(k_2 d)]. \quad (4.49)$$

A mesma permite ainda, através de $\int_{-a}^a [H_2(d, y) - H_t(d, y) = \sigma(\omega) E_{2y}(d, y)] \cos(\beta_2(y + a)) dy$, obter

$$A_2 \cos(\alpha_2 d) + B_2 \sin(\alpha_2 d) - 2a \int_{-\infty}^{+\infty} t_p \frac{p \sin(pa)}{a^2 p^2 - \pi^2} dp = \quad (4.50)$$

$$= i\sigma(\omega) \gamma_2 \alpha_2 [A_2 \sin(\alpha_2 d) - B_2 \cos(\alpha_2 d)]. \quad (4.51)$$

Utilizando agora a equação da continuidade do campo elétrico tangencial na mesma interface, $\int_{-\infty}^{+\infty} [E_{2y}(d, y) = E_y^t(d, y)] e^{-ipy} dy$, temos

$$t_p = \frac{ik_2 \epsilon_3 a}{\pi \epsilon_2 q_3} [A_0 \sin(k_2 d) - B_0 \cos(k_2 d)] \text{sinc}(pa) + \frac{i\alpha_2 \epsilon_3 a}{\pi \epsilon_2 q_3} [A_2 \sin(\alpha_2 d) - B_2 \cos(\alpha_2 d)] \frac{ap \sin(pa)}{p^2 a^2 - \pi^2}. \quad (4.52)$$

Podemos então substituir esta última nas equações (4.49) e (4.51) para assim obter

$$\left\{ \begin{array}{l} A_0 \cos(k_2 d) + B_0 \sin(k_2 d) - i\Delta_2 k_2 [A_0 \sin(k_2 d) - B_0 \cos(k_2 d)] I_6 - i\Delta_2 \alpha_2 [A_2 \sin(\alpha_2 d) - B_2 \cos(\alpha_2 d)] I_7 = \\ \quad = i\sigma(\omega) \gamma_2 k_2 [A_0 \sin(k_2 d) - B_0 \cos(k_2 d)] \\ A_2 \cos(\alpha_2 d) + B_2 \sin(\alpha_2 d) - 2i\Delta_2 k_2 I_7 [A_0 \sin(k_2 d) - B_0 \cos(k_2 d)] - 2i\Delta_2 \alpha_2 a^2 I_8 [A_2 \sin(\alpha_2 d) - B_2 \cos(\alpha_2 d)] = \\ \quad = i\sigma(\omega) \gamma_2 \alpha_2 [A_2 \sin(\alpha_2 d) - B_2 \cos(\alpha_2 d)] \end{array} \right. \quad (4.53)$$

onde

$$I_6 = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\text{sinc}^2(pa)}{q_3} dp \quad (4.54)$$

$$I_7 = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sin^2(pa)}{q_3(p^2 a^2 - \pi^2)} dp \quad (4.55)$$

$$I_8 = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{p^2 \sin^2(pa)}{q_3(p^2 a^2 - \pi^2)^2} dp \quad (4.56)$$

$$\Delta_2 = \frac{\epsilon_3 a}{\epsilon_2 \pi}. \quad (4.57)$$

Resta apenas resolver o sistema de quatro equações acopladas, (4.43) e (4.53), para assim obter os coeficientes A_0 , B_0 , A_2 e B_2 , que permitem definir completamente os campos em todas as regiões do espaço. Sendo o sistema demasiado complexo, recorreremos a ferramentas computacionais para o resolver e, devido ao facto das expressões para os coeficientes serem muito extensas, não as apresentamos no presente trabalho.

Assim, utilizando as fórmulas (4.29) para os vetores de Poynting podemos obter R , T e A e verificar se para excitar plasmões necessitamos de dois modos da abertura ou se apenas um é suficiente. Para tal, fazemos uma representação gráfica destas três grandezas em função da frequência da luz. Podemos vê-las

na figura 4.8, onde no lado esquerdo temos a refletância e transmitância e no lado direito a absorvância, ambos os casos para duas energias de Fermi distintas.

São visíveis dois picos de A para cada valor de E_F , sendo que os segundos apenas aparecem quando resolvemos o problema considerando os dois modos da cavidade. Estes correspondem à excitação de plasmões no grafeno com essa energia e com momento π/a , estando estas duas quantidades físicas relacionadas pela relação de dispersão (3.13), apresentada no capítulo anterior. Assim sendo, o quociente entre estas duas frequências deve ser dado por $\sqrt{E_{F2}/E_{F1}}$, o que se verifica, pois temos $\frac{\omega(2E_F)}{\omega(E_F)} \approx \sqrt{2}$.

O facto destes SPP's terem momento π/a , indica-nos que estamos a excitar o modo evanescente $n = 2$, uma vez que os modos da abertura têm momento $\frac{n\pi}{2a}$. Isto quer dizer que quantos mais modos da cavidade considerarmos mais máximos aparecerão no gráfico da absorvância. O plasmão seguinte será então o modo $n = 4$ com momento $2\pi/a$ e podemos prever a sua energia por meio da equação (3.13). Assim, vemos que o acoplamento do pacote de ondas aos modos evanescentes da abertura metálica, se manifesta como plasmões de superfície no grafeno.

Por outro lado, os primeiros picos da absorvância que se observam para cada energia de Fermi não têm origem plasmónica e estão relacionados com a competição entre dois processos: por um lado, para baixas frequências vemos na figura 4.9 que a parte real da condutividade do grafeno aumenta (o que aumenta a absorvância e diminui a refletância) e que este aumento depende do valor de E_F ; por outro lado, para energias mais baixas, o pacote de ondas incidente tem uma largura maior no espaço de coordenadas e portanto uma menor parte da sua energia interage com o grafeno e com a própria abertura, o que aumenta a refletância e diminui a absorvância.

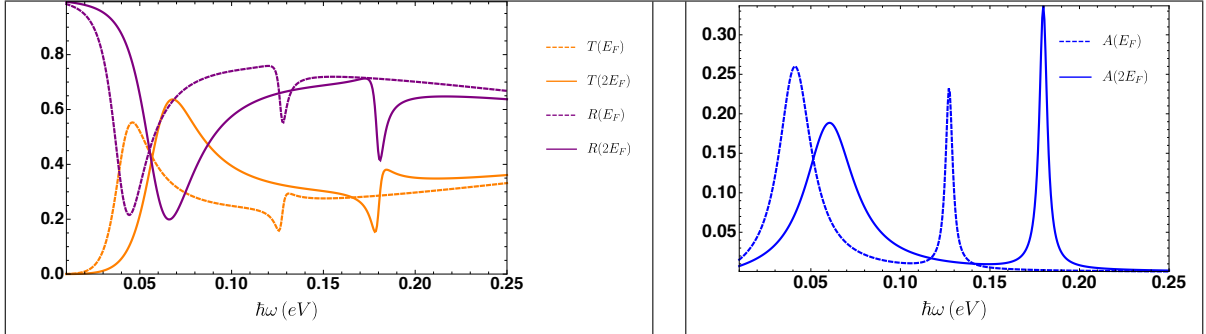


Figura 4.8: Transmitância e refletância (esquerda) e absorvância (direita) do sistema em função da energia dos fótons para $E_F = 0.5$ eV, $\hbar\gamma = 0.004$ eV, $a = 0.3$ μm , $d = 0.1$ μm e $\epsilon_1 = \epsilon_2 = \epsilon_3 = 1$.

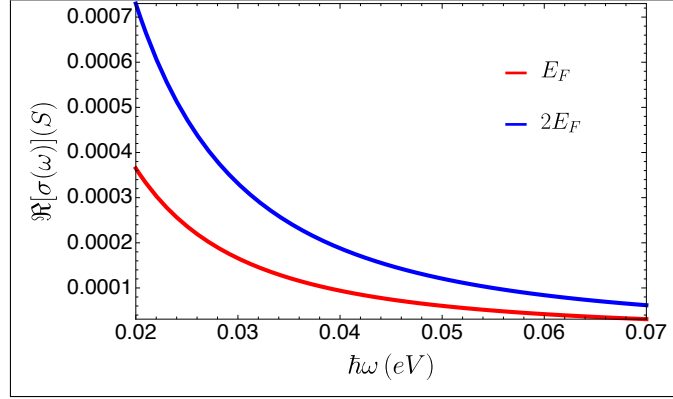


Figura 4.9: Parte real da condutividade do grafeno, no intervalo de frequências em que ocorrem os primeiros picos do lado direito da figura 4.8, para $E_F = 0.5$ eV e $\hbar\gamma = 0.004$ eV.

Com o objetivo de estudar a variação da frequência dos picos da absorvância com a energia de Fermi, apresentamos a figura 4.10 que, além dos valores de $\hbar\omega$ obtidos a partir dos gráficos da absorvância para diferentes valores de E_F , tem também um ajuste numérico feito a estes pontos que confirma a dependência da energia dos SPP's com $\sqrt{E_F}$. Esta dependência já foi apresentada anteriormente por meio da equação (3.13).

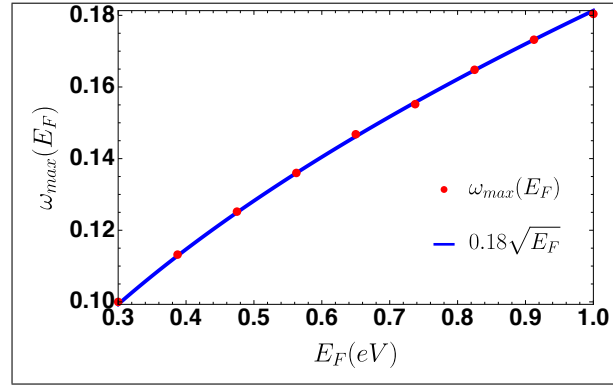


Figura 4.10: Valores de $\hbar\omega$ para os quais ocorrem os picos na absorvância do sistema para diversas energias de Fermi do grafeno. Os pontos a vermelho são determinados numericamente a partir do gráfico de A e a linha azul resulta de um ajuste aos pontos. Os parâmetros considerados são $\epsilon_1 = \epsilon_2 = \epsilon_3 = 1$, $a = 0.3 \mu m$, $d = 0.1 \mu m$ e $\hbar\gamma = 0.004$ eV.

Na figura 4.11, podemos visualizar o perfil espacial dos campos elétricos para a energia do pico da absorvância correspondente ao SPP com $E_F = 0.5$ eV. Podemos observar que existe uma distribuição de carga ao longo do grafeno, com uma carga negativa seguida por uma positiva, como indicado pelas linhas de campo. São estes os modos plasmônicos localizados no grafeno entre as duas extremidades da fenda.

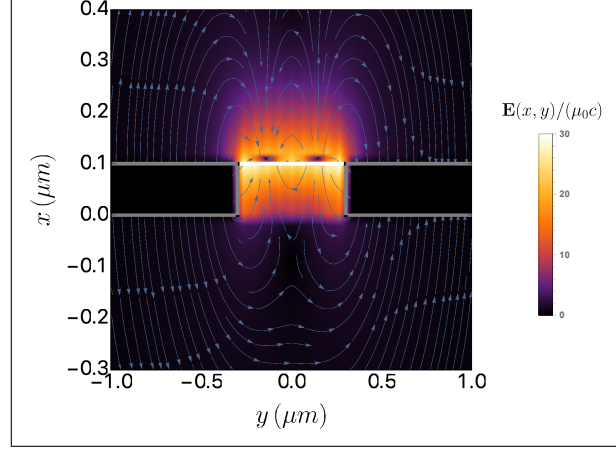


Figura 4.11: Perfil dos campos elétricos nas três regiões do espaço para $E_F = 0.5$ eV, $\hbar\gamma = 0.004$ eV, $a = 0.3$ μm , $\hbar\omega = 0.127$ eV, $d = 0.1$ μm e $\epsilon_1 = \epsilon_2 = \epsilon_3 = 1$. A folha de grafeno é representada pela linha branca e a superfície do metal pelas linhas cinzentas. A região a preto é o interior do metal que, sendo perfeito, não tem campos no seu interior.

Além disto, consideramos também um caso em que temos $d = 3$ μm , tal como no primeiro problema, que se encontra representado na figura 4.12. Nesta podemos verificar que existem as mesmas oscilações de R e T com a frequência, o que mostra que quando temos orifícios mais compridos e para energias mais altas, a folha de grafeno não tem qualquer influência, até porque as linhas correspondentes a energias de Fermi distintas estão sobrepostas e a absorvância é praticamente nula para estas energias. É importante referir que estas figuras foram produzidas considerando apenas o modo fundamental da cavidade, uma vez que como o efeito do grafeno é mínimo, considerar o modo $n = 2$ quase não altera o comportamento das funções representadas. Este último modo é importante para visualizar a existência de plasmões e não para estudar os efeitos da cavidade.

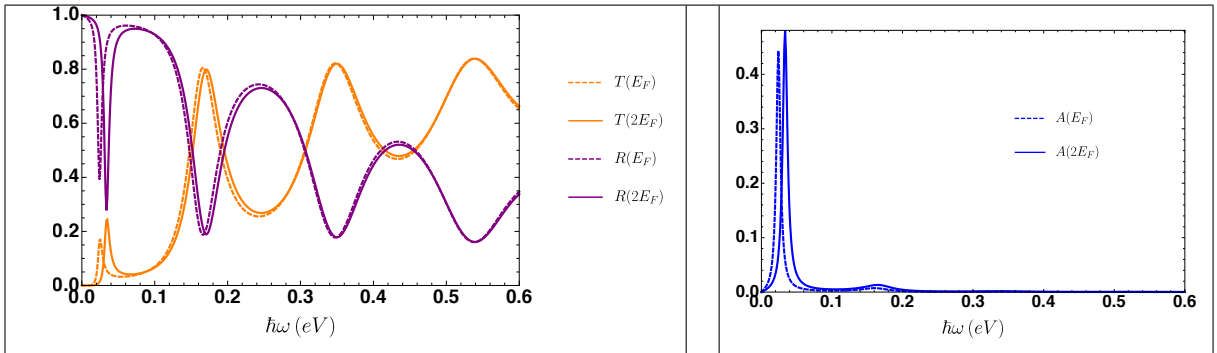


Figura 4.12: Transmitância e refletância (esquerda) e absorvância (direita) do sistema em função da energia dos fótons para $E_F = 0.5$ eV, $\hbar\gamma = 0.004$ eV, $a = 0.3$ μm , $d = 3$ μm e $\epsilon_1 = \epsilon_2 = \epsilon_3 = 1$.

O estudo da variação da reflectância, absorvância e transmitância em função de a é ilustrado na figura 4.13. Estando os picos da absorvância a variar com a energia de Fermi podemos mais uma vez

interpretá-los como SPP's, sendo que neste caso ambos têm a mesma energia ($\hbar\omega = 0.2$ eV), mas cada um tem momento π/a_{pico} , em que a_{pico} é o valor de a para o qual ocorre o pico da absorvância para cada valor de E_F .

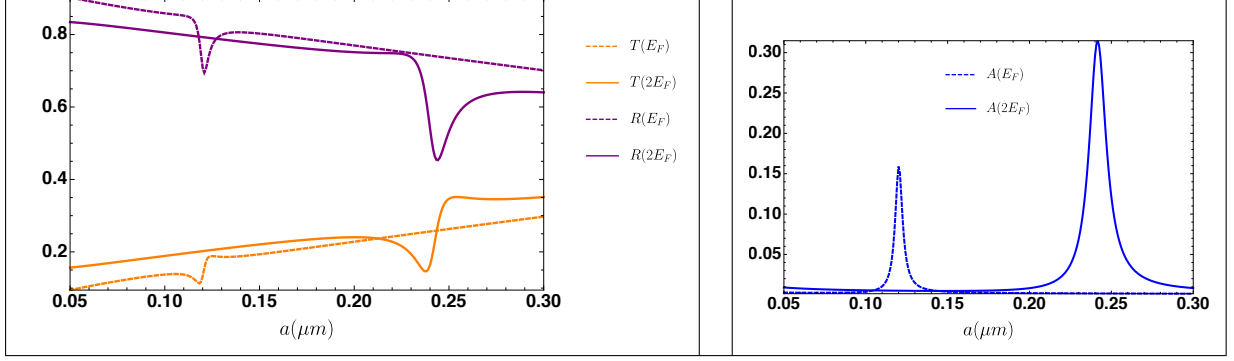


Figura 4.13: Transmitância e refletância (esquerda) e absorvância (direita) do sistema em função de a para $\hbar\omega = 0.2$ eV, $E_F = 0.5$ eV, $\hbar\gamma = 0.004$ eV, $d = 0.1$ μm e $\epsilon_1 = \epsilon_2 = \epsilon_3 = 1$.

Na figura 4.14 podemos observar simultaneamente a variação da absorvância com a frequência da luz e com a largura da abertura, onde a linha brilhante estreita representa a relação entre a energia dos plasmões e o parâmetro a . Vemos que quanto mais largo for o orifício, menor será a energia do SPP, o que faz sentido, pois sendo o momento proporcional a $1/a$, um valor de a maior, corresponde a um momento menor e conseqüentemente a um valor de ω menor. Por outro lado, a linha brilhante mais larga tem a mesma origem que os primeiros picos do painel direito da figura 4.8, não estando por isso relacionada com o fenômeno de excitação de plasmões.

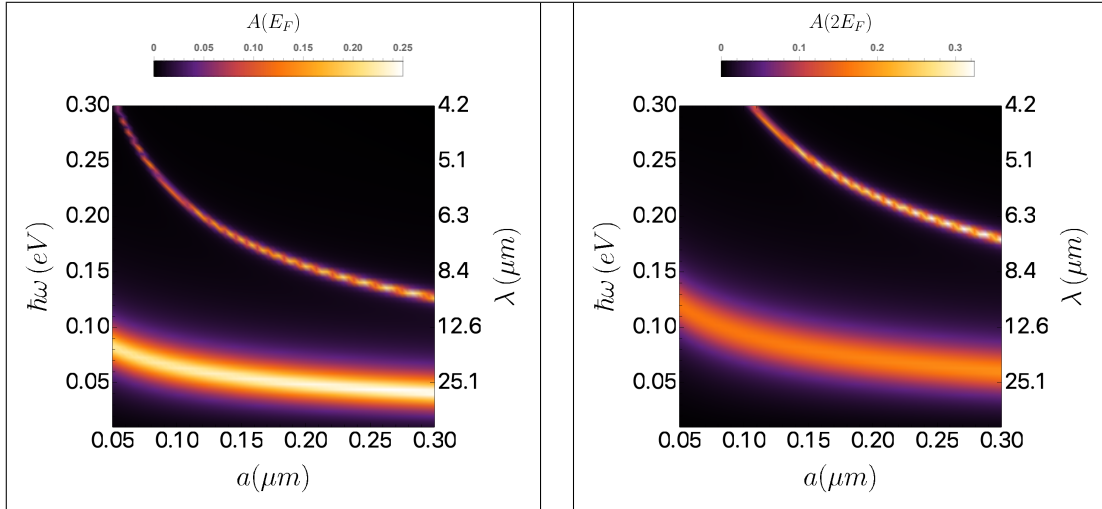


Figura 4.14: Absorvância do sistema em função de metade da largura, a , e da energia dos fótons para $\epsilon_1 = \epsilon_2 = \epsilon_3 = 1$, $E_F = 0.5$ eV, $\hbar\gamma = 0.004$ eV e $d = 0.1$ μm . No eixo do lado direito dos gráficos podemos ver o comprimento de onda correspondente a cada energia apresentada no eixo do lado esquerdo.

Seguindo para a figura 4.15 podemos observar uma representação gráfica de T , R e A em função do comprimento da abertura. Nesta caso, vemos mais uma vez que o comportamento da refletância e transmitância é muito semelhante ao caso em que não existe grafeno. O período das oscilações continua a ser $\lambda/2$ e vemos que as linhas para energias de Fermi diferentes estão quase sobrepostas. Quanto ao gráfico da absorvância, temos valores muito baixos, o que mostra que o grafeno não afeta muito o sistema, embora para E_F 's maiores tenhamos valores de A maiores, como seria de esperar em função da discussão da condutividade do grafeno elaborada no capítulo 2.

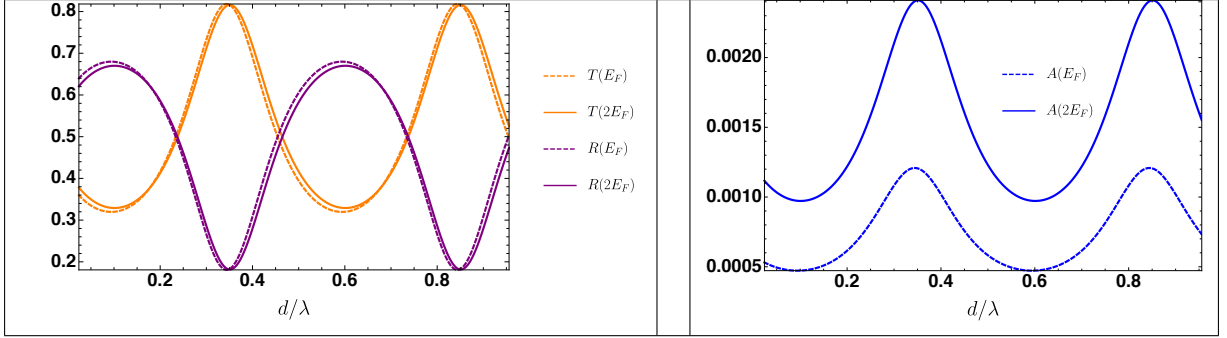


Figura 4.15: Transmitância e refletância (esquerda) e absorvância (direita) do sistema em função de d para $\hbar\omega = 0.29$ eV, $E_F = 0.5$ eV, $\hbar\gamma = 0.004$ eV, $a = 0.3$ μm e $\epsilon_1 = \epsilon_2 = \epsilon_3 = 1$.

Finalmente temos as figuras 4.16, onde são feitos os gráficos densidade da absorvância em função de $\hbar\omega$ e d , para duas energias de Fermi distintas. A zona brilhante indica-nos a melhor conjugação entre frequência e comprimento de abertura que maximiza a absorvância do sistema.

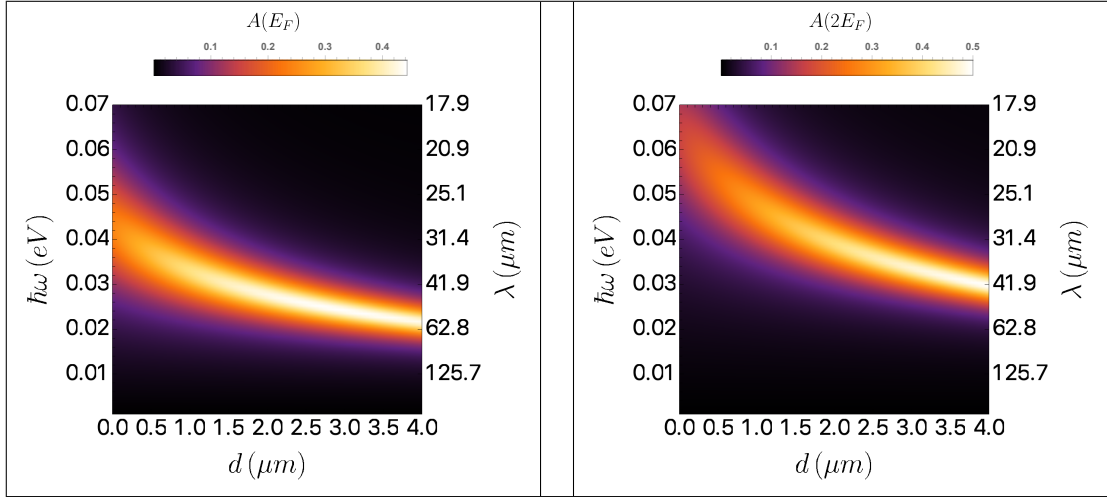


Figura 4.16: Absorvância do sistema em função do comprimento d e da energia dos fótons para $\epsilon_1 = \epsilon_2 = \epsilon_3 = 1$, $E_F = 0.5$ eV, $\hbar\gamma = 0.004$ eV e $a = 0.3$ μm . No eixo do lado direito dos gráficos podemos ver o comprimento de onda correspondente a cada energia apresentada no eixo do lado esquerdo.

4.3 Abertura Metálica Coberta com duas Folhas de Grafeno

Nesta secção vamos resolver o problema anterior, mas com mais uma folha de grafeno colocada no topo da abertura, como está ilustrado na figura 4.17.

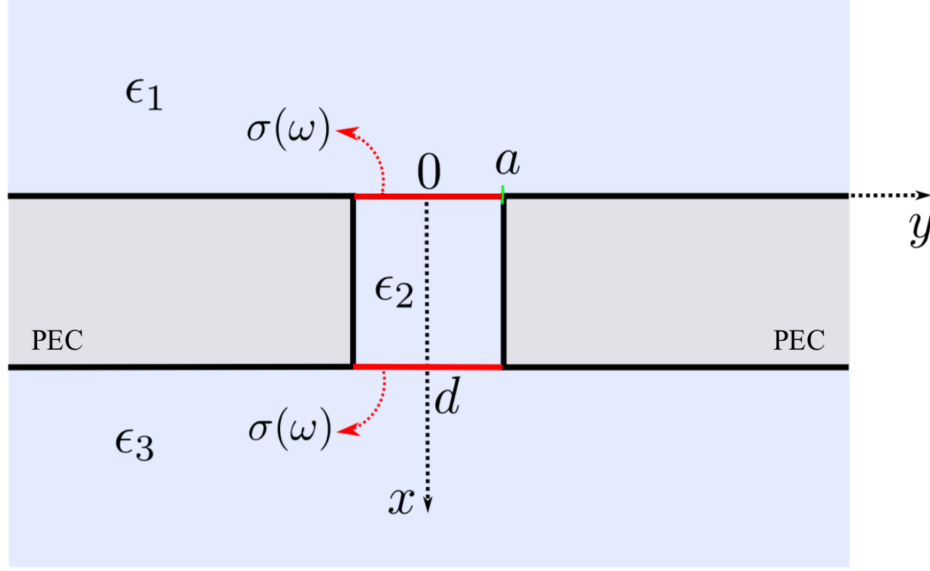


Figura 4.17: Abertura retangular perfurada num metal perfeito (PEC), coberta com duas folhas de grafeno de condutividade $\sigma(\omega)$. O eixo z aponta para fora da folha. ϵ_1 , ϵ_2 e ϵ_3 são as funções dielétricas dos três meios considerados. $2a$ é a largura e d o comprimento da abertura.

Assim sendo, necessitamos apenas de alterar a condição fronteira do campo magnético tangencial na interface $x = 0$, para levar em conta a condutividade da nova folha de grafeno, que será representada por σ' , de forma a podermos considerar folhas de grafeno com energias de Fermi distintas. A referida condição fronteira toma então a forma $H_1(0, y) - H_2(0, y) = \sigma'(\omega)E_{2y}(0, y)$. Mais uma vez, fazemos

$$\int_{-a}^a [H_1(0, y) - H_2(0, y) = \sigma'(\omega)E_{2y}(0, y)] dy, \quad (4.58)$$

o que permite obter

$$A_0 - i\gamma_2 k_2 \sigma'(\omega) B_0 = I_1 + \int_{-\infty}^{+\infty} r_p \text{sinc}(pa) dp. \quad (4.59)$$

Por outro lado, fazendo

$$\int_{-a}^a [H_1(0, y) - H_2(0, y) = \sigma'(\omega)E_{2y}(0, y)] \cos(\beta_2(y + a)) dy \quad (4.60)$$

chegamos a

$$A_2 - i\gamma_2 \alpha_2 \sigma'(\omega) B_2 = 2aI_2 + 2a \int_{-\infty}^{+\infty} r_p \frac{p \sin(pa)}{a^2 p^2 - \pi^2} dp. \quad (4.61)$$

Substituindo agora a equação (4.42) que define o coeficiente r_p nas duas equações anteriores obtemos:

$$\begin{cases} A_0 - i\gamma_2 k_2 \sigma'(\omega) B_0 = 2I_1 + i\Delta_1 k_2 B_0 I_3 + i\Delta_1 \alpha_2 B_2 I_4 \\ A_2 - i\gamma_2 \alpha_2 \sigma'(\omega) B_2 = 4aI_2 + 2i\Delta_1 k_2 B_0 I_4 + 2i\Delta_1 a^2 \alpha_2 B_2 I_5, \end{cases} \quad (4.62)$$

estando os integrais I_i (com $i = 1, 2, 3, 4, 5$) já definidos na secção anterior.

Juntando este último sistema de duas equações ao sistema (4.53), ficamos com um sistema de quatro equações que permite determinar completamente os coeficientes A_0 , B_0 , A_2 e B_2 . Tal como o sistema da secção anterior, este também é resolvido por meio de ferramentas computacionais e as expressões que definem os coeficientes não são aqui expostas devido à sua elevada extensão.

Desta forma, passamos ao cálculo da transmitância, refletância e absorvância do sistema, que é efetuado pelos métodos já apresentados nas duas secções anteriores. Nas figuras 4.18 e 4.19, podemos observar estas grandezas físicas representadas em função da energia do pacote de ondas incidente, para três situações distintas: um caso em que ambas as folhas de grafeno apresentam a mesma energia de Fermi e outros dois em que têm diferentes valores de E_F .

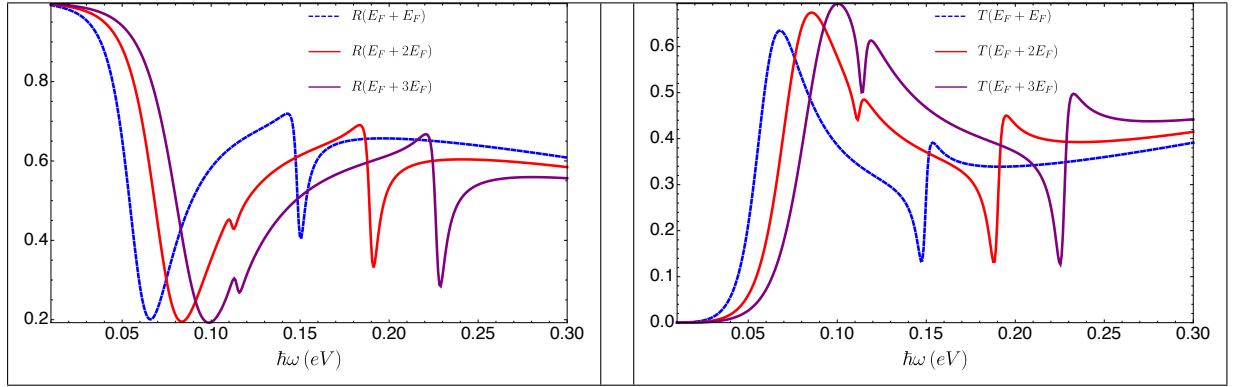


Figura 4.18: Refletância (esquerda) e transmitância (direita) do sistema em função da energia dos fótons para $E_F = 0.5$ eV, $\hbar\gamma = 0.004$ eV, $a = 0.3$ μm , $d = 0.1$ μm e $\epsilon_1 = \epsilon_2 = \epsilon_3 = 1$.

Da análise da figura 4.19, vemos imediatamente que no primeiro caso (linha azul) existe apenas um pico estreito, enquanto que nos outros (linhas vermelha e roxa) existem dois (além dos primeiros picos mais largos cuja origem já foi explicada na secção anterior). Para interpretar esta diferença é necessário relembrar a discussão da secção 3.4, onde apresentamos os modos óticos e acústicos da dupla camada de grafeno. Como vimos, para folhas de grafeno com a mesma energia de Fermi, os primeiros são simétricos relativamente ao plano $x = d/2$, ao passo que os segundos são antisimétricos relativamente ao mesmo plano. Assim, sendo a componente tangencial às folhas de grafeno do campo elétrico do presente sistema, simétrica em relação ao referido plano, isto é, tendo a igualdade $E_y(0, y) = E_y(d, y)$, percebemos que a existência de apenas um pico plasmónico no caso em que ambas as folhas apresentam a mesma condutividade se deve ao facto de o sistema ser capaz de excitar apenas modos óticos por serem os únicos simétricos. Para o caso em que cada folha de grafeno tem um valor de E_F diferente, nem a componente tangencial do campo elétrico neste sistema apresenta qualquer simetria, nem os modos óticos e acústicos da dupla camada têm simetria bem definida, sendo por isso possível, neste caso, excitar ambos os modos e por isso, aparecem dois máximos plasmónicos no espetro de absorção. É importante notar que para

ambos os casos, o momento destes plasmões é π/a , pois juntamente com o valor da energia dos picos de A a sua relação de dispersão é obedecida, o que seria de esperar, uma vez que tal como na secção anterior, as folhas de grafeno estão suspensas na estrutura metálica e consideramos nos cálculos o modo $n = 2$ além do modo fundamental.

Além disto, verificamos que aumentando a energia de Fermi de apenas uma das folhas de grafeno a posição do pico de A correspondente ao modo acústico não se altera significativamente, enquanto que a posição dos picos correspondentes aos modos óticos se desloca para valores de energia maiores. De forma a influenciar a posição dos picos acústicos é necessário aumentar o valor de E_F em ambas as camadas.

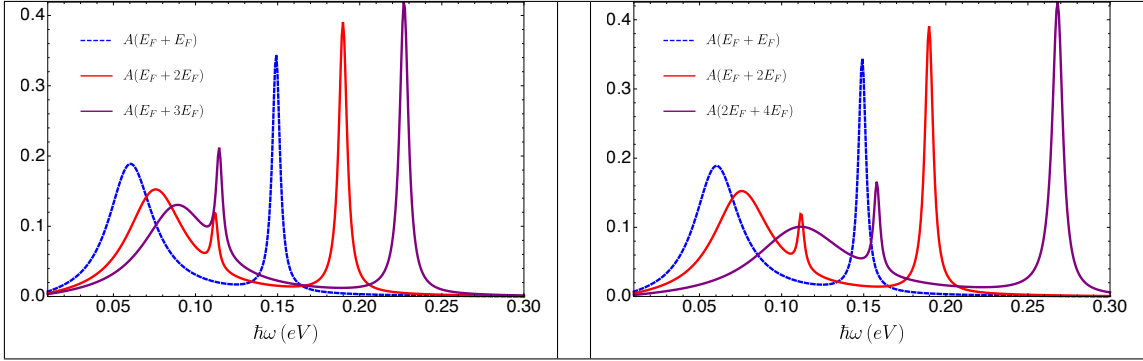


Figura 4.19: Absorvância do sistema em função da energia dos fotões para $E_F = 0.5$ eV, $\hbar\gamma = 0.004$ eV, $a = 0.3$ μm , $d = 0.1$ μm e $\epsilon_1 = \epsilon_2 = \epsilon_3 = 1$.

Relativamente ao caso em que consideramos apenas uma folha de grafeno a cobrir a abertura metálica, este problema resolvido com duas folhas que apresentam a mesma energia de Fermi mostra um aumento da intensidade dos picos plasmónicos da absorvância e, simultaneamente, um aumento da energia para a qual ocorrem esses picos (como podemos observar na figura 4.20), atuando portanto como uma única camada de grafeno, mas de maior energia de Fermi [58].

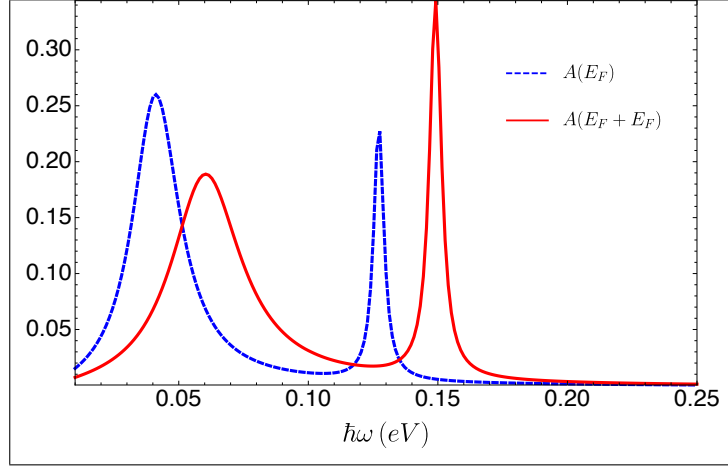


Figura 4.20: Absorvância do sistema com apenas uma folha de grafeno (linha azul) e com duas folhas de grafeno (linha vermelha) em função da energia dos fótons para $E_F = 0.5$ eV, $\hbar\gamma = 0.004$ eV, $a = 0.3$ μm , $d = 0.1$ μm e $\epsilon_1 = \epsilon_2 = \epsilon_3 = 1$.

Na figura 4.21, podemos observar o perfil espacial do campo elétrico nas várias regiões do espaço para o caso em que as folhas de grafeno têm a mesma condutividade (esquerda) e para o caso em que têm condutividades diferentes (direita). É visível que no primeiro caso o campo apresenta uma simetria em relação ao centro da abertura nas proximidades das camadas de grafeno, no entanto, no segundo caso esta simetria é quebrada pelo facto das folhas apresentarem diferentes valores de E_F .

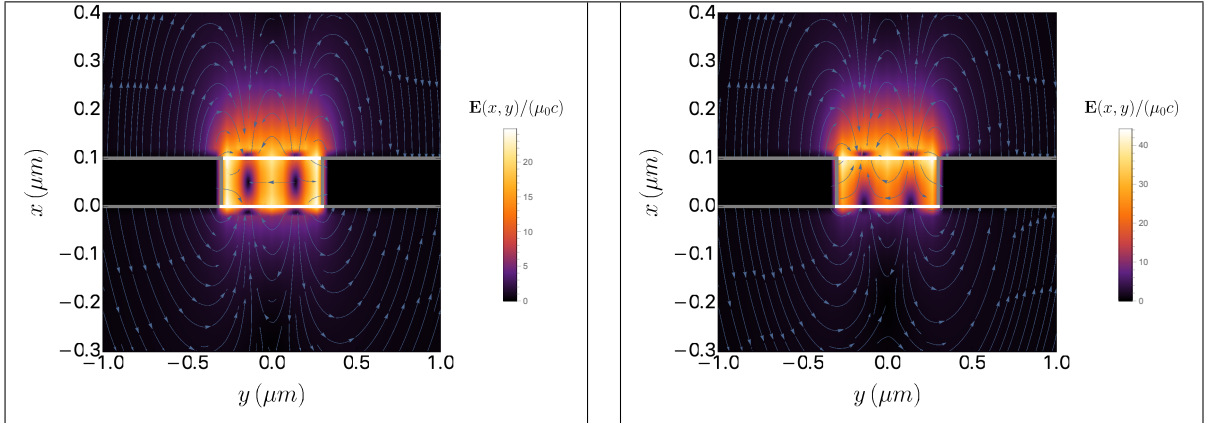


Figura 4.21: Perfil dos campos elétricos nas três regiões do espaço para o caso em que as folhas de grafeno têm a mesma condutividade (esquerda) e para o caso em que têm diferentes energias de Fermi (direita). Para o primeiro caso temos $E_F = 0.5$ eV para ambas as folhas de grafeno e para o segundo temos $E_F = 0.5$ eV para a camada que se encontra em $x = 0$ e $E_F = 1$ eV para a camada em $x = d$. Os restantes parâmetros são $\hbar\gamma = 0.004$ eV, $a = 0.3$ μm , $\hbar\omega = 0.1492$ eV (esquerda), $\hbar\omega = 0.1898$ eV (direita), $d = 0.1$ μm e $\epsilon_1 = \epsilon_2 = \epsilon_3 = 1$. As folhas de grafeno são representadas pelas linha brancas e a superfície do metal pelas linhas cinzentas. A região a preto é o interior do metal que, sendo perfeito, não tem campos no seu interior.

4.4 Abertura Metálica seguida de uma Folha de Grafeno

Neste problema vamos considerar que a folha de grafeno é infinita em y e está em $x = b$, com $b > d$ e portanto, está abaixo do orifício metálico, como se encontra ilustrado na figura 4.22.

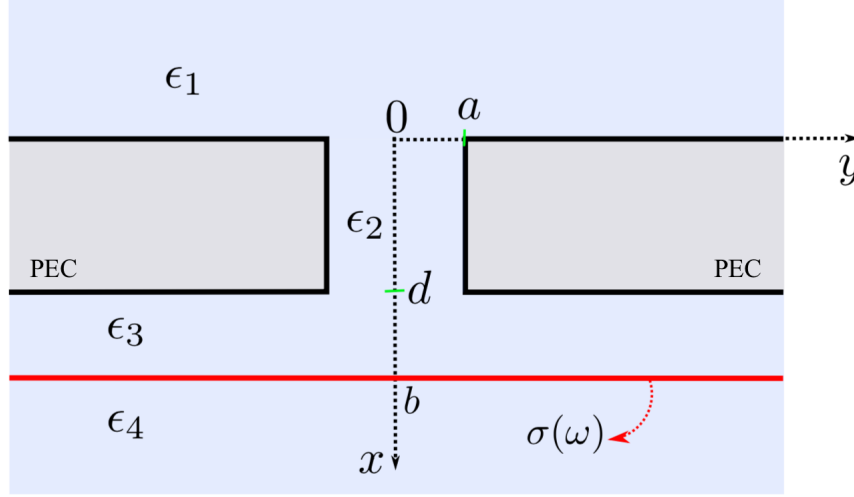


Figura 4.22: Abertura retangular perfurada num metal perfeito (PEC) seguida uma folha de grafeno de condutividade $\sigma(\omega)$ em $x = b$. O eixo z aponta para fora da folha. ϵ_1 , ϵ_2 , ϵ_3 e ϵ_4 são as funções dielétricas dos quatro meios considerados. $2a$ é a largura e d o comprimento da abertura e $(b - d)$ a distância do grafeno ao metal.

Temos em conta mais uma vez, apenas o modo $n = 0$ da cavidade.

Assim sendo, os campos elétricos e magnéticos no meio 1 e 2 são os já definidos anteriormente, e temos apenas de alterar os campos no meio 3, que agora contam com uma componente difratada, além de escrever o campo no meio 4, situado após a folha de grafeno. Temos então no meio 3

$$\begin{cases} H_3(x, y) = \int_{-\infty}^{+\infty} H_i(p) e^{i(q_3(x-d)+py)} dp + \int_{-\infty}^{+\infty} H_s(p) e^{i(-q_3(x-d)+py)} dp \\ E_{3x}(x, y) = -\frac{\mu_0 c^2}{\omega \epsilon_3} \left[\int_{-\infty}^{+\infty} H_i(p) p e^{i(q_3(x-d)+py)} dp + \int_{-\infty}^{+\infty} H_s(p) p e^{i(-q_3(x-d)+py)} dp \right] \\ E_{3y}(x, y) = \frac{\mu_0 c^2}{\omega \epsilon_3} \left[\int_{-\infty}^{+\infty} H_i(p) q_3 e^{i(q_3(x-d)+py)} dp - \int_{-\infty}^{+\infty} H_s(p) q_3 e^{i(-q_3(x-d)+py)} dp \right] \end{cases} \quad (4.63)$$

sendo $q_3 = \sqrt{k_3^2 - p^2}$ e $k_3 = \sqrt{\epsilon_3} \omega / c$. É importante referir que na ausência do grafeno $H_s = 0$ e ficamos reduzidos ao caso estudado em 4.1, pois só existem três meios distintos.

Por fim, no meio 4, o campo transmitido (t) é

$$\begin{cases} H_t(x, y) = \int_{-\infty}^{+\infty} t_p e^{i(q_4(x-b)+py)} dp \\ E_x^t(x, y) = -\frac{\mu_0 c^2}{\omega \epsilon_4} \int_{-\infty}^{+\infty} t_p p e^{i(q_4(x-b)+py)} dp \\ E_y^t(x, y) = \frac{\mu_0 c^2}{\omega \epsilon_4} \int_{-\infty}^{+\infty} t_p q_4 e^{i(q_4(x-b)+py)} dp \end{cases} \quad (4.64)$$

com $q_4 = \sqrt{k_4^2 - p^2}$ e $k_4 = \sqrt{\epsilon_4} \omega / c$. Resta-nos aplicar as condições fronteira do problema utilizando as mesmas manipulações a nível de cálculos que nas secções anteriores. Em $x = 0$ mantêm-se e com estas o coeficiente do campo magnético refletido no meio 1, no entanto, para $x = d$ temos uma alteração devido à introdução de uma nova componente nos campos. Para o campo magnético

$$H_2(d, y) = H_3(d, y) \quad (4.65)$$

$$\Rightarrow A_0 \cos(k_2 d) + B_0 \sin(k_2 d) = \int_{-\infty}^{+\infty} [H_i(p) + H_s(p)] \text{sinc}(pa) dp \quad (4.66)$$

onde foi mais uma vez feito $\int_{-a}^a (4.65) dy$. Para o campo elétrico

$$E_{2y}(d, y) = E_{3y}(d, y) \quad (4.67)$$

$$\Rightarrow -\frac{i\epsilon_3 k_2 a}{\epsilon_2 \pi} [B_0 \cos(k_2 d) - A_0 \sin(k_2 d)] \frac{\text{sinc}(pa)}{q_3} = H_i(p) - H_s(p). \quad (4.68)$$

tendo sido feito o integral $\int_{-\infty}^{+\infty} (4.67) e^{-ipy} dy$. Em $x = b$ temos duas novas condições fronteira, que permitem obter mais duas equações para os coeficientes dos campos, seguindo os mesmos procedimentos de cálculo:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} [H_3(b, y) - H_t(b, y) = \sigma(\omega) E_y(b, y)] e^{-ipy} dy \quad (4.69)$$

$$\Rightarrow t_p = \frac{H_s(p) e^{-iq_3(b-d)} + H_i(p) e^{iq_3(b-d)}}{1 + \sigma(\omega) \gamma_4 q_4} \quad (4.70)$$

e

$$\int_{-\infty}^{+\infty} E_{3y}(b, y) = E_y^t(b, y) e^{-ipy} dy \quad (4.71)$$

$$\Rightarrow t_p = [-H_s(p) e^{-iq_3(b-d)} + H_i(p) e^{iq_3(b-d)}] \frac{\epsilon_4 q_3}{q_4 \epsilon_3}. \quad (4.72)$$

Igualando (4.70) e (4.72) obtemos

$$\Rightarrow H_s(p) = L e^{2iq_3(b-d)} H_i(p) \quad (4.73)$$

sendo L definido por

$$L \equiv \frac{\epsilon_4 / \epsilon_3 q_3 / q_4 - (1 + \sigma(\omega) \gamma_4 q_4)^{-1}}{\epsilon_4 / \epsilon_3 q_3 / q_4 + (1 + \sigma(\omega) \gamma_4 q_4)^{-1}}. \quad (4.74)$$

Podemos então substituir (4.73) em (4.68) para obter

$$\Rightarrow H_i(p) = \frac{ia\epsilon_3 k_2}{\epsilon_2 \pi} \frac{A_0 \sin(k_2 d) - B_0 \cos(k_2 d)}{1 - L e^{2iq_3(b-d)}} \frac{\text{sinc}(pa)}{q_3}. \quad (4.75)$$

Combinando agora (4.66), (4.73) e (4.75) conseguimos ter uma relação entre B_0 e A_0

$$B_0 = -GA_0 \quad (4.76)$$

com

$$G = \frac{\cos(k_2 d) - i\epsilon_3/\epsilon_2 k_2 a/\pi \sin(k_2 d) I_L}{\sin(k_2 d) + i\epsilon_3/\epsilon_2 k_2 a/\pi \cos(k_2 d) I_L} \quad (4.77)$$

e

$$I_L = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1 + L e^{2iq_3(b-d)}}{1 - L e^{2iq_3(b-d)}} \frac{\text{sinc}^2(pa)}{q_3} dp. \quad (4.78)$$

Com tudo isto, podemos por fim escrever o coeficiente do campo magnético transmitido

$$t_p = H_i(p)(1 - L) e^{iq_3(b-d)} \frac{\epsilon_4 q_3}{\epsilon_3 q_4}. \quad (4.79)$$

Resta-nos agora substituir (4.76) em (4.14) para obter o coeficiente A_0 :

$$A_0 = \frac{2h_0 I_1}{1 + ik_2 \epsilon_1/\epsilon_2 a/\pi I_2 G}. \quad (4.80)$$

Foi possível utilizar a equação (4.14) uma vez que, como referido no início da presente secção, as condições fronteira em $x = 0$ para os campos elétrico e magnético são as mesmas da secção 4.1. Pela mesma razão, o coeficiente r_p continua a ser dado pela equação (4.13). Temos assim determinados todos os coeficientes dos campos apresentados. Finalmente, o procedimento para obter os vetores de Poynting, a transmitância, refletância e absorvância é o utilizado nas secções anteriores.

Passamos agora para a representação gráfica destas quantidades físicas. Nas figuras que se seguem, é efetuado um estudo da variação das mesmas com a energia dos fotões, com a distância da folha de grafeno à abertura e com o comprimento e largura da abertura. Para cada gráfico são desenhadas duas linhas para duas energias de Fermi (E_F) do grafeno.

Na figura 4.23, podemos observar que para valores de $\hbar\omega$ próximos de 0.05 eV voltamos a ter máximos da absorvância e mínimos da refletância, cuja origem foi explicada na secção anterior. Passando para os picos da absorvância que se seguem para energias superiores, podemos identificá-los como plasmões que se formam no grafeno, uma vez que fazendo a razão entre as energias das primeiras ressonâncias (e para as restantes) para valores de E_F diferentes, obtemos aproximadamente $\sqrt{2}$, o que faz sentido pois sabemos que no grafeno $\omega_{SPP} \propto \sqrt{E_F}$, de acordo com a discussão introduzida no capítulo 3 para a relação de dispersão dos plasmões no grafeno. Confirmamos este facto na figura 4.24, pois podemos observar que a frequência para a qual ocorrem as primeiras ressonâncias da absorvância variam com $\sqrt{E_F}$. O mesmo acontece para os picos de ordem superior, o que varia para esses casos é a constante de proporcionalidade.

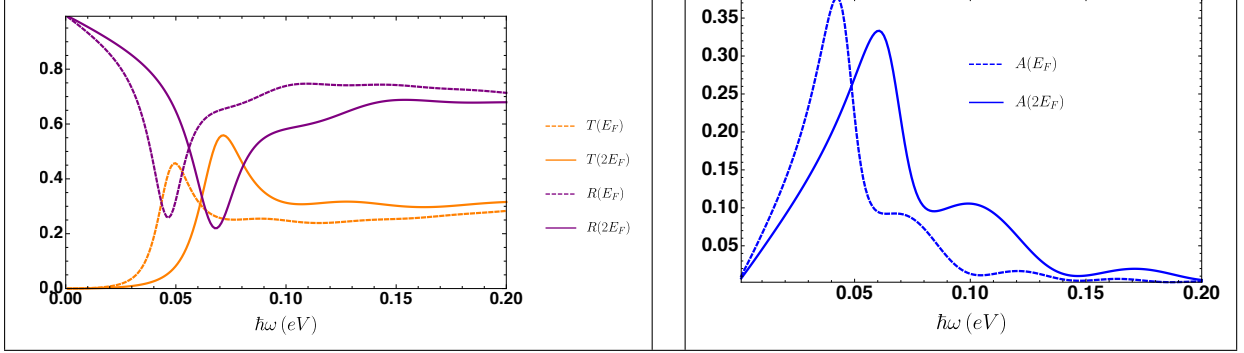


Figura 4.23: Transmitância e refletância (esquerda) e absorvância (direita) do sistema em função da energia dos fótons para $E_F = 0.5$ eV, $\hbar\gamma = 0.004$ eV, $a = 0.3$ μm , $d = 0.1$ μm , $b = 0.11$ μm e $\epsilon_1 = \epsilon_2 = \epsilon_3 = \epsilon_4 = 1$.

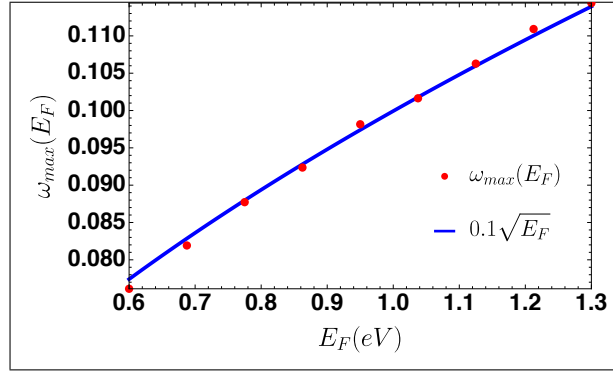


Figura 4.24: Valores de $\hbar\omega$ para os quais ocorrem os picos na absorvância do sistema para diversas energias de Fermi do grafeno. Os pontos a vermelho são determinados numericamente a partir do gráfico de A e a linha azul resulta de um ajuste aos pontos. Os parâmetros considerados são $\epsilon_1 = \epsilon_2 = \epsilon_3 = \epsilon_4 = 1$, $a = 0.3$ μm , $d = 0.1$ μm , $b = 0.11$ μm e $\hbar\gamma = 0.004$ eV.

Aumentando o comprimento da abertura começamos a observar efeitos de cavidade, em que a refletância e transmitância sofrem oscilações com a frequência da luz incidente e a absorvância apenas apresenta picos a baixa frequência, sendo depois nula, como é visível na figura 4.25. Isto mostra novamente que para aberturas compridas o grafeno não tem influência no sistema, até porque as curvas para energias de Fermi distintas se encontram sobrepostas para grande parte dos valores de energia.

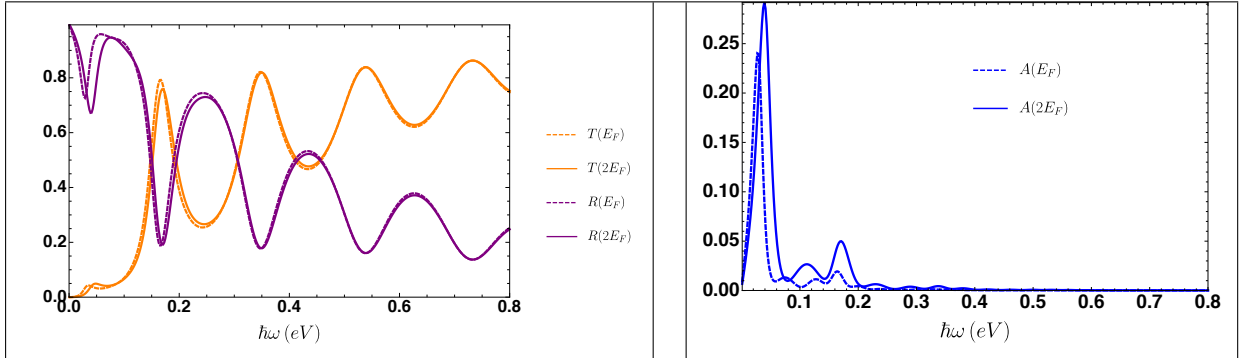


Figura 4.25: Transmitância e refletância (esquerda) e absorvância (direita) do sistema em função da energia dos fótons para $E_F = 0.5$ eV, $\hbar\gamma = 0.004$ eV, $a = 0.3$ μm , $d = 3$ μm , $b = 3.01$ μm e $\epsilon_1 = \epsilon_2 = \epsilon_3 = \epsilon_4 = 1$.

Olhando agora para a figura 4.26, podemos observar as oscilações de R , T e A com a variação do comprimento da abertura, tal como acontece no problema em que a folha de grafeno se encontra na base da abertura e no problema da abertura sem grafeno. O período destas oscilações é o mesmo que nos referidos sistemas e mais uma vez as curvas para E_F 's diferentes coincidem, o que mostra que este fenómeno é exclusivamente determinado pelo efeito da cavidade e não pelo grafeno. Além disto, os valores da absorvância são também muito pouco significativos.

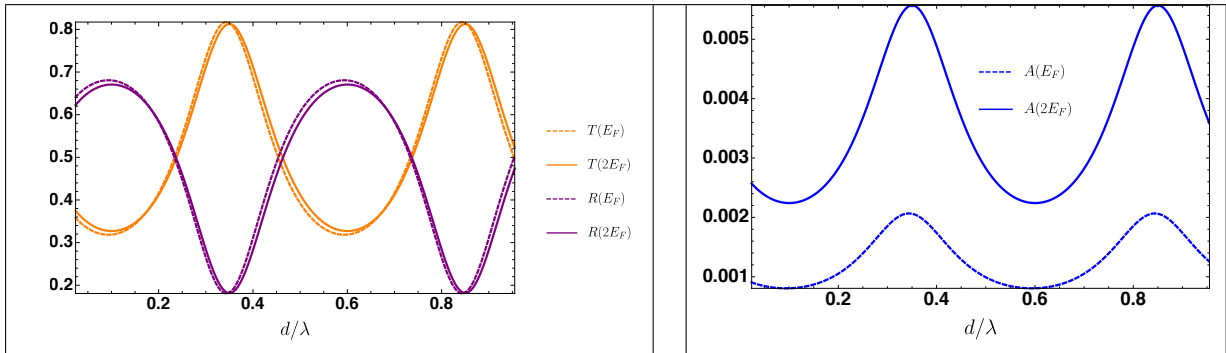


Figura 4.26: Transmitância e refletância (esquerda) e absorvância (direita) do sistema em função de d para $\hbar\omega = 0.29$ eV, $E_F = 0.5$ eV, $\hbar\gamma = 0.004$ eV, $a = 0.3$ μm , $b = d + 0.01$ μm e $\epsilon_1 = \epsilon_2 = \epsilon_3 = \epsilon_4 = 1$.

Na figura 4.27, efetuamos um estudo destas três grandezas com a variação da distância da folha de grafeno ao metal. Podemos ver que quanto mais longe esta estiver, menor será a absorção de energia e uma maior quantidade desta será refletida.

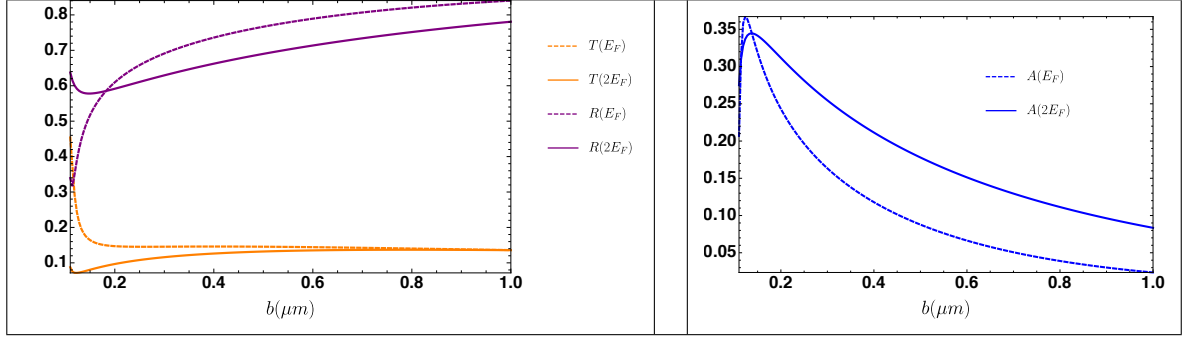


Figura 4.27: Transmitância e refletância (esquerda) e absorvância (direita) do sistema em função de b para $\hbar\omega = 0.05$ eV, $E_F = 0.5$ eV, $\hbar\gamma = 0.004$ eV, $a = 0.3$ μm , $d = 0.1$ μm e $\epsilon_1 = \epsilon_2 = \epsilon_3 = \epsilon_4 = 1$.

Efetuosamos também um estudo em função da largura da cavidade, visível na figura 4.28. Vemos que para aberturas mais largas existe uma maior transferência de energia através da mesma. Este aumento da transmitância e a diminuição da refletância fazem sentido na medida em que estamos a considerar radiação com o mesmo comprimento de onda, mas consideramos orifícios cada vez maiores, o que facilita a passagem da luz. Os máximos da absorvância visíveis no painel direito da referida figura estão relacionados com a excitação de SPP's no grafeno com momento inversamente proporcional ao valor de a dos picos desta grandeza física.

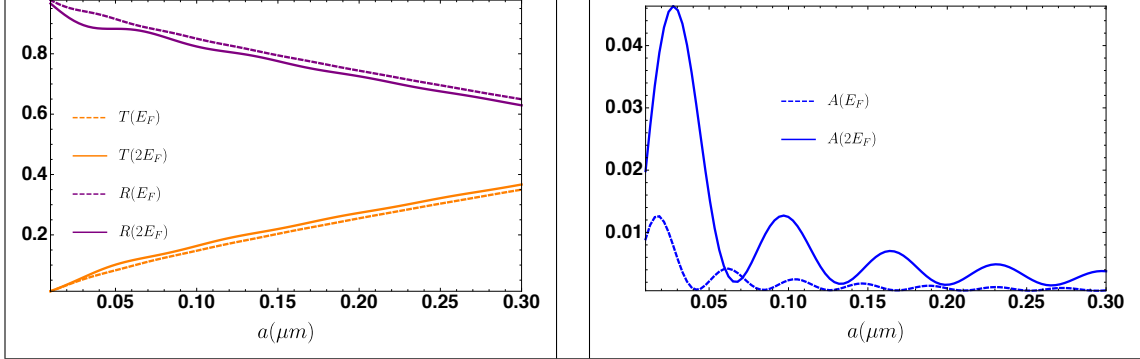


Figura 4.28: Transmitância e refletância (esquerda) e absorvância (direita) do sistema em função de a para $\hbar\omega = 0.29$ eV, $E_F = 0.5$ eV, $\hbar\gamma = 0.004$ eV, $d = 0.1$ μm , $b = 0.11$ μm e $\epsilon_1 = \epsilon_2 = \epsilon_3 = \epsilon_4 = 1$.

Nas figuras que se seguem podemos ver uma representação gráfica da absorvância para duas energias de Fermi distintas, em função de $\hbar\omega$ e de cada um dos outros parâmetros geométricos que caracterizam o sistema, em simultâneo. Estas servem para ter uma visão mais geral das representações gráficas anteriores e as zonas mais brilhantes indicam-nos a conjugação de valores ideal para a maximização da absorção de energia.

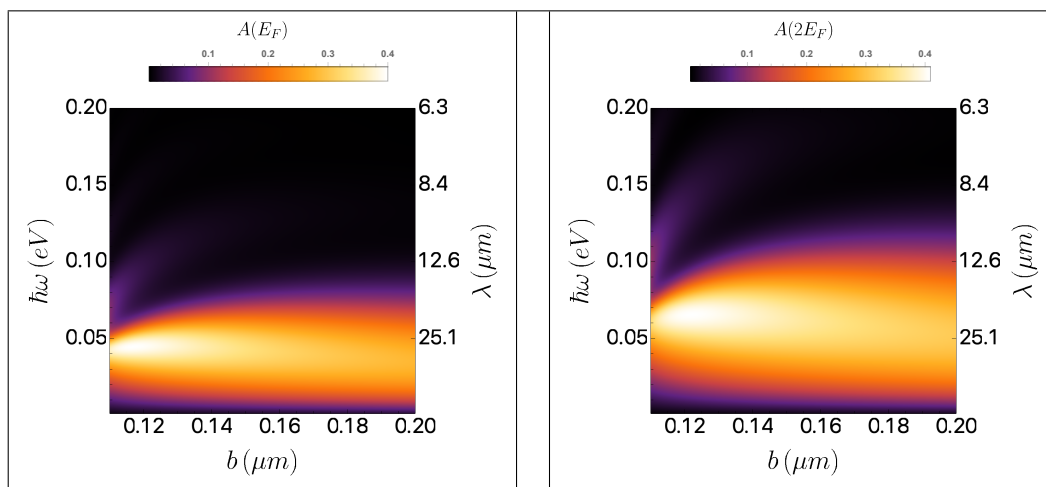


Figura 4.29: Absorvância do sistema em função do parâmetro b e da energia dos fótons para $\epsilon_1 = \epsilon_2 = \epsilon_3 = \epsilon_4 = 1$, $E_F = 0.5$ eV, $\hbar\gamma = 0.004$ eV, $a = 0.3$ μm e $d = 0.1$ μm . No eixo do lado direito dos gráficos podemos ver o comprimento de onda correspondente a cada energia apresentada no eixo do lado esquerdo.

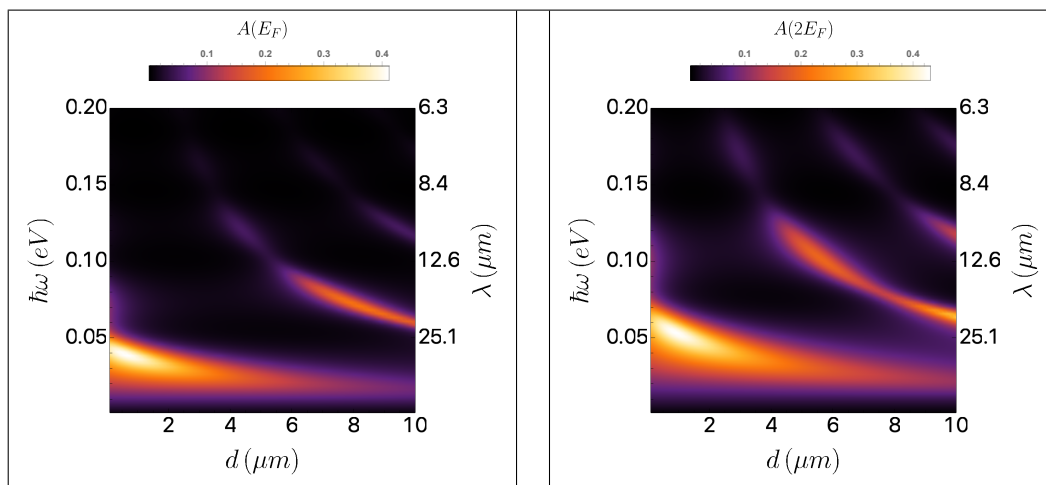


Figura 4.30: Absorvância do sistema em função do comprimento d e da energia dos fótons para $\epsilon_1 = \epsilon_2 = \epsilon_3 = \epsilon_4 = 1$, $E_F = 0.5$ eV, $\hbar\gamma = 0.004$ eV, $b = d + 0.01$ μm e $a = 0.3$ μm . No eixo do lado direito dos gráficos podemos ver o comprimento de onda correspondente a cada energia apresentada no eixo do lado esquerdo.

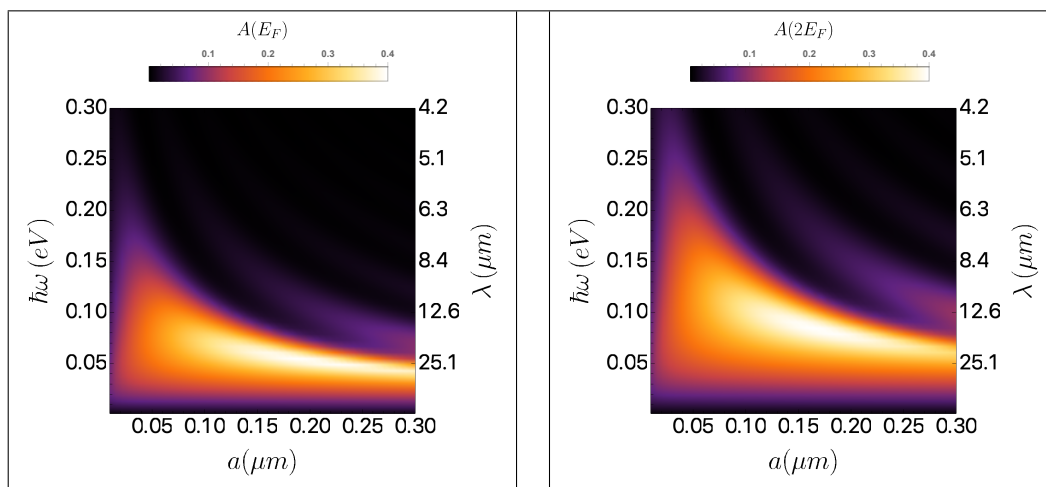


Figura 4.31: Absorvância do sistema em função do parâmetro a e da energia dos fótons para $\epsilon_1 = \epsilon_2 = \epsilon_3 = \epsilon_4 = 1$, $E_F = 0.5$ eV, $\hbar\gamma = 0.004$ eV, $b = 0.11$ μm e $d = 0.1$ μm . No eixo do lado direito dos gráficos podemos ver o comprimento de onda correspondente a cada energia apresentada no eixo do lado esquerdo.

5

Problema de Espalhamento de um Modo de um Guia de Ondas Semi-Infinito

Neste capítulo estudamos a difração do modo fundamental de um guia de ondas semi-infinito, com polarização TM, em diversos contextos.

Começamos por considerar o problema mais simples, em que apenas existe um meio dielétrico no interior do guia de ondas e um dielétrico exterior a este. Depois consideramos que o metal é real, ou seja, é caracterizado por uma função dielétrica dependente da frequência. Seguidamente resolvemos mais dois problemas, um com o metal perfeito e outro com o metal real, mas desta vez o sistema tem uma folha de grafeno bidimensional inserida a uma certa distância abaixo do guia de ondas. No primeiro, calculamos também a densidade de probabilidade espacial da excitação de plasmões no grafeno. Finalmente estudamos o caso em que temos um metal perfeito a envolver o guia de ondas e inserimos uma folha de grafeno à saída do mesmo. O objetivo é então estudar a eficiência de transmissão de energia por unidade de área através dos sistemas, calculando para tal a transmitância, refletância e absorvância. Nos problemas em que inserimos a folha de grafeno também pretendemos observar a excitação de plasmões de superfície no mesmo, que se manifestarão como uma ressonância nas representações gráficas das absorvâncias e refletâncias em função da frequência da luz.

Os métodos de cálculo para a resolução dos problemas são os mesmos do capítulo anterior, isto é, escrevemos os campos eletromagnéticos nas diferentes regiões, aplicamos as condições fronteira para obtermos os coeficientes dos campos e por fim, calculamos os vetores de Poynting que entram nas fórmulas da refletância, transmitância e absorvância.

5.1 Guia de Ondas Semi-Infinito num Metal Perfeito

Nesta secção vamos resolver o problema de espalhamento para o caso mais simples, em que existe apenas um guia de ondas semi-infinito feito num metal perfeito e um meio dielétrico exterior. O guia de ondas é o meio 1 e encontra-se em $x < 0$, no plano $z = 0$ e em $-a \leq y \leq a$, como ilustrado na figura 5.1.

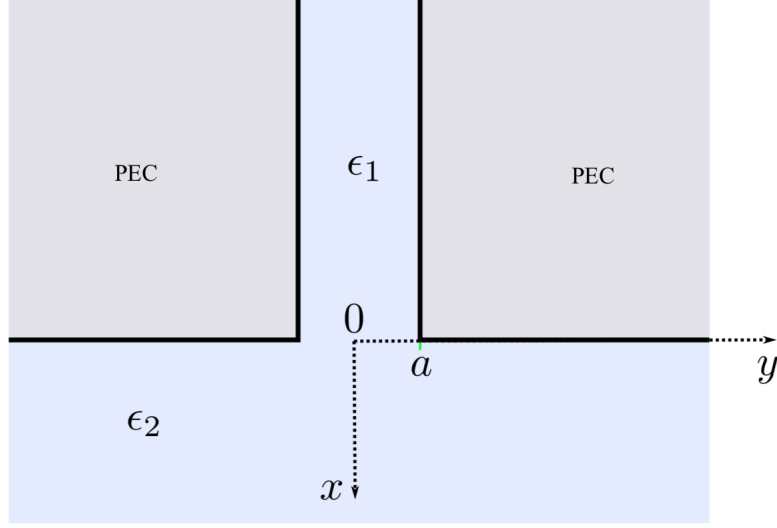


Figura 5.1: Guia de ondas semi-infinito perfurado num metal perfeito (PEC). O eixo z aponta para fora da folha. ϵ_1 e ϵ_2 são as funções dielétricas dos dois meios considerados. $2a$ é a largura do guia de ondas.

As ondas eletromagnéticas propagam-se então no plano $z = 0$ e na direção x com polarização TM e portanto, temos mais uma vez a forma geral dos campos:

$$\mathbf{H} = H_z(x, y)\mathbf{e}_z \quad (5.1)$$

$$\mathbf{E} = E_x(x, y)\mathbf{e}_x + E_y(x, y)\mathbf{e}_y. \quad (5.2)$$

Resolvendo a equação de Helmholtz para o campo magnético em cada um dos meios e utilizando de seguida a equação (4.3) obtemos ambos os campos magnético e elétrico.

Começando pelo meio 1 temos

$$\left\{ \begin{array}{l} H_1(x, y) = e^{i\alpha_m x} \cos(\beta_m(y+a)) + \sum_{n=0}^{\infty} r_n e^{-i\alpha_n x} \cos(\beta_n(y+a)) \\ E_{1x}(x, y) = -\frac{i\mu_0 c^2}{\omega \epsilon_1} [e^{i\alpha_m x} \beta_m \sin(\beta_m(y+a)) + \sum_{n=0}^{\infty} r_n e^{-i\alpha_n x} \beta_n \sin(\beta_n(y+a))] \\ E_{1y}(x, y) = \frac{\mu_0 c^2}{\omega \epsilon_1} [\alpha_m e^{i\alpha_m x} \cos(\beta_m(y+a)) - \sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n r_n e^{-i\alpha_n x} \cos(\beta_n(y+a))] \end{array} \right. \quad (5.3)$$

sendo r_n a amplitude de reflexão associada ao modo n , $\beta_n = \frac{n\pi}{2a}$, $\alpha_n = \sqrt{k_1^2 - \beta_n^2}$, $k_1 = \sqrt{\epsilon_1} \omega/c$ e onde consideramos que temos apenas um modo incidente que se reflete à saída do guia de ondas, dando origem a uma combinação de todos os modos possíveis.

Tal como no capítulo anterior estamos interessados apenas no modo fundamental do guia de ondas, isto é, vamos considerar que o modo incidente e o refletido são o mesmo, o modo $n = 0$. Assim, as

equações anteriores ficam:

$$\begin{cases} H_1(x, y) = (e^{ik_1x} + re^{-ik_1x})\Theta(a - |y|) \\ E_{1x}(x, y) = 0 \\ E_{1y}(x, y) = \frac{\mu_0 c^2}{\omega \epsilon_1} k_1 (e^{ik_1x} - re^{-ik_1x})\Theta(a - |y|) \end{cases} \quad (5.4)$$

sendo $\Theta(a - |y|)$ a função de Heaviside.

Passando para o meio 2 temos os seguintes campos, escritos como uma transformada de Fourier

$$\begin{cases} H_2(x, y) = \int_{-\infty}^{\infty} t_p e^{i(qx+py)} dp \\ E_{2x}(x, y) = -\frac{\mu_0 c^2}{\omega \epsilon_2} \int_{-\infty}^{\infty} p t_p e^{i(qx+py)} dp \\ E_{2y}(x, y) = \frac{\mu_0 c^2}{\omega \epsilon_2} \int_{-\infty}^{\infty} q t_p e^{i(qx+py)} dp \end{cases} \quad (5.5)$$

onde t_p é a amplitude de transmissão, $q = \sqrt{k_2^2 - p^2}$, $k_2 = \sqrt{\epsilon_2} \omega / c$ e ϵ_2 é a função dielétrica do meio 2.

Com isto, podemos passar para a aplicação das condições fronteira de Maxwell na interface $x = 0$. As componentes tangenciais dos campos magnéticos devem obedecer a:

$$H_1(0, y) = H_2(0, y) \quad (5.6)$$

$$\Leftrightarrow (1 + r)\Theta(a - |y|) = \int_{-\infty}^{\infty} t_p e^{ipy} dp. \quad (5.7)$$

Fazendo agora a integração da equação anterior, $\int_{-a}^a (5.7) dy$, chegamos a

$$\Rightarrow 1 + r = \int_{-\infty}^{\infty} t_p \text{sinc}(pa) dp. \quad (5.8)$$

As componentes tangenciais do campo elétrico também devem ser contínuas e por isso temos a segunda condição fronteira:

$$E_{1y}(0, y) = E_{2y}(0, y) \quad (5.9)$$

$$\Leftrightarrow \frac{k_1}{\epsilon_1} (1 - r)\Theta(a - |y|) = \frac{1}{\epsilon_2} \int_{-\infty}^{\infty} q t_p e^{ipy} dp. \quad (5.10)$$

Integrando a equação anterior, $\int_{-\infty}^{\infty} (5.10) e^{-i\gamma y} dy$, obtemos a segunda equação que necessitamos para os coeficientes r e t_p :

$$\Rightarrow t_p = \frac{\epsilon_2 a k_1}{\epsilon_1 \pi q} \text{sinc}(pa) (1 - r). \quad (5.11)$$

Juntando agora as equações (5.8) e (5.11) e resolvendo o sistema temos finalmente

$$\begin{cases} r = \frac{\epsilon_2 / \epsilon_1 a / \pi k_1 I_p - 1}{\epsilon_2 / \epsilon_1 a / \pi k_1 I_p + 1} \\ t_p = \frac{\epsilon_2 a k_1}{\epsilon_1 \pi q} \frac{2 \text{sinc}(pa)}{1 + \epsilon_2 / \epsilon_1 a / \pi k_1 I_p} \end{cases} \quad (5.12)$$

sendo I_p o seguinte integral

$$I_p = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\text{sinc}^2(pa)}{q} dp. \quad (5.13)$$

Recorrendo à equação (4.28) podemos escrever as componentes dos vetores de Poynting incidente, refletido e transmitido, normais à interface, como

$$S_x^i = \frac{\mu_0 c^2 a}{\omega} \Re \left[\frac{k_1}{\epsilon_1} \right] \quad (5.14)$$

$$S_x^r = \frac{\mu_0 c^2 a}{\omega} \Re \left[\frac{k_1}{\epsilon_1} \right] |r|^2 \quad (5.15)$$

$$S_x^t = \frac{\mu_0 c^2 \pi}{\omega} \Re \left[\int_{-k_2}^{k_2} \frac{1}{\epsilon_2} |t_p|^2 q dp \right] \quad (5.16)$$

e por consequência temos a refletância e transmitância do sistema:

$$R = |r|^2 \quad (5.17)$$

$$T = \frac{c\pi}{a\omega} \Re \left[\frac{\sqrt{\epsilon_1}}{\epsilon_2} \int_{-k_2}^{k_2} |t_p|^2 q dp \right]. \quad (5.18)$$

É de notar que neste sistema não há perdas de energia e portanto não existe absorvância.

Na figura 5.2 estão representadas as grandezas R e T em função da energia da onda eletromagnética incidente. Como é possível observar, vemos que com o aumento da energia da onda incidente, há um aumento da transmitância e uma conseqüente diminuição da refletância do sistema, pois a frequências maiores correspondem comprimentos de onda menores, e portanto, para a mesma largura da abertura, as ondas sofrem um menor efeito de difração.

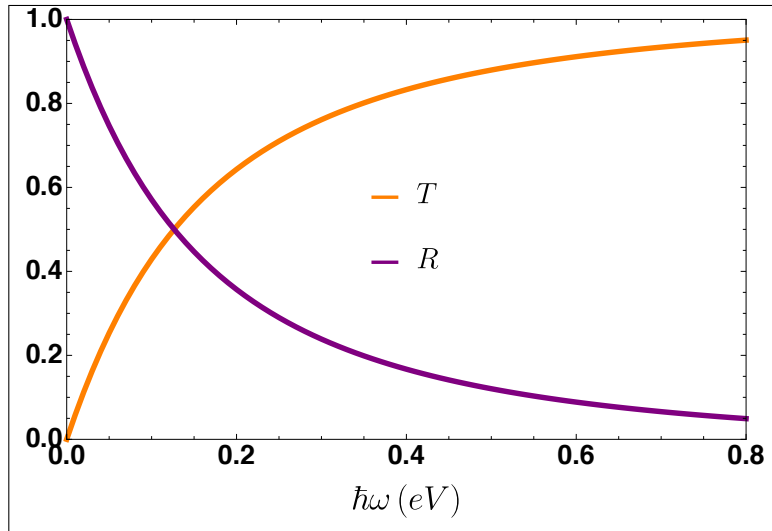


Figura 5.2: Refletância e transmitância do sistema em função da energia da onda eletromagnética incidente para $\epsilon_1 = \epsilon_2 = 1$ e $a = 0.3 \mu\text{m}$.

Na figura 5.3, podemos ver uma representação espacial dos campos elétricos nos dois meios, o interior do guia de ondas e o dielétrico que o segue, para duas energias diferentes: 0.8 eV que corresponde a um caso de alta transmitância e 0.06 eV que corresponde a alta refletância.

Sendo o metal perfeito, os campos no seu interior são nulos, tal como é visível na região escura da imagem.

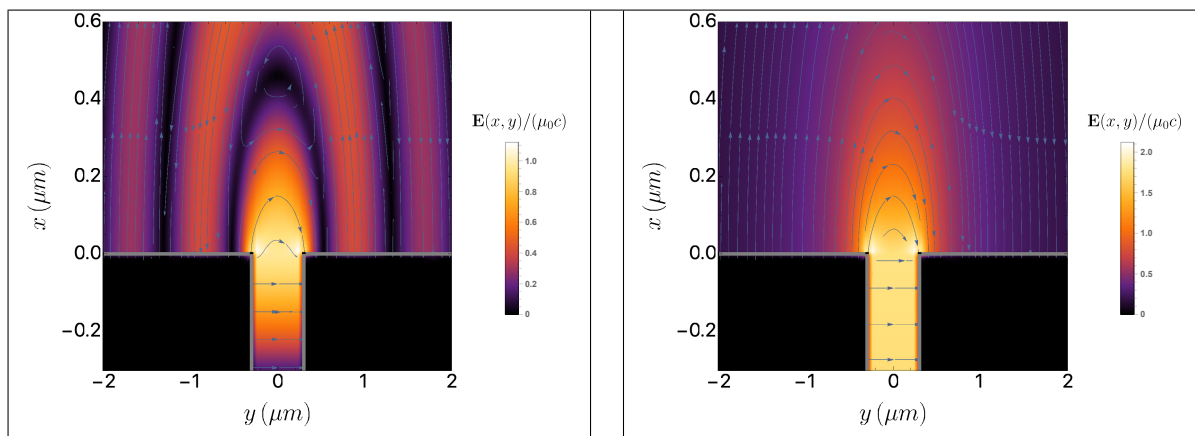


Figura 5.3: Perfil espacial dos campos elétricos nos dois meios considerados para $a = 0.3 \mu\text{m}$, $\epsilon_1 = \epsilon_2 = 1$, $\hbar\omega = 0.8 \text{ eV}$ (esquerda) e $\hbar\omega = 0.06 \text{ eV}$ (direita). A superfície do metal é denotada pelas linhas cinzentas.

5.2 Guia de Ondas Semi-Infinito num Metal Real

Nesta secção pretendemos resolver o mesmo problema da secção anterior, mas desta vez considerando que o metal no qual o guia de ondas está perfurado é real, apresentando assim uma função dielétrica ϵ_m . Temos então o meio 1, que se refere ao conjunto composto pelo interior do guia de ondas e pelo metal e o meio 2 que se refere ao meio posterior ao primeiro. O esquema do problema encontra-se na figura 5.4.

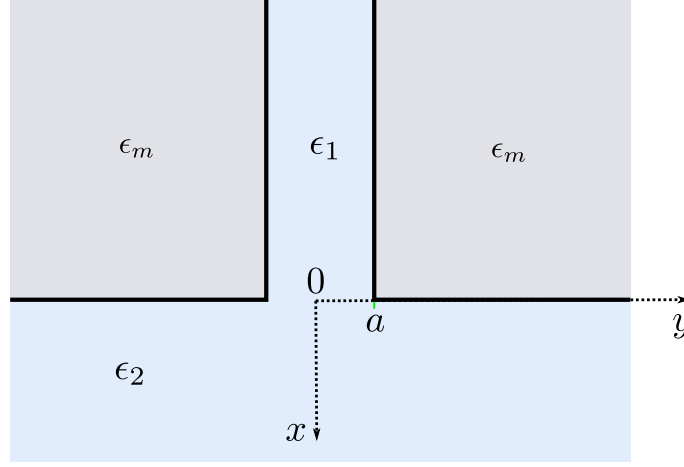


Figura 5.4: Guia de ondas semi-infinito perfurado num metal real. O eixo z aponta para fora da folha. ϵ_1 é a função dielétrica no interior do guia de ondas, ϵ_m a função dielétrica do metal e ϵ_2 a função dielétrica do meio abaixo do guia. $2a$ é a largura do guia de ondas.

A onda eletromagnética propaga-se assim no interior do guia e do metal na direção x e decai exponencialmente na direção y , apenas no interior do metal.

Desta forma, o campo magnético no meio 1 pode ser escrito como

$$H_1(x, y) = (e^{iq_1x} + re^{-iq_1x}) \cdot [H_g(y) + H_d(y) + H_e(y)] \quad (5.19)$$

onde temos

$$H_g(y) = \begin{cases} \cos(\beta y)\Theta(a - |y|), & \text{modos pares} \\ \sin(\beta y)\Theta(a - |y|), & \text{modos ímpares} \end{cases} \quad (5.20)$$

$$H_d(y) = h_d e^{-\kappa y} \Theta(y - a) \quad (5.21)$$

$$H_e(y) = h_e e^{\kappa y} \Theta(-y - a). \quad (5.22)$$

Aqui, os subscritos g , d e e denotam, respetivamente, os campos no guia de ondas e à direita e à esquerda do mesmo, no interior do metal. Além disto, Θ é a função de Heaviside e temos também $\beta = \sqrt{k_1^2 - q_1^2}$, $\kappa = \sqrt{q_1^2 - k_m^2}$ e $k_i = \frac{\omega}{c} \sqrt{\epsilon_i}$, com $i = 1, m$, ϵ_1 a função dielétrica no interior do guia de ondas e r o coeficiente de reflexão.

Podemos então, por via da equação (4.3) escrever o campo elétrico na direção x , no meio 1:

$$E_{1x}(x, y) = (e^{iq_1x} + re^{-iq_1x}) \cdot [E_{gx}(y) + E_{dx}(y) + E_{ex}(y)] \quad (5.23)$$

onde

$$E_{gx}(y) = \begin{cases} -i\beta\gamma_1 \sin(\beta y)\Theta(a - |y|), & \text{modos pares} \\ i\beta\gamma_1 \cos(\beta y)\Theta(a - |y|), & \text{modos ímpares} \end{cases} \quad (5.24)$$

$$E_{dx}(y) = -ih_d\kappa\gamma_m e^{-\kappa y} \Theta(y - a) \quad (5.25)$$

$$E_{ex}(y) = ih_e \kappa \gamma_m e^{\kappa y} \Theta(-y - a) \quad (5.26)$$

e $\gamma_i = \frac{\mu_0 c^2}{\omega \epsilon_i}$.

Neste ponto é agora necessário fazer um breve estudo dos modos pares e ímpares permitidos no interior do guia. Para tal, começamos por aplicar as condições fronteira de Maxwell aos campos, na fronteira entre o guia de ondas e o metal. Temos então em $y = a$, para o campo magnético tangencial

$$H_g(a) = H_d(a) \quad (5.27)$$

$$\Leftrightarrow \begin{cases} h_d = e^{\kappa a} \cos(\beta a), \text{modos pares} \\ h_d = e^{\kappa a} \sin(\beta a), \text{modos ímpares} \end{cases} \quad (5.28)$$

e para a componente tangencial do campo elétrico

$$E_{gx}(a) = E_{dx}(a) \quad (5.29)$$

$$\Rightarrow \begin{cases} \tan(\beta a) = \frac{\epsilon_g \kappa}{\epsilon_m \beta}, \text{modos pares} \\ \tan(\beta a) = -\frac{\epsilon_m \beta}{\epsilon_g \kappa}, \text{modos ímpares} \end{cases} \quad (5.30)$$

sendo que para obter as últimas igualdades, tivemos em conta as expressões para h_d , obtidas na primeira condição fronteira. Estas são as relações de dispersão para os modos pares e ímpares do interior do guia de ondas, que sendo equações transcendentais, têm de ser resolvidas numericamente. Podemos ver na figura 5.5 as mesmas representadas graficamente, onde os pontos azuis vêm da primeira equação de (5.30) e os pontos vermelhos da segunda equação.

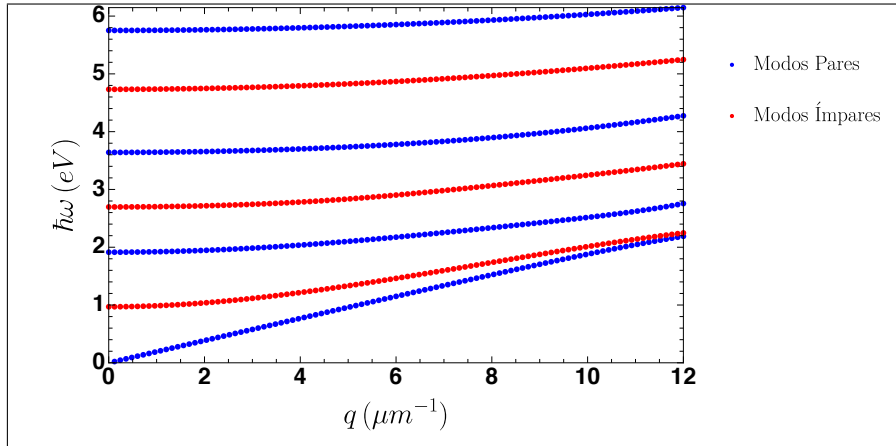


Figura 5.5: Modos próprios do guia de ondas perfurado num metal real, para $a = 0.3 \mu\text{m}$ e $\epsilon_1 = 1$. ϵ_m corresponde à função dielétrica do ouro que se encontra apresentada no apêndice B.

Analisando a figura 5.5, podemos ver que o modo fundamental é um modo par e que, o primeiro modo excitado que corresponde a um modo ímpar, só existe para energias superiores a 1 eV. Assim, estando nós interessados em energias inferiores a essa, tal como anteriormente referido, podemos considerar apenas o modo fundamental no decorrer dos cálculos.

O objetivo agora é então resolver o problema de espalhamento para o modo fundamental deste sistema. De modo a prosseguir falta apenas determinar o coeficiente h_e por meio da condição fronteira em $y = -a$ a que o campo magnético deve obedecer:

$$H_g(-a) = H_e(-a) \quad (5.31)$$

$$\Leftrightarrow h_e = e^{\kappa a} \cos(\beta a) \quad (5.32)$$

e definir os campos magnético e elétrico no meio 2

$$\begin{cases} H_2(x, y) = \int_{-\infty}^{\infty} t_p e^{i(q_2 x + p y)} dp \\ E_{2y}(x, y) = \gamma_2 \int_{-\infty}^{+\infty} t_p q_2 e^{i(q_2 x + p y)} dp \end{cases} \quad (5.33)$$

sendo $q_2 = \sqrt{k_2^2 - p^2}$ e t_p o coeficiente de transmissão. A componente x do campo elétrico não foi escrita, pois não é necessária para a resolução do problema.

Para podermos então calcular a transmitância e a refletância do sistema começamos, tal como anteriormente, por relacionar os campos na interface entre os dois meios. Assim, em $x = 0$, temos para o campo magnético

$$H_1(0, y) = H_2(0, y) \quad (5.34)$$

$$\begin{aligned} \Leftrightarrow [1 + r][\cos(\beta y)\Theta(a - |y|) + \cos(\beta a)e^{\kappa a}e^{-\kappa y}\Theta(y - a) + \cos(\beta a)e^{\kappa a}e^{\kappa y}\Theta(-y - a)] = \\ = \int_{-\infty}^{\infty} t_p e^{i p y} dp. \end{aligned} \quad (5.35)$$

Para simplificar esta equação fazemos

$$\int_{-\infty}^{+\infty} (5.35)[\cos(\beta y)\Theta(a - |y|) + e^{-\kappa y}\Theta(y - a) + e^{\kappa y}\Theta(-y - a)] dy \quad (5.36)$$

que permite escrever

$$\Rightarrow (1 + r)[a(1 + \text{sinc}(2\beta a)) + \cos(\beta a)e^{-\kappa a}/\kappa] = \int_{-\infty}^{+\infty} t_p (f_p + g_p) dp \quad (5.37)$$

sendo

$$f_p = \frac{2p \cos(\beta a) \sin(pa) - 2\beta \cos(pa) \sin(\beta a)}{p^2 - \beta^2} \quad (5.38)$$

$$g_p = \frac{2\kappa \cos(pa) - 2p \sin(pa)}{p^2 + \kappa^2} e^{-\kappa a}. \quad (5.39)$$

Antes de aplicar a condição fronteira ao campo elétrico, é necessário voltar um pouco atrás e escrever a componente y do mesmo no meio 1, a qual é dada por:

$$E_{1y}(x, y) = q_1 (e^{iq_1 x} - r e^{-iq_1 x}) \cdot [E_{gy}(y) + E_{dy}(y) + E_{ey}(y)] \quad (5.40)$$

onde

$$E_{gy}(y) = \gamma_1 \cos(\beta y)\Theta(a - |y|) \quad (5.41)$$

$$E_{dy}(y) = e^{\kappa a} \cos(\beta a) \gamma_m e^{-\kappa y} \Theta(y - a) \quad (5.42)$$

$$E_{ey}(y) = e^{\kappa a} \cos(\beta a) \gamma_m e^{\kappa y} \Theta(-y - a). \quad (5.43)$$

Estamos assim capazes de escrever a condição fronteira:

$$E_{1y}(0, y) = E_{2y}(0, y) \quad (5.44)$$

$$\begin{aligned} \Leftrightarrow q_1(1 - r) \cdot [\gamma_1 \cos(\beta y) \Theta(a - |y|) + e^{\kappa a} \cos(\beta a) \gamma_m e^{-\kappa y} \Theta(y - a) + e^{\kappa a} \cos(\beta a) \gamma_m e^{\kappa y} \Theta(-y - a)] = \\ = \gamma_2 \int_{-\infty}^{+\infty} t_p q_2 e^{i p y} dp. \end{aligned} \quad (5.45)$$

Para simplificar a equação anterior é necessário fazer $\int_{-\infty}^{+\infty} (5.45) e^{-i \gamma y} dy$, dando isto origem a

$$\Rightarrow t_p = \frac{q_1}{2\pi q_2} [\epsilon_2 / \epsilon_1 f_p + \epsilon_2 / \epsilon_m \cos(\beta a) e^{\kappa a} g_p] (1 - r) \quad (5.46)$$

que é o coeficiente de transmissão. Se substituirmos agora t_p em (5.37) e resolvermos para r , chegamos a:

$$\Rightarrow r = \frac{\frac{q_1}{2\pi} \epsilon_2 I_p - a [1 + \text{sinc}(2\beta a)] - \cos(\beta a) e^{-\kappa a} / \kappa}{\frac{q_1}{2\pi} \epsilon_2 I_p + a [1 + \text{sinc}(2\beta a)] + \cos(\beta a) e^{-\kappa a} / \kappa} \quad (5.47)$$

com

$$I_p = \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\frac{f_p}{\epsilon_1} + \frac{\cos(\beta a) e^{\kappa a} g_p}{\epsilon_m} \right] \frac{f_p + g_p}{q_2} dp. \quad (5.48)$$

Podemos assim passar para o cálculo da refletância e transmitância, dadas por

$$R = |r|^2 \quad (5.49)$$

$$T = \left| \frac{S_x^t}{S_x^i} \right| \quad (5.50)$$

sendo S_x^t o vetor de Poynting transmitido, dado pela equação (5.16) e S_x^i o vetor de Poynting incidente dado por

$$S_x^i = \frac{1}{2} \Re \left[q_1 \gamma_1 a (1 + \text{sinc}(2\beta a)) + q_1 \frac{\gamma_m \cos^2(\beta a)}{\kappa} \right]. \quad (5.51)$$

Assim, vemos na figura 5.6, uma comparação entre a refletância e a transmitância dos casos estudados nesta e na secção anterior, ou seja, o caso em que o metal que envolve o guia de ondas é real e o caso em que é perfeito, como função da energia da luz. Ora para o metal real, vimos que os campos não se propagam apenas no interior do guia de ondas, mas também no interior do metal, no qual decaem exponencialmente na direção transversal à direção de propagação. Assim sendo, existe uma maior área de transferência de energia entre os dois meios, o que faz com que a transmitância deste sistema, seja maior que o da secção anterior, para a mesma frequência da luz.

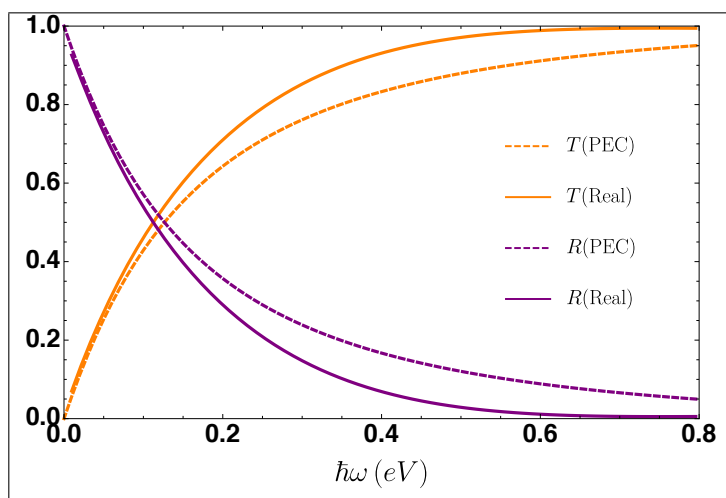


Figura 5.6: Refletância e transmitância do sistema em função da energia da onda eletromagnética incidente para $\epsilon_1 = \epsilon_2 = 1$ e $a = 0.3 \mu\text{m}$. As linhas a cheio correspondem ao caso em que o metal é real e as linhas tracejadas ao metal perfeito. ϵ_m corresponde à função dielétrica do ouro que se encontra apresentada no apêndice B.

Na figura 5.7, podemos ver o perfil espacial do campo elétrico, para duas energias diferentes: 0.8 eV que corresponde a um caso de alta transmitância e 0.06 eV que corresponde a alta refletância. Podemos ver que o perfil dos campos é muito semelhante ao caso do metal perfeito (ver figura 5.3), a par do interior do metal, onde desta vez é possível ver a existência de campos elétricos no seu interior, uma vez que é real.

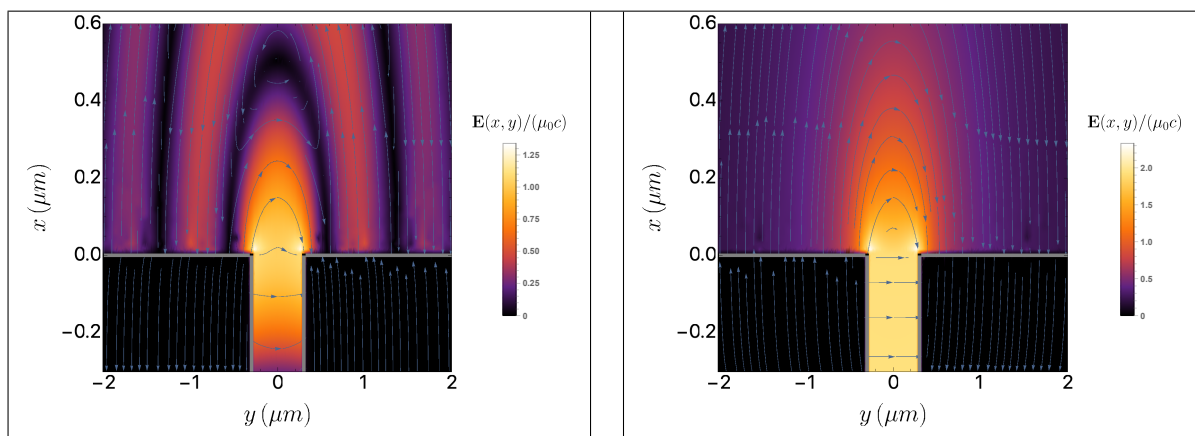


Figura 5.7: Perfil espacial dos campos elétricos nos dois meios considerados para $a = 0.3 \mu\text{m}$, $\epsilon_1 = \epsilon_2 = 1$, $\hbar\omega = 0.8$ eV (esquerda) e $\hbar\omega = 0.06$ eV (direita). A superfície do metal é denotada pelas linhas cinzentas. ϵ_m corresponde à função dielétrica do ouro que se encontra apresentada no apêndice B.

5.3 Guia de Ondas Semi-Infinito num Metal Perfeito Seguido de uma Folha Grafeno

Estamos agora interessados no caso em que inserimos uma folha de grafeno em $x = b$ no sistema da secção 5.1. Podemos ver a representação deste último na figura 5.8.

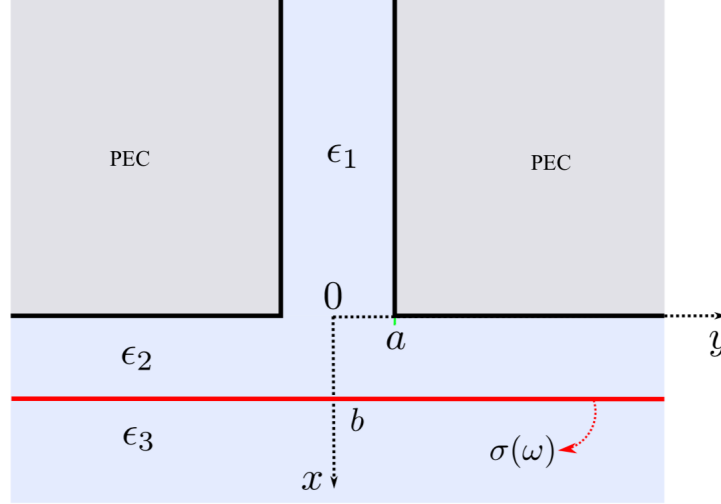


Figura 5.8: Guia de ondas semi-infinito perfurado num metal perfeito (PEC). O eixo z aponta para fora da folha. ϵ_1 , ϵ_2 e ϵ_3 são as funções dielétricas dos três meios considerados. $2a$ é a largura do guia de ondas e b a distância deste à folha de grafeno de condutividade $\sigma(\omega)$.

Com isto, os campos elétrico e magnético no meio 1 mantêm-se, mas no meio 2 passam a ter uma componente difratada e assim temos

$$\begin{cases} H_2(x, y) = \int_{-\infty}^{+\infty} H_i(p) e^{i(q_2 x + py)} dp + \int_{-\infty}^{+\infty} H_s(p) e^{i(-q_2 x + py)} dp \\ E_{2x}(x, y) = -\frac{\mu_0 c^2}{\omega \epsilon_2} \left[\int_{-\infty}^{+\infty} p H_i(p) e^{i(q_2 x + py)} dp + \int_{-\infty}^{+\infty} p H_s(p) e^{i(-q_2 x + py)} dp \right] \\ E_{2y}(x, y) = \frac{\mu_0 c^2}{\omega \epsilon_2} \left[\int_{-\infty}^{+\infty} q_2 H_i(p) e^{i(q_2 x + py)} dp - \int_{-\infty}^{+\infty} q_2 H_s(p) e^{i(-q_2 x + py)} dp \right] \end{cases} \quad (5.52)$$

sendo $H_i(p)$ e $H_s(p)$ coeficientes a determinar e $q_2 = \sqrt{k_2^2 - p^2}$.

Com a introdução de mais uma interface temos um novo meio (após o grafeno), no qual os campos são dados por

$$\begin{cases} H_3(x, y) = \int_{-\infty}^{+\infty} t_p e^{i(q_3(x-b) + py)} dp \\ E_{3x}(x, y) = -\frac{\mu_0 c^2}{\omega \epsilon_3} \int_{-\infty}^{+\infty} t_p p e^{i(q_3(x-b) + py)} dp \\ E_{3y}(x, y) = \frac{\mu_0 c^2}{\omega \epsilon_3} \int_{-\infty}^{+\infty} t_p q_3 e^{i(q_3(x-b) + py)} dp \end{cases} \quad (5.53)$$

com t_p a ser o coeficiente de transmissão e $q_3 = \sqrt{k_3^2 - p^2}$.

Precisamos uma vez mais de relacionar os campos nas interfaces dos diversos meios. Começando por $x = 0$, as componentes tangenciais do campo magnético devem ser contínuas e portanto:

$$H_1(0, y) = H_2(0, y) \quad (5.54)$$

$$\Leftrightarrow (1+r)\Theta(a-|y|) = \int_{-\infty}^{\infty} [H_i(p) + H_s(p)]e^{ipy} dp. \quad (5.55)$$

Se utilizarmos as técnicas de cálculo que temos vindo a desenvolver ao longo do trabalho para a manipulação das equações resultantes das condições fronteira, isto é, se fizermos $\int_{-a}^a (5.55) dy$ obtemos

$$\Rightarrow 1+r = \int_{-\infty}^{\infty} [H_i(p) + H_s(p)]\text{sinc}(pa) dp. \quad (5.56)$$

Por sua vez, as componentes tangenciais do campo elétrico também devem ser contínuas:

$$E_{1y}(0, y) = E_{2y}(0, y) \quad (5.57)$$

$$\Leftrightarrow \frac{k_1}{\epsilon_1}(1-r)\Theta(a-|y|) = \frac{1}{\epsilon_2} \int_{-\infty}^{\infty} q_2 [H_i(p) - H_s(p)]e^{ipy} dp \quad (5.58)$$

e simplificando através de $\int_{-\infty}^{+\infty} E_{1y}(0, y) = E_{2y}(0, y)e^{-ipy} dy$ obtemos

$$\Rightarrow H_i(p) - H_s(p) = \frac{\epsilon_2 a k_1}{\epsilon_1 \pi q_2} \text{sinc}(pa)(1-r). \quad (5.59)$$

Passando agora para a segunda interface do sistema, $x = b$, temos para o campo elétrico:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} E_{2y}(b, y) = E_{3y}(b, y)e^{-ipy} dy \quad (5.60)$$

$$\Rightarrow t_p = [H_i(p)e^{iq_2 b} - H_s(p)e^{-iq_2 b}] \frac{\epsilon_3 q_2}{\epsilon_2 q_3}. \quad (5.61)$$

Já para o campo magnético é agora necessário ter em conta a condutividade do grafeno na condição fronteira:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} [H_2(b, y) - H_3(b, y) = \sigma(\omega)E_{3y}(b, y)]e^{-ipy} dy \quad (5.62)$$

$$\Rightarrow t_p = \frac{H_i(p)e^{iq_2 b} + H_s(p)e^{-iq_2 b}}{1 + \sigma(\omega)\gamma_3 q_3}. \quad (5.63)$$

Igualando agora as equações (5.61) e (5.63) sai

$$\Rightarrow H_s(p) = L e^{2iq_2 b} H_i(p) \quad (5.64)$$

sendo L definido por

$$L \equiv \frac{\epsilon_3/\epsilon_2 q_2/q_3 - (1 + \sigma(\omega)\gamma_3 q_3)^{-1}}{\epsilon_3/\epsilon_2 q_2/q_3 + (1 + \sigma(\omega)\gamma_3 q_3)^{-1}}. \quad (5.65)$$

Combinando agora (5.64) e (5.59) ficamos com uma equação para $H_i(p)$:

$$\Rightarrow H_i(p) = \frac{a\epsilon_2 k_1}{\epsilon_1 \pi q_2} \frac{\text{sinc}(pa)}{1 - Le^{2iq_2 b}} (1 - r) \quad (5.66)$$

que juntamente com (5.56) e com (5.64) permite obter o coeficiente r e consequentemente o coeficiente t_p :

$$\left\{ \begin{array}{l} r = \frac{\epsilon_2/\epsilon_1 a/\pi k_1 I_L - 1}{\epsilon_2/\epsilon_1 a/\pi k_1 I_L + 1} \\ t_p = \frac{\epsilon_3 a k_1}{\epsilon_1 \pi q_3} \frac{2\text{sinc}(pa)}{1 + \epsilon_2/\epsilon_1 a/\pi k_1 I_L} e^{iq_2 b} \frac{1 - L}{1 - Le^{iq_2 b}} \end{array} \right. \quad (5.67)$$

sendo

$$I_L = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1 + Le^{2iq_2 b}}{1 - Le^{2iq_2 b}} \frac{\text{sinc}^2(pa)}{q_2} dp. \quad (5.68)$$

Com isto e considerando as fórmulas apresentadas anteriormente para os vetores de Poynting, podemos obter a refletância, a transmitância e a absorvância por meio das equações:

$$R = |r|^2 \quad (5.69)$$

$$T = \frac{c\pi}{a\omega} \Re \left[\frac{\sqrt{\epsilon_1}}{\epsilon_3} \int_{-k_3}^{k_3} |t_p|^2 q dp \right] \quad (5.70)$$

$$A = 1 - R - T. \quad (5.71)$$

Podemos então ver na figura 5.9 a representação gráfica destas grandezas como função de $\hbar\omega$. Na parte esquerda da figura temos a absorvância do sistema (fazemos uma representação do logaritmo natural desta grandeza para melhor visualização dos máximos) para duas energias de Fermi distintas: a linha a cheio é para $E_F = 1$ eV e a linha tracejada para $E_F = 0.5$ eV. Podemos observar vários máximos para cada uma das linhas da absorvância. Comparando as frequências dos primeiros picos de $A(E_F)$ e de $A(2E_F)$, obtemos aproximadamente $\sqrt{2}$, o que também acontece para os restantes picos. Isto indica a excitação de plasmões no grafeno, uma vez que, de acordo com as fórmulas apresentadas no capítulo 3 para a relação de dispersão do grafeno, sabemos que $\omega_{SPP} \propto \sqrt{E_F}$ e portanto temos

$$\frac{\omega(E_{F1})}{\omega(E_{F2})} = \sqrt{\frac{E_{F1}}{E_{F2}}}. \quad (5.72)$$

É importante notar que dois picos da mesma ordem para valores de E_F diferentes correspondem ao mesmo momento linear, isto é, o primeiro máximo de $A(E_F)$ e de $A(2E_F)$ indicam plasmões com o mesmo momento, mas com energias diferentes, sendo o mesmo válido para os picos que se seguem.

Assim, existe uma excitação de SPP's no grafeno com um determinado momento linear, cuja energia vai depender da energia de Fermi.

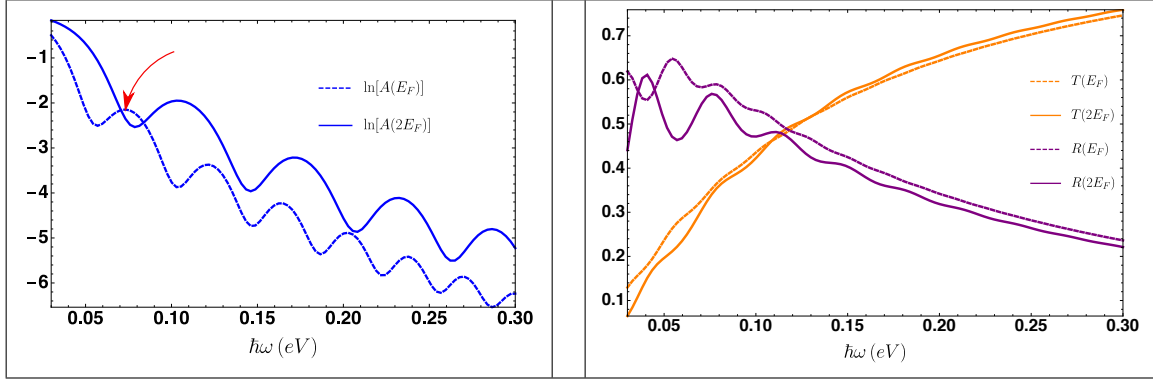


Figura 5.9: Esquerda: absorvância em função da energia da radiação para duas energias de Fermi distintas. Direita: refletância e transmitância em função da energia da radiação para duas energias de Fermi distintas. Em ambos os casos temos $\epsilon_1 = 1 = \epsilon_3 = \epsilon_2$, $a = 0.3 \mu m$, $b = 0.01 \mu m$, $\hbar\gamma = 0.004 \text{ eV}$ e $E_F = 0.5 \text{ eV}$.

É também importante reparar no facto de que com a diminuição da energia da radiação incidente a absorvância aumenta. Isto é explicado pelo aumento da parte real da condutividade do grafeno para frequências baixas, já discutido na secção 4.4.

Na figura 5.10 efetuamos um estudo da variação da energia dos primeiros máximos da absorvância com a energia de Fermi e, fazendo um ajuste numérico aos pontos obtidos, verificamos que estes variam proporcionalmente com $\sqrt{E_F}$, o que é um excelente indicador da excitação de SPP's, pois como apresentado anteriormente, para o grafeno temos $\omega_{SPP} \propto \sqrt{E_F}$.

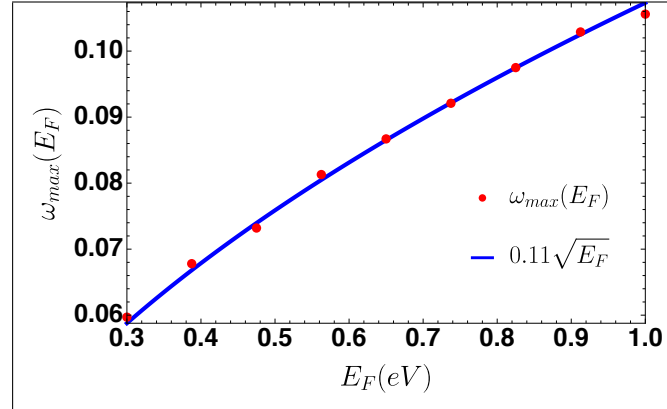


Figura 5.10: Valores de $\hbar\omega$ para os quais ocorrem os picos na absorvância do sistema para diversas energias de Fermi do grafeno. Os pontos a vermelho são determinados numericamente a partir do gráfico de A e a linha azul resulta de um ajuste aos pontos. Os parâmetros considerados são $\epsilon_1 = 1 = \epsilon_3 = \epsilon_2$, $a = 0.3 \mu m$, $b = 0.01 \mu m$ e $\hbar\gamma = 0.004 \text{ eV}$.

Com o intuito de ter uma perspetiva da forma dos campos elétricos do problema, é interessante olhar para a figura 5.11, onde podemos ver uma representação espacial dos mesmos nos três meios que compõem o sistema. Os máximos e mínimos de intensidade presentes na região entre o metal e o grafeno, são devidos

à formação dos plasmões. A região a preto representa o interior do metal, pois sendo este perfeito não permite campos elétricos no seu interior. A figura corresponde a uma frequência para a qual temos o primeiro máximo da absorvância (ver seta no gráfico 5.9).

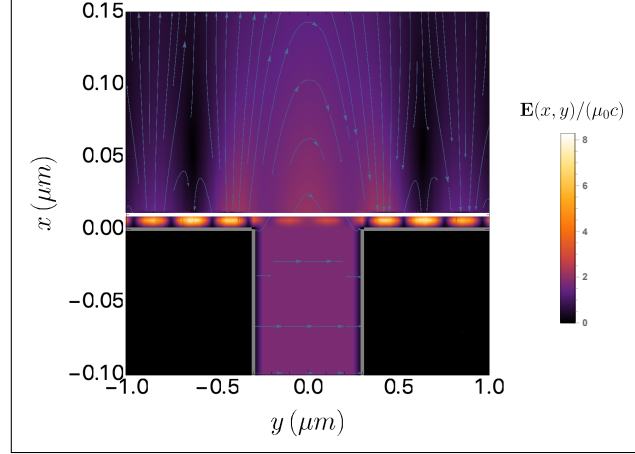


Figura 5.11: Perfil dos campos elétricos nas várias regiões do espaço para $\epsilon_1 = 1 = \epsilon_3 = \epsilon_2$, $a = 0.3 \mu m$, $b = 0.01 \mu m$, $\hbar\omega = 0.073 \text{ eV}$, $\hbar\gamma = 0.004 \text{ eV}$ e $E_F = 0.5 \text{ eV}$. A folha de grafeno é representada pela linha branca e a superfície do metal pelas linhas cinzentas.

Com o objetivo de tentar aumentar os picos presentes na absorvância e como tal, excitar de forma mais eficiente plasmões, é necessário considerar que além do modo fundamental, também é refletido o modo $n = 2$ no interior do guia de ondas.

Assim sendo, regressamos ao início do problema para definir os campos elétrico e magnético no meio 1:

$$\left\{ \begin{array}{l} H_1(x, y) = [e^{ik_1x} + r_0e^{-ik_1x} + r_2e^{-i\alpha_2x} \cos(\beta_2(y+a))]\Theta(a-|y|) \\ E_{1x}(x, y) = -\frac{i\mu_0c^2}{\omega\epsilon_1} \beta_2 r_2 e^{-i\alpha_2x} \sin(\beta_2(y+a))\Theta(a-|y|) \\ E_{1y}(x, y) = \frac{\mu_0c^2}{\omega\epsilon_1} [k_1(e^{ik_1x} - r_0e^{-ik_1x}) - \alpha_2 r_2 e^{-i\alpha_2x} \cos(\beta_2(y+a))]\Theta(a-|y|) \end{array} \right. \quad (5.73)$$

onde r_0 é o coeficiente de reflexão do modo 0, r_2 o coeficiente de reflexão do modo 2, $\beta_2 = \frac{\pi}{a}$ e $\alpha_2 = \sqrt{k_1^2 - \beta_2^2}$.

Passando então para as condições fronteira, relativamente ao caso em que consideramos apenas um modo, só as condições para os campos em $x = 0$ se alteram. Para o campos magnéticos começamos então por fazer

$$\int_{-a}^a [H_1(0, y) = H_2(0, y)] dy \quad (5.74)$$

o que dá origem a

$$\Rightarrow 1 + r_0 = \int_{-\infty}^{\infty} [H_i(p) + H_s(p)] \text{sinc}(pa) dp. \quad (5.75)$$

Por outro lado, fazendo agora

$$\int_{-a}^a [H_1(0, y) = H_2(0, y)] \cos(\beta_2 y) dy \quad (5.76)$$

obtemos

$$\Rightarrow r_2 = \int_{-\infty}^{\infty} [H_i(p) + H_s(p)] \frac{ap \sin(pa)}{p^2 a^2 - \pi^2} dp. \quad (5.77)$$

Para a equação da continuidade do campo elétrico tangencial utilizamos

$$\int_{-\infty}^{+\infty} [E_{1y}(0, y) = E_{2y}(0, y)] e^{-ipy} dy \quad (5.78)$$

para chegar a

$$\Rightarrow H_i(p) - H_s(p) = \frac{\epsilon_2 a}{\epsilon_1 \pi q_2} \left[k_1 \text{sinc}(pa)(1 - r_0) - \frac{\alpha_2 r_2 ap \sin(pa)}{a^2 p^2 - \pi^2} \right]. \quad (5.79)$$

Como as condições fronteira em $x = b$ se mantêm podemos então recorrer a (5.64) para eliminar $H_s(p)$ e a equação anterior fica

$$\Rightarrow H_i(p) = \frac{a \epsilon_2}{\epsilon_1 \pi q_2} \frac{1}{1 - L e^{2iq_2 b}} \left[k_1 \text{sinc}(pa)(1 - r_0) - \frac{\alpha_2 r_2 ap \sin(pa)}{a^2 p^2 - \pi^2} \right]. \quad (5.80)$$

Finalmente, substituindo a equação anterior e (5.64) em (5.75) e em (5.77) e resolvendo o sistema de duas equações que passa a ter apenas r_0 e r_2 como variáveis a determinar, podemos obter:

$$r_0 = \frac{\Delta k_1 I_1 - \frac{\alpha_2 \Delta^2 I_2^2 k_1}{1 + \alpha_2 a^2 \Delta I_3} - 1}{\Delta k_1 I_1 - \frac{\alpha_2 \Delta^2 I_2^2 k_1}{1 + \alpha_2 a^2 \Delta I_3} + 1} \quad (5.81)$$

e

$$r_2 = \frac{k_1 I_2 \Delta (1 - r_0)}{1 + \alpha_2 a^2 \Delta I_3} \quad (5.82)$$

onde temos $\Delta \equiv \frac{\epsilon_2 a}{\epsilon_1 \pi}$ e

$$I_1 = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1 + L e^{2iq_2 b}}{1 - L e^{2iq_2 b}} \frac{\text{sinc}^2(pa)}{q_2} dp \quad (5.83)$$

$$I_2 = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1 + L e^{2iq_2 b}}{1 - L e^{2iq_2 b}} \frac{\sin^2(pa)}{q_2 (p^2 a^2 - \pi^2)} dp \quad (5.84)$$

$$I_3 = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1 + L e^{2iq_2 b}}{1 - L e^{2iq_2 b}} \frac{p^2 \sin^2(pa)}{q_2 (p^2 a^2 - \pi^2)^2} dp. \quad (5.85)$$

Assim, estando determinados todos os coeficientes dos campos podemos obter mais uma vez a absorvância, refletância e transmitância a partir dos vetores de Poynting. Neste caso, como consideramos mais um modo na cavidade, o vetor de Poynting refletido é alterado. A sua fórmula geral, quando temos em conta todos os modos da cavidade é:

$$S_x^r = \frac{1}{2} \int_{-a}^a \Re[E_{1y}^r H_{1x}^{r*}] dy = -\frac{1}{2} \sum_{m,n=0} \Re \left[\gamma_1 \int_{-a}^a \alpha_n r_n r_m^* \cos[\beta_m(y+a)] \cos[\beta_n(y+a)] dy \right] \quad (5.86)$$

$$\Rightarrow S_x^r = -\Re \left[\gamma_1 k_1 |r_0|^2 a + \frac{1}{2} \gamma_1 \sum_{n=1} \alpha_n |r_n|^2 a \right]. \quad (5.87)$$

Os vetores de Poynting incidente e transmitido são dados pelas equações (5.14) e (5.16), respetivamente. Assim, a nova fórmula para a refletância fica:

$$R = |r_0|^2 + \frac{1}{2} \Re \left[\frac{\alpha_2}{k_1} \right] |r_2|^2. \quad (5.88)$$

Na figura 5.12 voltamos a representar R , T e A para os mesmos parâmetros que anteriormente, mas desta vez tendo em conta a existência de dois modos refletidos na cavidade.

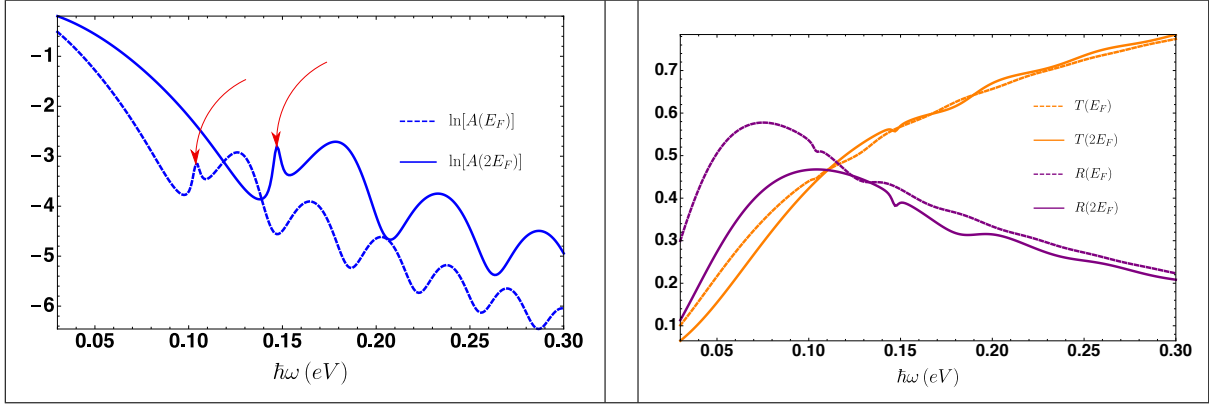


Figura 5.12: Esquerda: absorvância em função da energia da radiação para duas energias de Fermi distintas. Direita: refletância e transmitância em função da energia da radiação para duas energias de Fermi distintas. Em ambos os casos temos $\epsilon_1 = 1 = \epsilon_3 = \epsilon_2$, $a = 0.3 \mu\text{m}$, $b = 0.01 \mu\text{m}$, $\hbar\gamma = 0.004 \text{ eV}$ e $E_F = 0.5 \text{ eV}$.

Neste caso, notamos o aparecimento de dois picos mais estreitos que os restantes para uma energia perto de 0.1 eV para $E_F = 0.5 \text{ eV}$ e para uma energia perto de 0.15 eV para $E_F = 1 \text{ eV}$ (ver setas na figura 5.12). Para entender o que distingue esta ressonância, recorreremos à figura 5.13, onde podemos observar o perfil dos campos elétricos nas várias regiões do espaço, tanto para o valor de $\hbar\omega$ para o qual ocorre este pico bem como para a frequência do máximo que o segue.

Assim, vemos que o primeiro corresponde a plasmões que se formam essencialmente na zona acima da abertura, enquanto que o segundo (e os restantes picos mais largos) corresponde a SPP's que se formam na zona entre o metal e o grafeno.

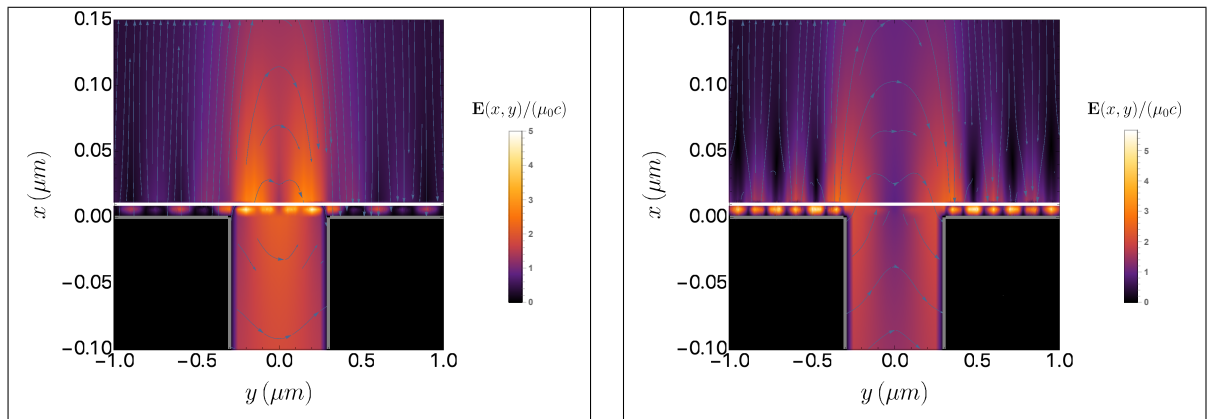


Figura 5.13: Perfil dos campos elétricos nas várias regiões do espaço para $\epsilon_1 = 1 = \epsilon_3 = \epsilon_2$, $a = 0.3 \mu\text{m}$, $b = 0.01 \mu\text{m}$, $\hbar\omega = 0.1038 \text{ eV}$ (esquerda), $\hbar\omega = 0.1263 \text{ eV}$ (direita), $\hbar\gamma = 0.004 \text{ eV}$ e $E_F = 0.5 \text{ eV}$. A folha de grafeno é representada pela linha branca e a superfície do metal pelas linhas cinzentas.

5.4 Eficiência de Excitação de SPP's numa Folha de Grafeno

Nesta secção voltamos a considerar o problema abordado na secção 5.3. O objetivo é obter a densidade de probabilidade espacial $|\alpha_{\pm}(y)|^2$ de excitação dos plasmões da folha de grafeno, localizada após o guia de ondas. Neste coeficiente, os sinais mais e menos representam, respetivamente, a densidade de probabilidade de um SPP se propagar para a direita ou para a esquerda do guia de ondas.

De forma a obter estes coeficientes, é necessário começar por escrever os campos elétricos e magnéticos determinados no problema referido, como uma sobreposição dos modos SPP e dos modos radiativos suportados pelo grafeno:

$$H(x, y) = [\alpha^+(y) + \alpha^-(y)]H^{SPP}(x, y) + \int d\rho a(y, \rho)H^{rad}(x) \quad (5.89)$$

$$E_x(x, y) = [\alpha^+(y) - \alpha^-(y)]E_x^{SPP}(x, y) + \int d\rho a(y, \rho)E_x^{rad}(x), \quad (5.90)$$

onde $H^{SPP}(x, y)$ e $E_x^{SPP}(x, y)$ são os modos plasmónicos e $H^{rad}(x)$ e $E_x^{rad}(x)$ os modos radiativos.

Na ausência de dissipação estes modos obedecem à seguinte relação de ortogonalidade:

$$\int dx H^{SPP} E_x^{rad} = 0 = \int dx H^{rad} E_x^{SPP}, \quad (5.91)$$

a qual aplicada às equações anteriores permite escrever

$$[\alpha^+(y) + \alpha^-(y)] \int E_x^{SPP} H^{SPP} dx = \int H E_x^{SPP} dx \quad (5.92)$$

$$[\alpha^+(y) - \alpha^-(y)] \int E_x^{SPP} H^{SPP} dx = \int E_x H^{SPP} dx. \quad (5.93)$$

Além disto, é apenas necessário calcular $\alpha^+(y)$, uma vez que por simetria do problema temos $\alpha^+(y) = \alpha^-(-y)$. Assumindo também que para $y > a$ temos $\alpha^-(y) \approx 0$, interessa-nos apenas obter o coeficiente $\alpha^+(y)$, que é possível somando as duas equações anteriores:

$$\alpha^+(y) = \frac{\int H E_x^{SPP} dx + \int E_x H^{SPP} dx}{2 \int E_x^{SPP} H^{SPP} dx}. \quad (5.94)$$

Estando os campos plasmónicos para uma folha de grafeno nas proximidades de um metal determinados no capítulo 3 e os campos elétrico e magnético totais do sistema determinados na secção 5.3, temos tudo o que necessitamos para iniciar a simplificação da equação anterior.

Assim, para o denominador da mesma temos

$$\int E_x^{SPP} H^{SPP} dx = -qe^{2iqy} \left[u^2 \gamma_2 \frac{2\kappa_2 b + \sinh(2\kappa_2 b)}{4\kappa_2} + \frac{\gamma_3 v^2}{2\kappa_3} \right] \quad (5.95)$$

onde os coeficientes u e v são, respetivamente, $2h_1$ e h_2 apresentados anteriormente e relacionados por meio da equação (3.20), κ_i são os números de onda definidos também no capítulo 3, $\gamma_i = \frac{\mu_0 c^2}{\omega \epsilon_i}$ e b é a distância do grafeno ao metal.

Por sua vez, o numerador de α_+ dá origem a

$$\begin{aligned} \int H E_x^{SPP} dx + \int E_x H^{SPP} dx = & -\gamma_2 u \int_{-\infty}^{+\infty} dp e^{i(p+q)y} (p+q) \left[\frac{iq_2}{q_2^2 + \kappa_2^2} [H_i(p) - H_s(p)] + \right. \\ & \left. + \frac{\kappa_2 \sinh(\kappa_2 b)}{q_2^2 + \kappa_2^2} [H_i(p) e^{iq_2 b} + H_s(p) e^{-iq_2 b}] - \frac{iq_2 \cosh(\kappa_2 b)}{q_2^2 + \kappa_2^2} [H_i(p) e^{iq_2 b} - H_s(p) e^{-iq_2 b}] \right] \\ & - \gamma_3 v \int_{+\infty}^{-\infty} (p+q) t_p \frac{e^{i(p+q)y}}{\kappa_3 - iq_3} dp \end{aligned}$$

sendo os coeficientes $H_i(p)$, $H_s(p)$ e t_p dados respetivamente pelas equações (5.66), (5.64) e (5.61), obtidas e explicadas na secção 5.3.

Resta-nos agora determinar os coeficientes u e v , o que é feito considerando que toda a energia que incide no final do guia de ondas é totalmente transferida para os campos dos SPP's. Assim, o vetor de Poynting associado a estes últimos é dado por:

$$S_{SPP} = -\frac{1}{2} \int_0^\infty dx \Re[E_x^{SPP} H^{SPP}] \quad (5.96)$$

e deve ser igual ao vetor de Poynting incidente no meio 1 dado pela equação (5.14):

$$a \frac{\mu_0 c}{\sqrt{\epsilon_1}} = q \frac{\mu_0 c^2}{2\omega} \left[\frac{u^2}{\epsilon_2} \frac{2\kappa_2 b + \sinh(2\kappa_2 b)}{4\kappa_2} + \frac{v^2}{2\epsilon_3 \kappa_3} \right], \quad (5.97)$$

o que permite obter uma equação para u

$$u^2 = \frac{8\omega a \epsilon_2}{c \sqrt{\epsilon_1} q} \left[2b + \frac{\sinh(2\kappa_2 b)}{\kappa_2} + \frac{2\epsilon_3 \epsilon_0^2 \omega^2 \epsilon_2 \cosh^2(\kappa_2 b)}{\kappa_3 (\epsilon_0 \epsilon_3 \omega + i\sigma \kappa_3)^2} \right]^{-1}. \quad (5.98)$$

Assim, temos o coeficiente $\alpha_+(y)$ totalmente determinado e podemos representar graficamente o seu módulo quadrado como função da frequência da luz incidente, como é possível observar na figura 5.14. Podemos ver que existem dois picos mais intensos para cada valor de E_F , que indicam a frequência de radiação com maior probabilidade de excitar modos plasmónicos no grafeno em $y = 2a$.

Além disto, podemos também verificar que a energia dos picos de cada uma das linhas (vermelha e azul), é muito semelhante à dos máximos da absorvância calculada na secção 5.3 (no caso em que consideramos apenas um modo no guia de ondas), o que é um excelente indicador da excitação de SPP's com estas frequências.

Por fim, observando por exemplo os valores de $\hbar\omega$ dos picos de maior intensidade, 0.074 eV para $\alpha(E_F)$ e 0.105 eV para $\alpha(2E_F)$, verificamos que a razão entre eles é aproximadamente $\sqrt{2}$, o que está da acordo mais uma vez com a relação de dispersão dos SPP's. O mesmo acontece para os máximos de menor intensidade.

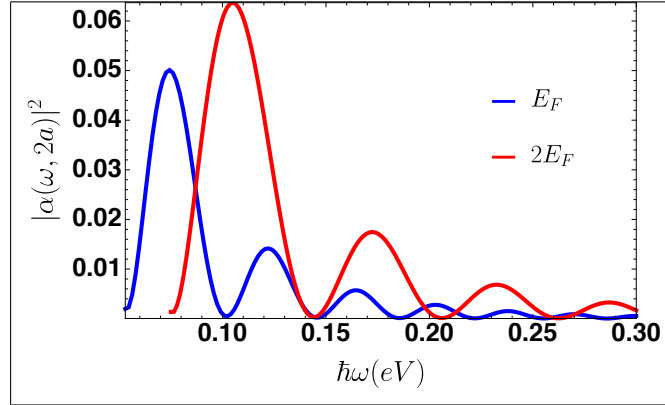


Figura 5.14: Densidade de probabilidade espacial de excitação de SPP's como função da energia da luz, para $a = 0.3 \mu\text{m}$, $b = 0.01 \mu\text{m}$, $\epsilon_1 = 1 = \epsilon_2 = \epsilon_3$, $E_F = 0.5 \text{ eV}$ e $\hbar\gamma = 0.004 \text{ eV}$.

5.5 Guia de Ondas Semi-Infinito num Metal Real Seguido de uma Folha de Grafeno

Na presente secção pretendemos resolver o problema da secção 5.3, no caso em que o metal que envolve o guia de ondas é real. Como tal, os campos eletromagnéticos no meio 1 (guia de ondas mais metal), são os mesmos da secção 5.2 e os campos do meio 2 e 3 são os mesmos da secção 5.3.

Na figura 5.15, vemos que o esquema do problema é igual ao anterior, a única alteração deve-se apenas à função dielétrica do metal.

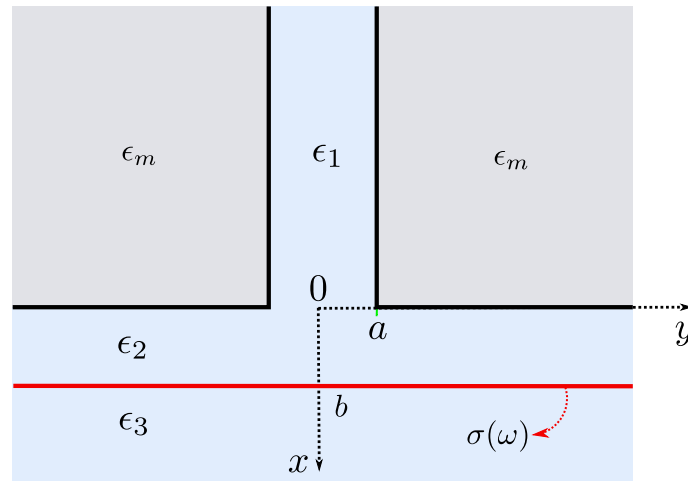


Figura 5.15: Guia de ondas semi-infinito perfurado num metal real. O eixo z aponta para fora da folha. ϵ_1 , ϵ_2 , ϵ_3 são as funções dielétricas dos três meios considerados e ϵ_m a função dielétrica do metal. $2a$ é a largura do guia de ondas e b a distância deste à folha de grafeno de condutividade $\sigma(\omega)$.

Com isto, seguimos para a aplicação das condições fronteira. Começando pela primeira interface, $x = 0$, podemos escrever:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} H_1(0, y) = H_2(0, y) [\cos(\beta y) \Theta(a - |y|) + e^{-\kappa y} \Theta(y - a) + e^{\kappa y} \Theta(-y - a)] dy \quad (5.99)$$

$$\Rightarrow (1 + r) [Aa(1 + \text{sinc}(2\beta a)) + A \cos(\beta a) e^{-\kappa a} / \kappa] = \int_{-\infty}^{+\infty} [H_i(p) + H_s(p)] (f_p + g_p) dp \quad (5.100)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} E_{1y}(0, y) = E_{2y}(0, y) e^{-ipy} dy \quad (5.101)$$

$$\Rightarrow q_1(1 - r) [\gamma_1 f_p + \gamma_m \cos(\beta a) e^{\kappa a} g_p] = 2\pi\gamma_2 q_2 [H_i(p) - H_s(p)] \quad (5.102)$$

tendo sido efetuados os integrais da secção 5.2 para a simplificação das equações anteriores.

Passando para $x = b$, o desenvolvimento e simplificação das equações é igual ao da secção anterior e portanto, relembramos que estas permitem obter

$$\begin{cases} E_{2y}(b, y) = E_{3y}(b, y) \\ H_2(b, y) - H_3(b, y) = \sigma(\omega) E_{3y}(b, y) \end{cases} \quad (5.103)$$

$$\Rightarrow H_s(p) = L e^{2iq_2 b} H_i(p) \quad (5.104)$$

sendo L mais uma vez dado por

$$L \equiv \frac{\epsilon_3 / \epsilon_2 q_2 / q_3 - (1 + \sigma(\omega) \gamma_3 q_3)^{-1}}{\epsilon_3 / \epsilon_2 q_2 / q_3 + (1 + \sigma(\omega) \gamma_3 q_3)^{-1}}. \quad (5.105)$$

Assim, substituímos agora (5.104) em (5.102) e simplificando obtemos

$$H_i(p) = \frac{q_1}{2\pi\gamma_2 q_2} \frac{\gamma_1 f_p + \gamma_m \cos(\beta a) e^{\kappa a} g_p}{1 - L e^{2iq_2 b}} (1 - r). \quad (5.106)$$

Agora, juntamos a equação anterior com (5.104) e (5.100), para finalmente obter uma expressão para o coeficiente de reflexão:

$$r = \frac{\frac{q_1}{2\pi\gamma_2} I_L - a[1 + \text{sinc}(2\beta a)] - \cos(\beta a) e^{-\kappa a} / \kappa}{\frac{q_1}{2\pi\gamma_2} I_L + a[1 + \text{sinc}(2\beta a)] + \cos(\beta a) e^{-\kappa a} / \kappa} \quad (5.107)$$

com

$$I_L = \int_{-\infty}^{+\infty} [f_p + g_p] \frac{1 + L e^{2iq_2 b}}{1 - L e^{2iq_2 b}} \frac{\gamma_1 f_p + \gamma_m \cos(\beta a) e^{\kappa a} g_p}{q_2} dp. \quad (5.108)$$

O coeficiente de transmissão é escrito à custa dos anteriores por meio de

$$t_p = \frac{\epsilon_3 q_2}{\epsilon_2 q_3} e^{iq_2 b} (1 - L) H_i(p). \quad (5.109)$$

Temos então todos os coeficientes determinados e podemos finalmente obter R , T e A :

$$R = |r|^2 \quad (5.110)$$

$$T = \left| \frac{S_x^t}{S_x^i} \right| \quad (5.111)$$

$$A = 1 - R - T \quad (5.112)$$

sendo S_x^t o vetor de Poynting transmitido, dado pela equação (5.16) e S_x^i o vetor de Poynting incidente dado pela equação (5.51).

Na figura 5.16 e no lado esquerdo da figura 5.17 podemos ver a representação destas quantidades físicas como função da energia da radiação. É de notar que os picos presentes nesta última correspondem, tal como no problema anterior, à excitação de plasmões no grafeno, uma vez que dispersam com a energia de Fermi. Além disto, neste caso em que temos duas linhas para dois valores de E_F em que um é o dobro do outro, verifica-se novamente a razão de $\approx \sqrt{2}$ entre as frequências destes máximos. Estas frequências são muito semelhantes às do caso em que o metal é perfeito, uma vez que a função dielétrica do ouro tem valores muito negativos e portanto, comporta-se quase como um metal perfeito.

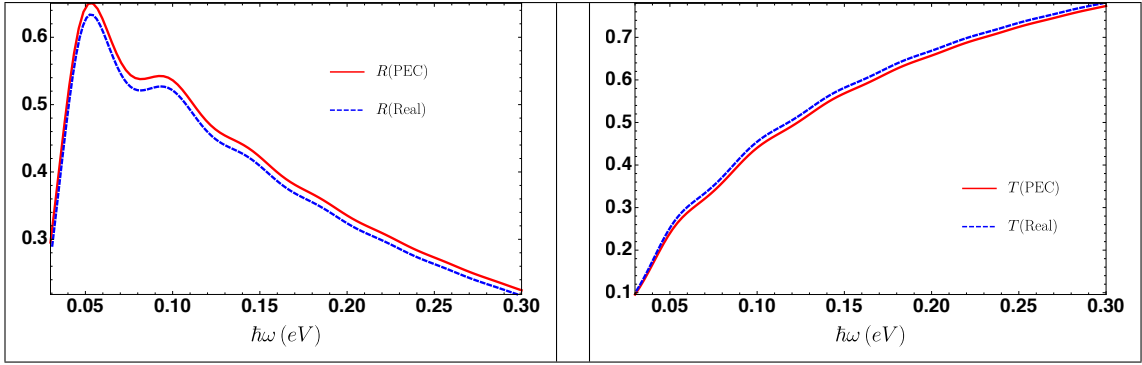


Figura 5.16: Refletância (esquerda) e transmitância (direita) em função da energia da radiação para duas energias de Fermi distintas. As linhas a cheio correspondem às grandezas obtidas no problema em que consideramos o metal perfeito e as linhas tracejado ao caso em que o metal é real. Em ambos os casos temos $\epsilon_1 = 1 = \epsilon_3 = \epsilon_2$, $a = 0.3 \mu\text{m}$, $b = 0.01 \mu\text{m}$, $\hbar\gamma = 0.004 \text{ eV}$ e $E_F = 0.5 \text{ eV}$. ϵ_m corresponde à função dielétrica do ouro que se encontra apresentada no apêndice B.

O lado direito da figura 5.17, que representa a energia dos primeiros máximos de absorção em função da energia de Fermi do grafeno, corrobora esta excitação de SPP's, uma vez que temos novamente uma dependência dos valores de ω com $\sqrt{E_F}$.

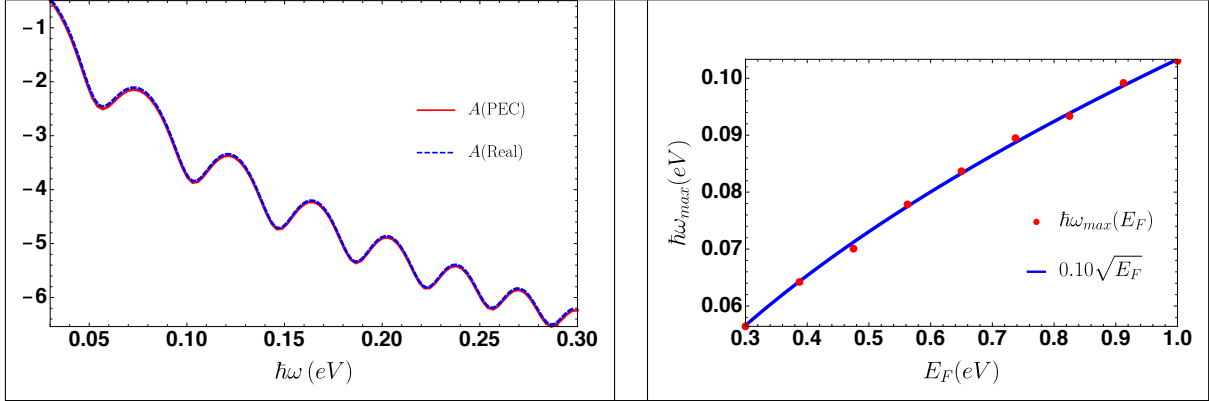


Figura 5.17: Esquerda: absorvância para o caso do metal perfeito (linha a cheio) e do metal real (linha tracejada) em função da energia da radiação para duas energias de Fermi distintas. Direita: valores de $\hbar\omega$ para os quais ocorrem os primeiros picos na absorvância do sistema para diversas energias de Fermi do grafeno. Os pontos a vermelho são determinados numericamente a partir do gráfico de A e a linha azul resulta de um ajuste aos pontos. Os parâmetros considerados são $\epsilon_1 = 1 = \epsilon_3 = \epsilon_2$, $a = 0.3 \mu\text{m}$, $b = 0.01 \mu\text{m}$ e $\hbar\gamma = 0.004 \text{ eV}$. ϵ_m corresponde à função dielétrica do ouro que se encontra apresentada no apêndice B.

Finalmente temos a figura 5.18, na qual podemos observar o perfil dos campos elétricos do sistema. São visíveis as oscilações de intensidade dos mesmos que correspondem aos SPP's no grafeno e, relativamente ao problema do metal perfeito, a única alteração é o facto de agora existirem campos no interior do mesmo.

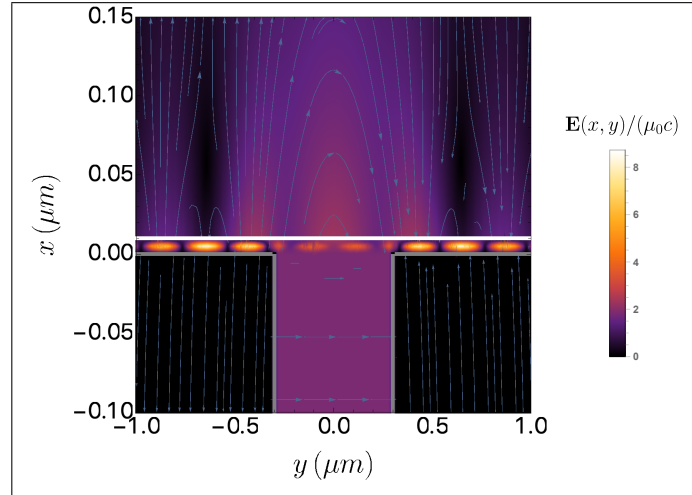


Figura 5.18: Perfil dos campos elétricos plasmónicos nas várias regiões do espaço para $\epsilon_1 = 1 = \epsilon_3 = \epsilon_2$, $a = 0.3 \mu\text{m}$, $b = 0.01 \mu\text{m}$, $\hbar\omega = 0.072 \text{ eV}$, $\hbar\gamma = 0.004 \text{ eV}$ e $E_F = 0.5 \text{ eV}$. ϵ_m corresponde à função dielétrica do ouro que se encontra apresentada no apêndice B. A folha de grafeno é representada pela linha branca e a superfície do metal pelas linhas cinzentas.

5.6 Guia de Ondas Semi-Infinito num Metal Perfeito com uma Folha de Grafeno na base

Nesta secção vamos resolver o problema da difração do modo fundamental do guia de ondas, mas desta vez com uma folha de grafeno à saída do mesmo. Para melhor visualização do sistema podemos olhar para o esquema que se encontra na figura 5.19. Sendo o objetivo deste problema a excitação de plasmões de superfície no grafeno, é necessário considerar que apesar de termos apenas um modo incidente, existem pelo menos dois modos refletidos: o próprio modo incidente ($n = 0$) e os restantes modos pares que se seguem ($n = 2, 4, \dots$). Esta necessidade está relacionada com o facto de neste sistema os modos plasmónicos que surgem no grafeno serem os modos evanescentes da cavidade e o modo fundamental é sempre propagante e como tal, serve apenas como um mecanismo de excitação dos modos que o seguem.

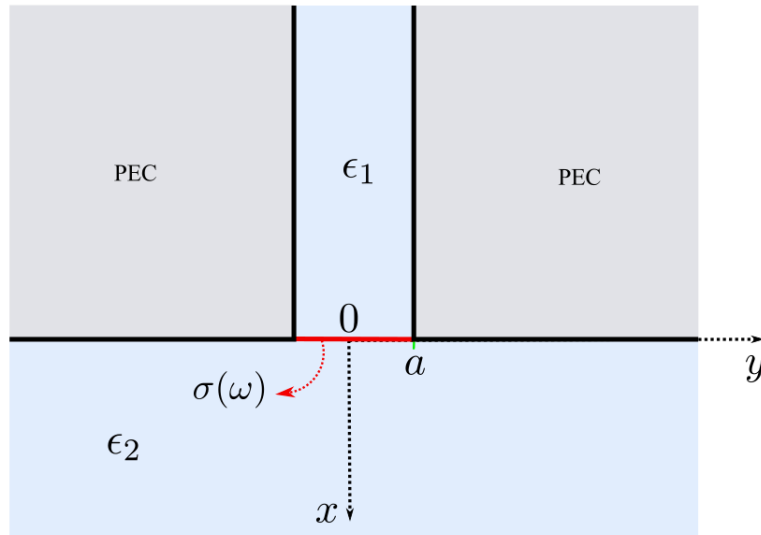


Figura 5.19: Guia de ondas semi-infinito perfurado num metal perfeito (PEC). O eixo z aponta para fora da folha. ϵ_1 e ϵ_2 são as funções dielétricas dos dois meios considerados. $2a$ é a largura do guia de ondas e a folha de grafeno de condutividade $\sigma(\omega)$ é representada pela linha vermelha.

Como tal, os campos elétrico e magnético no interior do guia de ondas são da forma:

$$\left\{ \begin{array}{l} H_1(x, y) = e^{ik_1x} + \sum_{n=0}^{\infty} r_n e^{-i\alpha_n x} \cos(\beta_n(y+a)) \\ E_{1x}(x, y) = -\frac{i\mu_0 c^2}{\omega \epsilon_1} \sum_{n=0}^{\infty} r_n e^{-i\alpha_n x} \beta_n \sin(\beta_n(y+a)) \\ E_{1y}(x, y) = \frac{\mu_0 c^2}{\omega \epsilon_1} [k_1 e^{ik_1x} - \sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n r_n e^{-i\alpha_n x} \cos(\beta_n(y+a))] \end{array} \right. \quad (5.113)$$

onde $\beta_n = \frac{n\pi}{2a}$, $\alpha_n = \sqrt{k_1^2 - \beta_n^2}$ e r_n é a amplitude de reflexão do modo n .

Já no meio 2 voltamos a ter os campos escritos como uma transformada de Fourier

$$\begin{cases} H_2(x, y) = \int_{-\infty}^{\infty} t_p e^{i(qx+py)} dp \\ E_{2x}(x, y) = -\frac{\mu_0 c^2}{\omega \epsilon_2} \int_{-\infty}^{\infty} p t_p e^{i(qx+py)} dp \\ E_{2y}(x, y) = \frac{\mu_0 c^2}{\omega \epsilon_2} \int_{-\infty}^{\infty} q t_p e^{i(qx+py)} dp \end{cases} \quad (5.114)$$

sendo $q = \sqrt{k_2^2 - p^2}$ e t_p a amplitude de transmissão.

Aplicando agora as condições fronteira do problema em $x = 0$ e começando pela continuidade dos campos elétricos tangenciais temos $\int_{-\infty}^{+\infty} [E_{1y}(0, y) = E_{2y}(0, y)] e^{-ipy} dy$, que permite obter uma equação para o coeficiente de transmissão:

$$\Rightarrow t_p = \frac{\epsilon_2 a}{\epsilon_1 \pi q} \left[k_1 \text{sinc}(pa) - \sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n r_n 2iap \frac{e^{-ipa} (-1)^n - e^{ipa}}{4a^2 p^2 - n^2 \pi^2} \right] \quad (5.115)$$

A outra condição fronteira em $x = 0$ para o campo magnético envolve a condutividade do grafeno e fazendo $\int_{-a}^a [H_1(0, y) - H_2(0, y) = \sigma(\omega) E_{1y}(0, y)] dy$ podemos chegar a

$$\Rightarrow 1 + r_0 - \int_{-\infty}^{+\infty} t_p \text{sinc}(pa) dp = \sigma(\omega) \gamma_1 k_1 (1 - r_0). \quad (5.116)$$

onde $\gamma_i = \frac{\mu_0 c^2}{\omega \epsilon_i}$.

Podemos também obter uma equação para r_m ($m \neq 0$) através de

$$\int_{-a}^a [H_1(0, y) - H_2(0, y) = \sigma(\omega) E_{1y}(0, y)] \cos(\beta_m(y+a)) dy \quad (5.117)$$

$$\Rightarrow r_m (1 + \sigma(\omega) \gamma_1 \alpha_m) + \int_{-\infty}^{+\infty} t_p 4iap \frac{e^{ipa} (-1)^m - e^{-ipa}}{4a^2 p^2 - m^2 \pi^2} dp = 0. \quad (5.118)$$

Substituindo a equação (5.115) em (5.116) e em (5.118) ficamos apenas com duas equações para os vários coeficientes de reflexão do problema. Para terminar a resolução do mesmo é necessário especificar os modos da cavidade que estamos interessados em considerar. Assim, começamos por ter em conta apenas os modos $n = 0$ e $n = 2$.

Como tal, ficamos com duas equações para r_0 e para r_2 :

$$\begin{cases} r_0 (1 + \sigma(\omega) \gamma_1 k_1 + \Delta k_1 I_1) + \Delta \alpha_2 r_2 I_2 = k_1 (\Delta I_1 + \sigma(\omega) \gamma_1) - 1 \\ 2\Delta k_1 I_2 r_0 + (1 + \sigma(\omega) \gamma_1 \alpha_2 + 2\Delta a^2 I_3 \alpha_2) r_2 = 2\Delta k_1 I_2 \end{cases} \quad (5.119)$$

onde $\Delta \equiv \frac{\epsilon_2 a}{\epsilon_1 \pi}$ e

$$I_1 = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\text{sinc}^2(pa)}{q} dp \quad (5.120)$$

$$I_2 = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sin^2(pa)}{q(a^2 p^2 - \pi^2)} dp \quad (5.121)$$

$$I_3 = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{p^2 \sin^2(pa)}{q(a^2 p^2 - \pi^2)^2} dp. \quad (5.122)$$

Isolando agora r_2 na segunda equação do sistema anterior

$$r_2 = \frac{2\Delta k_1 I_2 (1 - r_0)}{1 + \sigma(\omega) \gamma_1 \alpha_2 + 2\Delta a^2 \alpha_2 I_3}, \quad (5.123)$$

podemos substituí-lo na primeira para chegar a

$$\Rightarrow r_0 = \frac{\Delta k_1 I_1 + \sigma(\omega) \gamma_1 k_1 - \frac{2\Delta^2 \alpha_2 k_1 I_2^2}{1 + \sigma(\omega) \gamma_1 \alpha_2 + 2\Delta a^2 \alpha_2 I_3} - 1}{\Delta k_1 I_1 + \sigma(\omega) \gamma_1 k_1 - \frac{2\Delta^2 \alpha_2 k_1 I_2^2}{1 + \sigma(\omega) \gamma_1 \alpha_2 + 2\Delta a^2 \alpha_2 I_3} + 1}. \quad (5.124)$$

Temos então os campos definidos em todas as regiões e podemos assim obter a refletância, a transmitância e a absorvância do sistema pelas fórmulas já apresentadas na secção 5.3 para o caso em que consideramos também dois modos.

Com isto, observando agora a figura 5.20, notamos que existe um pico muito bem definido nos gráficos da refletância, transmitância e absorvância para cada energia de Fermi considerada e que, a energia para a qual ocorre este pico é a mesma nas três linhas e varia com E_F . Mais uma vez, analisando estes valores de frequência e fazendo a razão entre elas temos $\approx \sqrt{2}$, o que verifica que estes extremos são devidos à excitação de plasmões de superfície no grafeno com essa energia.

Além disto, estando a folha de grafeno presa em ambas as pontas tal como na secção 4.2, o momento dos plasmões excitados por este sistema é dado por $\frac{n\pi}{2a}$ (momento dos modos do guia de ondas), sendo $2a$ a largura do guia de ondas e n o modo excitado. Isto confirma-se lembrando a relação entre o momento do plasmão e a sua energia,

$$\hbar\omega = \sqrt{\frac{4\alpha c E_F}{\epsilon_1 + \epsilon_2}} \hbar \mathfrak{R}(q) \quad (5.125)$$

para o caso de uma folha de grafeno isolada (que é uma aproximação válida neste caso, uma vez que não existe metal nem acima nem abaixo da folha, apenas meios dielétricos). Substituindo $q = \pi/a$ e tendo em conta que consideramos $\epsilon_1 = 1 = \epsilon_2$, $E_F = 0.5$ eV e $a = 0.3$ μm temos

$$\sqrt{4\alpha \hbar c E_F \pi / a} \approx 0.124 \text{ eV} \quad (5.126)$$

que é aproximadamente o valor de $\hbar\omega$ para o qual ocorre o máximo de A e os mínimos de R e T , $\hbar\omega = 0.126$ eV.

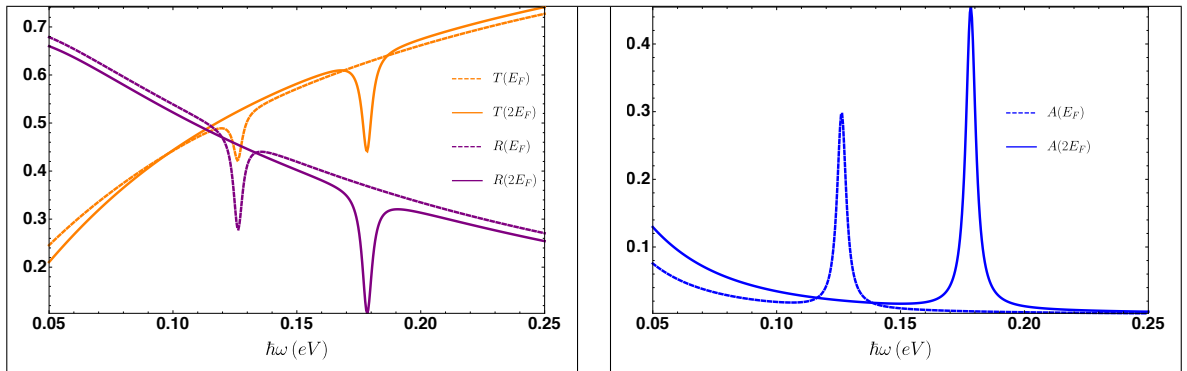


Figura 5.20: Esquerda: refletância e transmitância em função da energia da radiação para duas energias de Fermi distintas. Direita: absorvância em função da energia da radiação para duas energias de Fermi distintas. Em ambos os casos temos $\epsilon_1 = 1 = \epsilon_2$, $a = 0.3$ μm , $\hbar\gamma = 0.004$ eV e $E_F = 0.5$ eV.

Assim, vemos que este sistema excita o modo plasmônico $n = 2$, cujo momento é π/a e a energia vai depender da energia de Fermi considerada, como é verificado na figura 5.21, pois as energias dos picos da absorvância variam proporcionalmente com $\sqrt{E_F}$, como mostra o ajuste numérico feito a estes pontos.

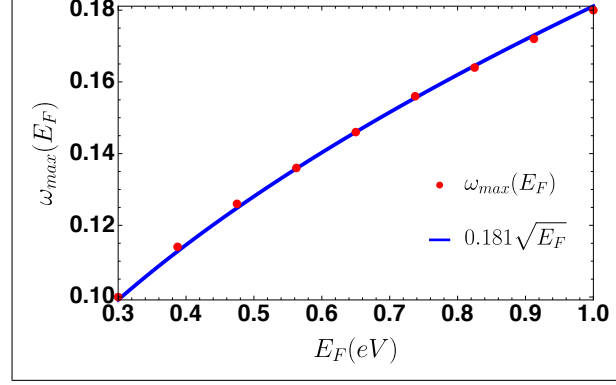


Figura 5.21: Valores de $\hbar\omega$ para os quais ocorrem os picos na absorvância do sistema para diversas energias de Fermi do grafeno. Os pontos a vermelho são determinados numericamente a partir do gráfico de A e a linha azul resulta de um ajuste aos pontos. Os parâmetros considerados são $\epsilon_1 = 1 = \epsilon_2$, $a = 0.3 \mu\text{m}$ e $\hbar\gamma = 0.004 \text{ eV}$.

Se por outro lado considerarmos três modos em vez de dois, obtemos um sistema de três equações para os coeficientes de reflexão:

$$\begin{cases} r_0(1 + \sigma(\omega)\gamma_1 k_1 + \Delta k_1 I_1) + \Delta\alpha_2 r_2 I_2 + \Delta\alpha_4 r_4 I_4 = k_1(\Delta I_1 + \sigma(\omega)\gamma_1) - 1 \\ 2\Delta k_1 I_2 r_0 + (1 + \sigma(\omega)\gamma_1 \alpha_2 + 2\Delta a^2 I_3 \alpha_2) r_2 + 2\Delta a^2 I_5 \alpha_4 r_4 = 2\Delta k_1 I_2 \\ 2\Delta k_1 I_4 r_0 + 2\Delta a^2 I_5 \alpha_2 r_2 + (1 + \sigma(\omega)\gamma_1 \alpha_4 + 2\Delta a^2 I_6 \alpha_4) r_4 = 2\Delta k_1 I_4 \end{cases} \quad (5.127)$$

com

$$I_4 = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sin^2(pa)}{q(a^2 p^2 - 4\pi^2)} dp \quad (5.128)$$

$$I_5 = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{p^2 \sin^2(pa)}{q(a^2 p^2 - 4\pi^2)(a^2 p^2 - \pi^2)} dp \quad (5.129)$$

$$I_6 = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{p^2 \sin^2(pa)}{q(a^2 p^2 - 4\pi^2)^2} dp. \quad (5.130)$$

Sendo este sistema um pouco complexo, resolvêmo-lo numericamente, para obter os três coeficientes, cuja expressão é demasiada extensa para escrever no presente trabalho, e que nos permitem definir completamente os campos. Tendo considerado mais um modo eletromagnético, a equação para a refletância do sistema volta a ser alterada em função da equação (5.87), que define o vetor de Poynting refletido, e toma a forma:

$$R = |r_0|^2 + \frac{1}{2} \Re \left[\frac{\alpha_2}{k_1} \right] |r_2|^2 + \frac{1}{2} \Re \left[\frac{\alpha_4}{k_1} \right] |r_4|^2. \quad (5.131)$$

Representado então graficamente R , T e A , podemos observar na figura 5.22 que, em relação à figura 5.20 que era para o caso em que apenas consideramos dois modos, temos mais um pico para cada energia

de Fermi, o que indica a excitação de dois plasmões de energias distintas. O quociente entre as frequências dos novos picos correspondentes a valores diferentes de E_F é também $\approx \sqrt{2}$ pela mesma razão já explicada.

Assim, o número de plasmões que podemos excitar para uma certa energia de Fermi, é menos um que o número de modos que consideramos na cavidade e cada SPP tem o seu momento e a sua frequência relacionados pela relação de dispersão (5.125). Neste último caso, temos então para $E_F = 0.5$ eV, um plasmão com momento π/a ($n = 2$) com uma energia de 0.126 eV e outro com momento $2\pi/a$ ($n = 4$) para $\hbar\omega = 0.176$ eV.

Além disto, vemos também que a frequência do pico $n = 4$ para $E_F = 0.5$ eV é muito próxima da do pico $n = 2$ para $E_F = 1$ eV, pois temos o dobro da energia de Fermi mas metade do momento, o que mais uma vez está de acordo com a equação (5.125).

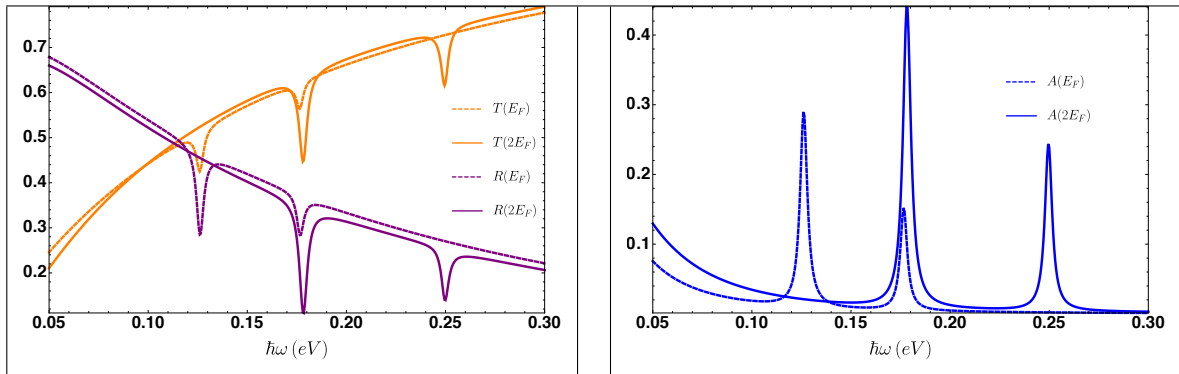


Figura 5.22: Esquerda: refletância e transmitância em função da energia da radiação para duas energias de Fermi distintas. Direita: absorvância em função da energia da radiação para duas energias de Fermi distintas. Em ambos os casos temos $\epsilon_1 = 1 = \epsilon_2$, $a = 0.3 \mu m$, $\hbar\gamma = 0.004$ eV e $E_F = 0.5$ eV.

Passando para a figura 5.23, temos uma representação espacial do perfil dos campos elétricos, onde pelo sentido das linhas de campo e pelos máximos e mínimos de intensidade podemos ver que existe uma alternância entre cargas positivas e negativas na superfície do grafeno que representam os nossos plasmões. É possível reparar que o campo no interior do guia de ondas é mais intenso no caso representado à direita, pois nesse caso consideramos os três modos próprios.

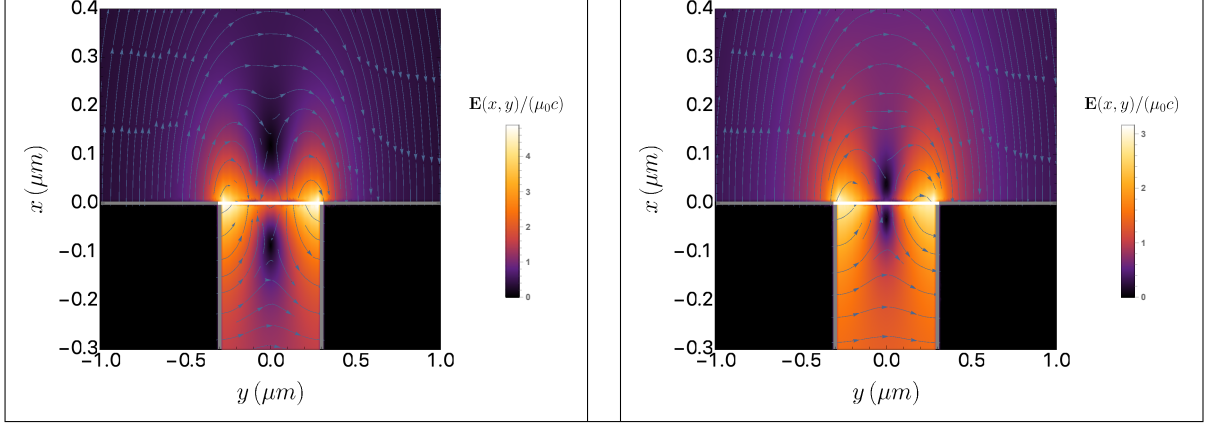


Figura 5.23: Perfil dos campos elétricos nas várias regiões do espaço para $\epsilon_1 = 1 = \epsilon_2$, $a = 0.3 \mu m$, $\hbar\omega = 0.126 \text{ eV}$, $\hbar\gamma = 0.004 \text{ eV}$ e $E_F = 0.5 \text{ eV}$. A folha de grafeno é representada pela linha branca e a superfície do metal pelas linhas cinzentas. A figura da esquerda corresponde à consideração de dois modos e a da direita de três modos.

Para finalizar o estudo deste sistema, pretendemos obter os seus modos plasmônicos de forma a entender melhor a excitação dos SPP's. Para tal, é necessário escrever os campos evanescentes em ambas as regiões do espaço.

Começando pelo meio 1 é preciso notar que o modo fundamental $n = 0$ não contribui pois é sempre propagante. Assim sendo, temos

$$\begin{cases} H_1(x, y) = \sum_{n=1} r_n e^{\alpha_n x} \cos(\beta_n(y+a)) \Theta(a-|y|) \\ E_{1x}(x, y) = -i\gamma_1 \sum_{n=1} r_n e^{\alpha_n x} \beta_n \sin(\beta_n(y+a)) \Theta(a-|y|) \\ E_{1y}(x, y) = -i\gamma_1 \sum_{n=1} \alpha_n r_n e^{\alpha_n x} \cos(\beta_n(y+a)) \Theta(a-|y|) \end{cases} \quad (5.132)$$

onde temos $\alpha_n = \sqrt{\beta_n^2 - k_1^2}$ e $\beta_n = \frac{n\pi}{2a}$.

Para o meio 2 temos agora

$$\begin{cases} H_2(x, y) = 2 \int_{k_2}^{+\infty} t_p e^{-qx} \cos(py) dp \\ E_{2x}(x, y) = -2i\gamma_2 \int_{k_2}^{+\infty} p t_p e^{-qx} \sin(py) dp \\ E_{2y}(x, y) = 2i\gamma_2 \int_{k_2}^{+\infty} q t_p e^{-qx} \cos(py) dp \end{cases} \quad (5.133)$$

com $q = \sqrt{p^2 - k_2^2}$.

Passando para as condições fronteira do problema, temos a continuidade dos campos elétricos tangenciais, $E_{1y}(0, y) = E_{2y}(0, y)$, que permite escrever

$$-\gamma_1 \sum_{n=1} \alpha_n r_n \cos(\beta_n(y+a)) \Theta(a-|y|) = 2\gamma_2 \int_{k_2}^{+\infty} q t_p \cos(py) dp \quad (5.134)$$

e fazendo $\int_{-\infty}^{+\infty} (5.134) \cos(Py) dy$ obtemos

$$\Rightarrow t_p = \sum_{n' \text{ s pares}} \frac{-4a^2 \epsilon_2 \alpha_n r_n p \sin(pa)}{\epsilon_1 (4p^2 a^2 - n^2 \pi^2) \pi q}, \quad p > k_2. \quad (5.135)$$

A outra condição é a descontinuidade dos campos magnéticos tangenciais, $H_1(0, y) - H_2(0, y) = \sigma(\omega) E_{1y}(0, y)$, que dá origem a

$$\sum_{n=1} r_n \cos(\beta_n(y+a)) \Theta(a-|y|) - 2 \int_{k_2}^{+\infty} t_p \cos(py) dp = -\sigma(\omega) i \gamma_1 \sum_{n=1} \alpha_n r_n \cos(\beta_n(y+a)) \Theta(a-|y|) \quad (5.136)$$

que integrando, $\int_{-a}^a (5.136) \cos(\beta_m(y+a)) dy$, permite obter

$$\Rightarrow r_m (1 + i \gamma_1 \sigma(\omega) \alpha_m) = 16 \int_{k_2}^{+\infty} t_p \frac{pa \sin(pa) \cos^2(m\pi/2)}{4a^2 p^2 - \pi^2 m^2} dp. \quad (5.137)$$

Podemos agora substituir a equação (5.135) na anterior para chegar a

$$r_m = \sum_{n' \text{ s pares}} \frac{-64a^3 \epsilon_2 \alpha_n r_n}{\pi \epsilon_1 (1 + i \gamma_1 \sigma(\omega) \alpha_m)} I_{m,n} \quad (5.138)$$

com

$$I_{m,n} = \int_{k_2}^{+\infty} \frac{p^2 \sin^2(pa)}{q(4a^2 p^2 - \pi^2 m^2)(4a^2 p^2 - \pi^2 n^2)} dp. \quad (5.139)$$

Se considerarmos apenas os dois primeiros modos pares obtemos um sistema de duas equações linear e homogêneo para os coeficientes r_2 e r_4 ,

$$r_2 = \frac{-64a^3 \epsilon_2}{\pi \epsilon_1 (1 + i \gamma_1 \sigma(\omega) \alpha_2)} (\alpha_2 r_2 I_{2,2} + \alpha_4 r_4 I_{2,4}) \quad (5.140)$$

$$r_4 = \frac{-64a^3 \epsilon_2}{\pi \epsilon_1 (1 + i \gamma_1 \sigma(\omega) \alpha_4)} (\alpha_2 r_2 I_{4,2} + \alpha_4 r_4 I_{4,4}) \quad (5.141)$$

que nos permite chegar à equação que nos dá as energias dos modos:

$$\Rightarrow \left[1 + \frac{64a^3 \epsilon_2 \alpha_2 I_{2,2}}{\pi \epsilon_1 (1 + i \gamma_1 \sigma(\omega) \alpha_2)} \right] \left[1 + \frac{64a^3 \epsilon_2 \alpha_4 I_{4,4}}{\pi \epsilon_1 (1 + i \gamma_1 \sigma(\omega) \alpha_4)} \right] - \frac{64^2 a^6 \epsilon_2^2 \alpha_2 \alpha_4 I_{2,4}^2}{\pi^2 \epsilon_1^2 (1 + i \gamma_1 \sigma(\omega) \alpha_2) (1 + i \gamma_1 \sigma(\omega) \alpha_4)} = 0, \quad (5.142)$$

sendo que estas coincidem precisamente com as energias dos extremos de R , T e A , para o problema de espalhamento em que consideramos três modos na cavidade, e conseqüentemente, com as energias dos plasmões de momentos π/a e $2\pi/a$.

Além disto, derivando a equação dos modos evanescentes através do mesmo procedimento mas considerando apenas o modo $n = 2$, ficamos com

$$1 + \frac{64a^3 \epsilon_2 \alpha_2 I_{2,2}}{\pi \epsilon_1 (1 + i \gamma_1 \sigma(\omega) \alpha_2)} = 0 \quad (5.143)$$

que nos permite obter a energia do máximo da absorvância do caso em que consideramos apenas dois modos no guia de ondas.

Na figura 5.24, podemos ver o perfil dos modos evanescentes do problema, para o caso em que consideramos os modos $n = 2$ e $n = 4$, que se concentram em torno da folha de grafeno e que são excitados pela incidência do modo fundamental do guia de ondas.

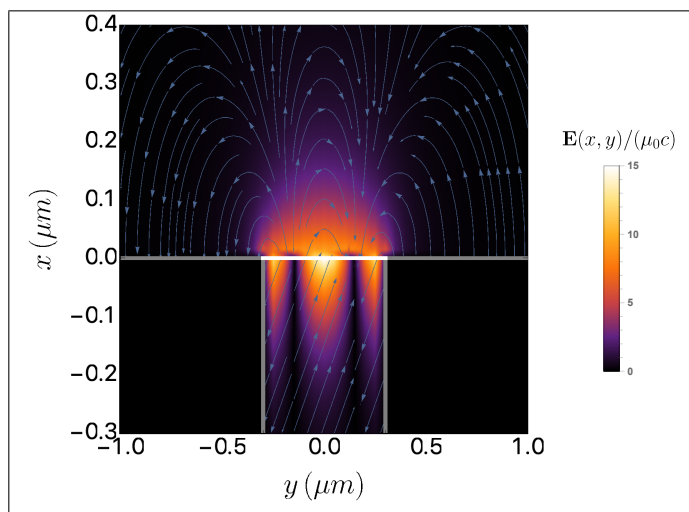


Figura 5.24: Perfil dos campos elétricos plasmônicos nas várias regiões do espaço para $\epsilon_1 = 1 = \epsilon_2$, $a = 0.3 \mu m$, $\hbar\omega = 0.126 \text{ eV}$, $\hbar\gamma = 0.004 \text{ eV}$ e $E_F = 0.5 \text{ eV}$. A folha de grafeno é representada pela linha branca e a superfície do metal pelas linhas cinzentas.

Assim, temos um sistema em que a partir da incidência do modo $n = 0$ da cavidade (que para frequências abaixo de $\frac{c\pi}{2a\sqrt{\epsilon_1}}$ é o único propagante), conseguimos excitar os seus modos evanescentes dando origem a SPP's no grafeno com momento igual ao momento destes modos, $\frac{n\pi}{2a}$.

6

Conclusão

Neste capítulo, fazemos uma breve revisão dos principais resultados obtidos ao longo do trabalho. Estudamos dois sistemas que permitem a excitação de plasmões polaritões de superfície no grafeno: o primeiro foi no capítulo 4, onde consideramos o espalhamento de um pacote de ondas numa abertura metálica finita e o segundo foi no capítulo 5, no qual consideramos a difração do modo fundamental de um guia de ondas semi-infinito.

Assim, no primeiro problema, começamos por explorar os modos fundamentais da cavidade e por estudar a difração do pacote de ondas através da mesma, na ausência de grafeno. Efetuamos um estudo das propriedades óticas do sistema em função da frequência do pacote de ondas incidente e das propriedades geométricas da abertura metálica. Verificou-se que aumentando a energia da radiação incidente existe um aumento da transmitância e uma diminuição da refletância, o que pode ser explicado pela diminuição da largura do pacote de ondas com o aumento da frequência. Além disto, verificamos que estas grandezas oscilam com um período de $\lambda/2$ quando representadas em função do comprimento d da abertura. Em seguida, colocamos uma folha de grafeno na base da abertura e efetuamos o mesmo estudo. Foi possível observar o surgimento de picos estreitos no espectro da absorvância, que foram identificados como a excitação de plasmões na superfície do grafeno. Estes SPP's apresentam momento dado $\frac{n\pi}{2a}$ ($n \neq 0$), que são os modos permitidos na cavidade, uma vez que a folha se encontra presa às paredes metálicas. Por simetria do sistema, apenas são suportados modos com n par. A energia destas quasi-partículas é então obtida a partir do seu momento, por meio da relação de dispersão dos plasmões de uma folha de grafeno inserida entre dois meios dielétricos. Assim, a difração do pacote de ondas na abertura excita SPP's com momento determinado pelos modos da cavidade e frequência dependente da energia de Fermi do grafeno. Acrescentando uma folha de grafeno no topo da abertura, alteramos a natureza do sistema, que passa a suportar dois tipos de modos plasmônicos: os óticos, de maior energia e os acústicos de menor. Neste caso, para cada momento possível dos plasmões, passam a existir duas energias disponíveis. Se as folhas de grafeno apresentarem o mesmo valor de E_F , têm então a mesma condutividade ótica e consequentemente, vimos que devido à simetria da componente tangencial do campo elétrico, apenas é possível excitar os modos óticos, que são simétricos para folhas com valores de condutividade idênticos. Caso as folhas de grafeno tenham energias de Fermi diferentes, perde-se a simetria tanto dos campos elétricos como dos modos óticos e acústicos. Dessa forma, o pacote de ondas incidente é capaz de excitar

tanto modos óticos como modos acústicos no sistema. Vimos também que no caso em que as camadas têm a mesma condutividade, ambas atuam como uma só camada de energia de Fermi superior, deslocando os máximos plasmônicos da absorvância para frequências maiores e aumentando a intensidade dos mesmos. Para finalizar este capítulo, estudámos o sistema em que a folha de grafeno se encontra afastada da abertura. Neste problema voltamos a observar picos de natureza plasmônica que surgiram no espectro da absorvância. Verificámos que para as curvas $A(E_F)$ e $A(2E_F)$, a relação entre as frequências dos máximos é aproximadamente $\sqrt{2}$, o que está de acordo com a dependência da energia dos plasmões com $\sqrt{E_F}$. Sendo a folha de grafeno infinita e não estando presa nas paredes da estrutura metálica não temos uma expressão analítica para o momento dos SPP's, mas sabemos que é inversamente proporcional à largura da fenda, uma vez que representando graficamente a absorvância em função do parâmetro a surgem múltiplos picos que dispersam com a energia de Fermi considerada no grafeno.

No capítulo 5, começámos por estudar o espalhamento do modo fundamental do guia de ondas na ausência de grafeno. Primeiro considerámos que o metal que envolve o guia de ondas era perfeito e em seguida, considerámo-lo real. Em ambos os casos observamos um aumento da transmitância e uma consequente diminuição da refletância com o aumento da energia da onda incidente, o que seria de esperar, uma vez que a largura da cavidade está fixa, mas considerámos comprimentos de onda cada vez menores. Vimos também que no caso do metal real a transmitância é sempre superior e a refletância é sempre inferior ao caso do metal perfeito. Isto deve-se ao facto de no primeiro, os campos eletromagnéticos também se propagarem no interior do metal, o que proporciona uma maior área de transferência de energia entre os dois meios. Posteriormente, considerámos o problema em que a folha de grafeno está afastada do metal. Neste, tal como no problema do capítulo anterior com a folha afastada, voltam a surgir picos plasmônicos no espectro da absorvância que são explicados da mesma forma. Resolvemos também este problema tendo em consideração o modo $n = 2$ do guia de ondas. Nesse caso assistimos ao surgimento de um pico extra no espectro da absorvância, mais estreito que os restantes, cuja natureza é semelhante aos máximos de A no caso em que a folha de grafeno se encontra colada à abertura. Representando o perfil dos campos elétricos para a energia desse pico e para a energia de um pico mais largo, concluímos que o primeiro corresponde a plasmões que se formam principalmente na região do grafeno imediatamente acima da abertura, enquanto que o segundo corresponde a plasmões que se formam na região entre o metal e o grafeno. Além disto, calculámos também a densidade de probabilidade espacial de excitação de plasmões na folha de grafeno (para o problema resolvido com um só modo da cavidade) e verificámos uma correspondência entre a energia dos picos do espectro desta probabilidade e a energia dos picos do espectro da absorvância. Seguidamente, considerámos o mesmo problema, mas para o metal real. Os resultados obtidos foram muito semelhantes à aproximação do metal perfeito, uma vez que a função dielétrica utilizada para caracterizar o metal tem valores muito negativos e, portanto, este comporta-se quase como um metal perfeito. Finalmente, estudámos o problema do guia de ondas com a folha de grafeno na base. Verificámos que, tal como no caso da abertura com a folha de grafeno na base, os momentos permitidos aos plasmões são $\frac{n\pi}{2a}$ e os resultados obtidos são por isso muito semelhantes, ou seja, os máximos da absorvância têm a mesma forma e ocorrem para as mesmas frequências nos dois sistemas.

Em síntese, vimos então múltiplos sistemas capazes de excitar SPP's em folhas de grafeno, por meio da difração de radiação eletromagnética. De todos eles, o mais eficiente é o guia de ondas com a folha de grafeno colada, pois para as mesmas energias de radiação incidente, é o sistema mais absorvente. No

entanto, o sistema da abertura finita consegue também ser muito eficaz se cobrirmos a cavidade com duas folhas de grafeno, pois nesse caso funciona como se tivesse uma só folha com maior energia de Fermi, o que aumenta a absorção de energia.

Apêndices

A

Relações de Ortogonalidade entre Modos Plasmônicos e Radiativos

Neste apêndice fazemos uma derivação das relações de ortogonalidade entre os campos eletromagnéticos plasmônicos e os campos radiativos, utilizada na secção 5.4 para o cálculo do coeficiente $\alpha(y)$.

Para iniciar a derivação destas relações começamos por pegar na equação de Ampère-Maxwell e multiplicamo-la por \mathbf{E}_ν , onde o índice ν indica se é um modo radiativo ou plasmônico:

$$\mathbf{E}_\nu \cdot \nabla \times \mathbf{H}_\mu = -i\omega\epsilon_0\epsilon\mathbf{E}_\nu \cdot \mathbf{E}_\mu. \quad (\text{A.1})$$

Em seguida, fazemos o mesmo para a equação da lei de indução de Faraday mas multiplicamos agora por \mathbf{H}_μ :

$$\mathbf{H}_\mu \cdot \nabla \times \mathbf{E}_\nu = i\omega\mu_0\mathbf{H}_\mu \cdot \mathbf{H}_\nu. \quad (\text{A.2})$$

Subtraindo as duas equações ficamos com:

$$\mathbf{E}_\nu \cdot \nabla \times \mathbf{H}_\mu - \mathbf{H}_\mu \cdot \nabla \times \mathbf{E}_\nu = -i\omega\epsilon_0\epsilon\mathbf{E}_\nu \cdot \mathbf{E}_\mu - i\omega\mu_0\mathbf{H}_\mu \cdot \mathbf{H}_\nu \quad (\text{A.3})$$

$$\Leftrightarrow \nabla \cdot (\mathbf{E}_\nu \times \mathbf{H}_\mu) = i\omega(\epsilon_0\epsilon\mathbf{E}_\nu \cdot \mathbf{E}_\mu + \mu_0\mathbf{H}_\mu \cdot \mathbf{H}_\nu). \quad (\text{A.4})$$

Trocando os índices μ e ν na equação anterior e subtraíndo a nova equação à anterior ficamos com

$$\nabla \cdot (\mathbf{E}_\nu \times \mathbf{H}_\mu - \mathbf{E}_\mu \times \mathbf{H}_\nu) = 0. \quad (\text{A.5})$$

Separando o operador ∇ nas suas componentes transversal e longitudinal à interface do grafeno (ver figura 5.8), isto é, $\nabla = \nabla_t + \hat{\mathbf{u}}_y \partial_y$ e relembrando a dependência dos modos na coordenada y , $\mathbf{E}_\mu = \mathbf{E}_{0\mu} e^{iq_\mu y}$ e $\mathbf{H}_\mu = \mathbf{H}_{0\mu} e^{iq_\mu y}$, obtemos:

$$\nabla \cdot (\mathbf{E}_\nu \times \mathbf{H}_\mu - \mathbf{E}_\mu \times \mathbf{H}_\nu) = [\nabla_t \cdot + i(q_\mu + q_\nu)\hat{\mathbf{u}}_y \cdot](\mathbf{E}_{0\nu} \times \mathbf{H}_{0\mu} - \mathbf{E}_{0\mu} \times \mathbf{H}_{0\nu}) e^{i(q_\mu + q_\nu)y}. \quad (\text{A.6})$$

Fazemos agora a integração da equação anterior na direção x :

$$\int dx [\hat{\mathbf{u}}_x \cdot \partial_x + i(q_\mu + q_\nu)\hat{\mathbf{u}}_y \cdot](\mathbf{E}_{0\nu} \times \mathbf{H}_{0\mu} - \mathbf{E}_{0\mu} \times \mathbf{H}_{0\nu}) = 0. \quad (\text{A.7})$$

O primeiro integral é nulo pois os campos são nulos no infinito e portanto temos

$$\int dx \hat{\mathbf{u}}_y \cdot (\mathbf{E}_{0\nu} \times \mathbf{H}_{0\mu} - \mathbf{E}_{0\mu} \times \mathbf{H}_{0\nu}) = 0, \quad q_\mu + q_\nu \neq 0 \quad (\text{A.8})$$

Voltando agora à equação (A.6), substituímos ν por $\bar{\nu}$, onde este último se refere a campos que se propagam no sentido oposto dos primeiros (campos refletidos), ou seja, temos $\mathbf{E}_{\bar{\mu}} = \mathbf{E}_{0\bar{\mu}} e^{-iq_\mu y}$ e $\mathbf{H}_{\bar{\mu}} = \mathbf{H}_{0\bar{\mu}} e^{-iq_\mu y}$ e portanto,

$$\nabla \cdot (\mathbf{E}_{\bar{\nu}} \times \mathbf{H}_\mu - \mathbf{E}_\mu \times \mathbf{H}_{\bar{\nu}}) = [\nabla_t \cdot + i(q_\mu - q_{\bar{\nu}}) \hat{\mathbf{u}}_y \cdot] (\mathbf{E}_{0\bar{\nu}} \times \mathbf{H}_{0\mu} - \mathbf{E}_{0\mu} \times \mathbf{H}_{0\bar{\nu}}) e^{i(q_\mu - q_{\bar{\nu}})y}. \quad (\text{A.9})$$

Fazendo a mesma integração que no caso acima chegamos a:

$$\int dx \hat{\mathbf{u}}_y \cdot (\mathbf{E}_{0\bar{\nu}} \times \mathbf{H}_{0\mu} - \mathbf{E}_{0\mu} \times \mathbf{H}_{0\bar{\nu}}) = 0, \quad q_\mu - q_{\bar{\nu}} \neq 0 \quad (\text{A.10})$$

e estando a tratar de modos TM temos $\mathbf{E}_{0\bar{\nu}} = \mathbf{E}_{0\nu}$ e $\mathbf{H}_{0\bar{\nu}} = -\mathbf{H}_{0\nu}$, o que permite obter

$$\int dx \hat{\mathbf{u}}_y \cdot (\mathbf{E}_{0\nu} \times \mathbf{H}_{0\mu} + \mathbf{E}_{0\mu} \times \mathbf{H}_{0\nu}) = 0. \quad (\text{A.11})$$

Somando então as equações (A.8) e (A.11) ficamos com:

$$\int dx \hat{\mathbf{u}}_y \cdot (\mathbf{E}_{0\nu} \times \mathbf{H}_{0\mu}) = 0 \quad (\text{A.12})$$

que no problema do capítulo referido toma a forma específica:

$$\int dx E_{0\nu}^x H_{0\mu}^z = 0. \quad (\text{A.13})$$

B

Função Dielétrica do Ouro

Neste apêndice apresentamos a função dielétrica [59, 60] do ouro utilizada ao longo do trabalho nos problemas que envolveram a consideração de um metal real.

A sua fórmula é:

$$\epsilon_{Au}(\lambda) = \epsilon_{\infty} - \frac{1}{\lambda_p^2(1/\lambda^2 + i/(\gamma_p\lambda))} + \sum_{j=1}^2 \frac{A_j}{\lambda_j} \left(\frac{e^{i\phi_j}}{1/\lambda_j - 1/\lambda - i/\gamma_j} + \frac{e^{-i\phi_j}}{1/\lambda_j + 1/\lambda + i/\gamma_j} \right) \quad (\text{B.1})$$

onde $\epsilon_{\infty} = 1.53$, $\lambda_p = 145$ nm, $A_j = (0.94, 1.36)$, $\phi_j = -\pi/4$, $\lambda_j = (468, 331)$ nm, $\gamma_j = (2300, 940)$ nm e $\gamma_p = 17000$ nm.

Podemos ver uma representação gráfica da mesma na gama de frequências considerada nos problemas das seccções 5.2 e 5.5 na figura B.1. Nestas seccções a função dielétrica do metal real considerado é $\epsilon_m = \Re(\epsilon_{Au})$.

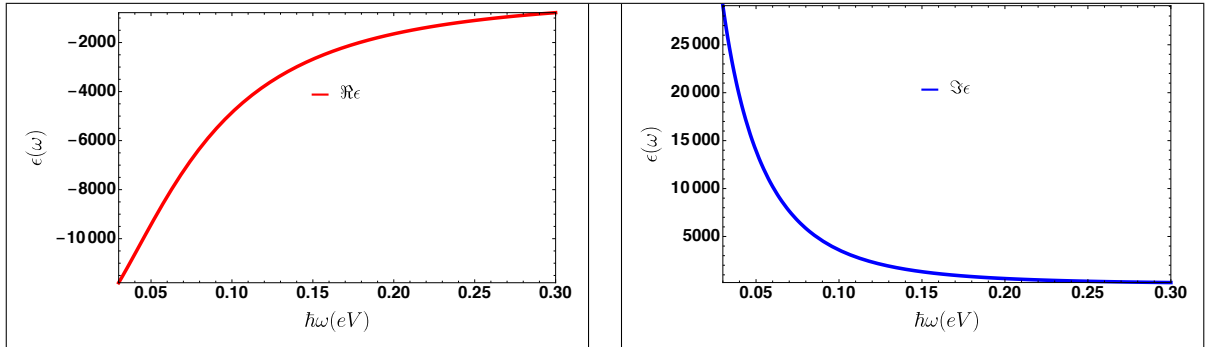


Figura B.1: Função dielétrica do ouro utilizada no presente trabalho em função da energia da luz. O painel esquerdo corresponde à parte real desta função e o direito à parte imaginária.

Bibliografia

- [1] Soo H. Kang, Hyo J. Eom and Tah J. Park, *TM-Scattering from a Slit in a Thick Conducting Screen: Revisited*, IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques **41**, 895 (1993)
- [2] V. M. Serdyuk, *Diffraction of a Plane Electromagnetic Wave by a Slot in a Conducting Screen of Arbitrary Thickness*, Technical Physics **50**, 1076 (2005)
- [3] F. L. Neerhoff and G. Mur, *Diffraction of a plane electromagnetic wave by a slit in a thick screen placed between two different media*, App. Sci. Res. **28**, 73 (1973)
- [4] Kohei Hongo and Gihei Ishii, *Diffraction of an Electromagnetic Plane Wave by a Thick Slit*, IEEE Transactions on Antennas and Propagation **26**, 494 (1978)
- [5] Tah J. Park, Hyo J. Eom and Kuniaki Yoshitomi, *An analytic solution for transverse magnetic scattering from a rectangular channel in a conducting plane*, Journal of Applied Physics **73**, 3571 (1993)
- [6] Tah J. Park, Soo H. Kang and Hyo J. Eom, *TE Scattering from a Slit in a Thick Conducting Screen: Revisited*, IEEE Transactions on Antennas and Propagation **42**, 112 (1994)
- [7] O. Mata Mendez, M. Cadilhac and R. Petit, *Diffraction of a two-dimensional electromagnetic beam wave by a thick slit pierced in a perfectly conducting screen*, J. Opt. Soc. Am. **73**, 328 (1983)
- [8] Abdulaziz H. Haddab and Edward F. Kuester, *Extraordinary Transmission Through a Single Dielectric-Loaded Slot in a Thick Metallic Shield*, IEEE Transactions on Antennas and Propagation **66**, 1846 (2018)
- [9] David T. Auckland and Roger F. Harrington, *Electromagnetic Transmission Through a Filled Slit in a Conducting Plane of Finite Thickness, TE Case*, IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques **26**, 499 (1978)
- [10] Satish C. Kashyap and M. A. K. Hamid, *Diffraction Characteristics of a Slit in a Thick Conducting Screen*, IEEE Transactions on Antennas and Propagation **19**, 499 (1971)
- [11] C J Bouwkamp, *Diffraction Theory*, Rep. Prog. Phys. **17**, 35 (1954)
- [12] H. A. Bethe, *Theory of Diffraction by Small Holes*, Physical Review **66**, 163 (1944)
- [13] Shih-Hui Chang and Yu-Lun Su, *Mapping of transmission spectrum between plasmonic and nonplasmonic single slits. II: nonresonant transmission*, J. Opt. Soc. Am. B **32**, 45 (2015)

- [14] Shih-Hui Chang and Yu-Lun Su, *Mapping of transmission spectrum between plasmonic and nonplasmonic single slits. I: resonant transmission*, J. Opt. Soc. Am. B **32**, 38 (2015)
- [15] Reuven Gordon, *Light in a subwavelength slit in a metal: Propagation and reflection*, Physical Review B **73**, 153405 (2006)
- [16] Y. Takakura, *Optical Resonance in a Narrow Slit in a Thick Metallic Screen*, Physical Review Letters **86**, 5601 (2001)
- [17] A. I. Fernández-Domínguez, F. J. García-Vidal, and L. Martín-Moreno, *Resonant transmission of light through finite arrays of slits*, Physical Review B **76**, 235430 (2007)
- [18] T. W. Ebbesen, H. J. Lezec, H. F. Ghaemi, T. Thio and P. A. Wolff, *Extraordinary optical transmission through sub-wavelength hole arrays*, Nature **391**, 667 (1998)
- [19] C. Genet and T. W. Ebbesen, *Light in tiny holes*, Nature **445**, 39 (2007)
- [20] J. Bravo-Abad, L. Martín-Moreno and F. J. García-Vidal, *Transmission properties of a single metallic slit: From the subwavelength regime to the geometrical-optics limit*, Physical Review E **69**, 026601 (2004)
- [21] Fuzi Yang and J. R. Sambles, *Resonant Transmission of Microwaves through a Narrow Metallic Slit*, Physical Review Letters **89**, 063901 (2002)
- [22] Jing-Wei Li, Jian-Shiung Hong, Wei-Ting Chou, Ding-Jie Huang and Kuan-Ren Chen, *Light Funneling Profile During Enhanced Transmission Through a Subwavelength Metallic Slit*, Springer Science+Business Media **13**, 2249 (2018)
- [23] Yu. V. Bludov, Aires Ferreira, N. M. R. Peres and M. I. Vasilevskiy, *A primer on surface plasmon-polaritons in graphene*, International Journal of Modern Physics B **27**, 1341001 (2013)
- [24] Xiaoguang Luo, Teng Qiu, Weibing Lu and Zhenhua Ni, *Plasmons in graphene: Recent progress and applications*, Materials Science and Engineering: R: Reports **74** (2013)
- [25] P. A. D. Gonçalves and N. M. R. Peres, *An Introduction to Graphene Plasmonics* (World Scientific Publishing Company, 2016)
- [26] P. A. D. Gonçalves, Sanshui Xiao, N. M. R. Peres and N. Asger Mortensen, *Hybridized Plasmons in 2D Nano-slits: From Graphene to Anisotropic 2D Materials*, ACS Photonics **12**, 3045 (2017)
- [27] Barnes, William and Dereux, Alain and Ebbesen, Thomas, *Surface Plasmon Subwavelength Optics*, Nature **424**, 824 (2003)
- [28] Yu. V. Bludov, N. M. R. Peres and M. I. Vasilevskiy, *Excitation of localized graphene plasmons by a metallic slit* (2019)
- [29] A. Yu. Nikitin, F. Guinea, F. J. Garcia-Vidal and L. Martin-Moreno, *Surface plasmon enhanced absorption and suppressed transmission in periodic arrays of graphene ribbons*, Physical Review B **85**, 081405 (2012)

- [30] Frank H. L. Koppens, Darrick E. Chang and F. Javier García de Abajo, *Graphene plasmonics: A platform for strong light-matter interaction*, Nano Lett. **8**, 3370 (2011)
- [31] Sanshui Xiao, Xiaolong Zhu, Bo-Hong Li and N. Asger Mortensen, *Graphene-plasmon polaritons: From fundamental properties to potential applications*, Front. Phys. **11**, 117801 (2016)
- [32] Christopher T. Phare, Yoon-Ho Daniel Lee, Jaime Cardenas and Michal Lipson, *30 GHz Zeno-based Graphene Electro-optic Modulator*, 2015 Conference on Lasers and Electro-Optics (CLEO) (2014)
- [33] Ming Liu, Xiaobo Yin, Erick Ulin-Avila, Baisong Geng, Thomas Zentgraf, Long Ju, Feng Wang and Xiang Zhang, *A graphene-based broadband optical modulator*, Nature **474**, 64 (2011)
- [34] L. Ren, Qi Zhang, Jun Yao, Z. Sun, R. Kaneko, Zheng Yan, S. Nanot, Zhong Jin, Iwao Kawayama, M. Tonouchi, J. M. Tour and J. Kono, *Terahertz and Infrared Spectroscopy of Gated Large-Area Graphene*, ACS Publications **12**, 3711 (2012)
- [35] Peter Weis, Juan L. Garcia-Pomar, Michael Hoh, Benjamin Reinhard, Alexander Brodyanski and Marco Rahm, *Spectrally Wide-Band Terahertz Wave Modulator Based on Optically Tuned Graphene*, ACS Nano **6**, 9118 (2012)
- [36] Berardi Sensale-Rodriguez, Rusen Yan, Subrina Rafique, Mingda Zhu, Wei Li, Xuelei Liang, David Gundlach, Vladimir Protasenko, Michelle M. Kelly, Debdeep Jena, Lei Liu, and Huili Grace Xing, *Extraordinary Control of Terahertz Beam Reflectance in Graphene Electro-absorption Modulators*, ACS Publications **12**, 4518 (2012)
- [37] W. Xu, L. Xie, J. Zhu, L. Tang, R. Singh, C. Wang, Y. Ma, H.-T. Chen, Y. Ying, *Terahertz biosensing with a graphene-metamaterial heterostructure platform*, Carbon **12** (2018)
- [38] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva and A. A. Firsov, *Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films*, Science **306**, 666 (2004)
- [39] A. K. Geim, *Graphene: status and prospects*, Science **324**, 1530 (2009)
- [40] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov e A. K. Geim, *The electronic properties of graphene*, Rev. Mod. Phys. **81**, 109 (2008)
- [41] K.S. Novoselov, A.K. Geim, S.V. Morozov, D. Jiang, M.I. Katsnelson, I.V. Grigorieva, S.V. Dubonos and A.A. Firsov, *Two-Dimensional Gas of Massless Dirac Fermions in Graphene*, Nature **438**, 197 (2005)
- [42] A.K. Geim and K.S. Novoselov, *The rise of graphene*, Nature Materials **306**, 183 (2007)
- [43] Claire Berger, Zhimin Song, Xuebin Li, Xiaosong Wu, Nate Brown, Cécile Naud, Didier Mayou, Tianbo Li, Joanna Hass, Alexei N. Marchenkov, Edward H. Conrad, Phillip N. First and Walt A. de Heer, *Electronic Confinement and Coherence in Patterned Epitaxial Graphene*, Science **312**, 1191 (2006)
- [44] Yuanbo Zhang, Yan-Wen Tan, Horst L. Stormer and Philip Kim, *Experimental Observation of Quantum Hall Effect and Berry's Phase in Graphene*, Nature **438**, 201 (2005)

- [45] Katrin Kneipp, Yang Wang, Harald Kneipp, Lev T. Perelman, Irving Itzkan, Ramachandra R. Dasari e Michael S. Feld, *Single Molecule Detection Using Surface-Enhanced Raman Scattering (SERS)*, Physical Review Letters **78**, 1667 (1997)
- [46] Lukas Novotny and Niek Van Hulst, *Antennas for light*, Nature Photonics **5**, 83 (2011)
- [47] Salvatore Savasta, Rosalba Saija, Alessandro Ridolfo, Omar Di Stefano, Paolo Denti and Ferdinando Borghese, *Nanopolaritons: Vacuum Rabi Splitting with a Single Quantum Dot in the Center of a Dimer Nanoantenna*, ACS Nano **4**, 6369 (2010)
- [48] D. C. Pedrelli, B. S. C. Alexandre, and N. M. R. Peres, *Excitation of SPPs in graphene by a waveguide mode*, EPL **126**, 27001 (2019)
- [49] P. Lalanne, J. P. Hugonin, and J. C. Rodier, *Theory of Surface Plasmon Generation at Nanoslit Apertures*, Physical Review Letters **95**, 263902 (2005)
- [50] P. Lalanne, J. P. Hugonin, and J. C. Rodier, *Approximate model for surface-plasmon generation at slit apertures*, J. Opt. Soc. Am. A **23**, 1608 (2006)
- [51] B. Sturman, E. Podivilov and M. Gorkunov, *Transmission and diffraction properties of a narrow slit in a perfect metal*, Physical Review B **82**, 115419 (2010)
- [52] M. Gorkunov, E. Podivilov and B. Sturman, *Transmission and scattering properties of subwavelength slits in metals*, Physical Review B **83**, 035414 (2011)
- [53] B. Sturman, E. Podivilov and M. Gorkunov, *Transmission and scattering properties of subwavelength slits in metals*, Physical Review B **84**, 205439 (2011)
- [54] P Lalanne, J C Rodier and J P Hugonin, *Surface plasmons of metallic surfaces perforated by nanohole arrays*, J. Opt. A: Pure Appl. Opt. **7**, 422 (2005)
- [55] P Lalanne, J P Hugonin, H.T. Liu and B. Wang, *A microscopic view of the electromagnetic properties of sub- λ metallic surfaces*, Surface Science Reports **64**, 453 (2009)
- [56] Ph Lalanne, J P Hugonin, S Astilean, M Palamaru and K D Moller, *One-mode model and Airy-like formulae for one-dimensional metallic gratings*, J. Opt. A: Pure Appl. Opt. **2**, 48 (2000)
- [57] Johan Christensen, Alejandro Manjavacas, Sukosin Thongrattanasiri, Frank H. L. Koppens, and F. Javier García de Abajo, *Graphene Plasmon Waveguiding and Hybridization in Individual and Paired Nanoribbons*, ACS Nano **6**, 431 (2012)
- [58] Daniel Rodrigo, Andreas Tittl, Odeta Lima, F Javier García de Abajo, Valerio Pruneri and Hatice Altug, *Double-layer graphene for enhanced tunable infrared plasmonics*, Light: Science and Applications **6**, e16277 (2017)
- [59] P. G. Etchegoin, E. C. Le Ru and M. Meyer, *An analytic model for the optical properties of gold*, The Journal of Chemical Physics **125**, 164705 (2006)
- [60] P. G. Etchegoin, E. C. Le Ru and M. Meyer, *Erratum: "An analytic model for the optical properties of gold"*, The Journal of Chemical Physics **127**, 189901 (2007)