

UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARÁ
INSTITUTO DE TECNOLOGIA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA ELÉTRICA

Luís Eduardo de Sena dos Santos

**Filtro eletromagnético baseado em grafeno
operando na região THz**

UFPA / ITEC / PPGEE
Campus Universitário do Guamá
Belém – Pará – Brasil

2024

Luís Eduardo de Sena dos Santos

Filtro eletromagnético baseado em grafeno operando na região THz

Dissertação submetida à Banca Examinadora do Programa de Pós-Graduação em Engenharia elétrica da UFPA para a obtenção do Grau de mestre em Engenharia Elétrica na Área de Eletromagnetismo Aplicado.

Orientador: Prof. Dr. Victor Dmitriev

Coorientador: Prof. Dr. Wagner Ormanes Pallheta Castro

UFPA / ITEC / PPGEE
Campus Universitário do Guamá
Belém-Pará-Brasil

2024

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP) de acordo com ISBD
Sistema de Bibliotecas da Universidade Federal do Pará
Gerada automaticamente pelo módulo Ficat, mediante os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

D278f de Sena dos Santos, Luís Eduardo.
FILTRO ELETROMAGNÉTICO BASEADO EM GRAFENO
OPERANDO NA REGIÃO THZ / Luís Eduardo de Sena dos
Santos. — 2024.
47 f. : il. color.

Orientador(a): Prof. Dr. Victor Alexandrovic Dmitriev
Coorientador(a): Prof. Dr. Wagner Ormanes Palheta
Dissertação (Mestrado) - Universidade Federal do Pará,
Instituto de Tecnologia, Programa de Pós-Graduação em
Engenharia Elétrica, Belém, 2024.

1. Filtros. I. Título.

CDD 621.30221

Luís Eduardo de Sena dos Santos

Filtro eletromagnético baseado em grafeno operando na região THz

APROVADO EM: 04/04/2024 DM 14/2024

Prof. Dr. Victor Dmitriev
Orientador - PPGE/UFPA

**Prof. Dr. Wagner Ormanes Palheta
Castro**
(Coorientador / Avaliador externo - UFRA)

**Prof. Dr. Rodrigo Melo e Silva de
Oliveira**
(Avaliador interno - PPGE / UFPA)

**Prof. Dr. Licinius Dimitri Sa de
Alcantara**
(Avaliador externo / UFRA)

UFPA / ITEC / PPGE
Campus Universitário do Guamá
Belém-Pará-Brasil

2024

A Deus por ser o autor e consumidor da minha fé e aos meus pais Antônia Corrêa de Sena dos Santos e Antonio dos Santos Carvalho(in memoria) por serem meus grandes apoiadores nessa caminhada e aos meus filhos Anderson Luís (macuxinho) e Luís Eduardo filho(cachorrinho). ”

Agradecimentos

Agradeço ao Senhor e salvador Jesus Cristo por todas as suas bênçãos e proteção. Agradeço ao meu pai Antônio dos santos Carvalho (in memoriam) e a minha mãe (Antônia corrêa de Sena dos Santos) por todo o esforço, dedicação e empenho na minha criação. Agradeço minha irmã Ana lúcia dos Santos Carvalho por toda a ajuda agradeço ao meu orientador Prof. Dr Victor Dmitriev pela oportunidade que é uma grande sonho para mim, agradeço ao meu co-orientador o prof. Dr Wagner Ormanes por todo empenho e amizade na minha orientação. Agradeço aos amigos(as) do grupo de pesquisa Nanotribo. Agradeço ao Amigo Jefferson Felgueiras pela ajuda e compreensão e amiga Dr francineti Carvalho pela grande amiga de anos.

"Bendito seja o nome do SENHOR, agora e para sempre. Do nascimento do sol até ao ocaso, louvado seja o nome do SENHOR. Excelso é o SENHOR, acima de todas as nações, e a sua glória, acima dos céus." (Autor: Salmos 113: 2-4)

Resumo

1

2 Neste estudo, um filtro plasmônico compacto em nanoescala foi proposto e analisado
3 numericamente. O filtro plasmônico é baseado em nanofitas de grafeno acopladas a um
4 ressonador também de grafeno em forma de disco com cortes laterais horizontalmente
5 e com inclinação de 45° , depositados sobre substrato dielétrico de sílica (SiO_2) e silício
6 (Si), operando na região THz. Investigamos estruturas simples que permitem ajustar
7 a frequência de ressonância do ressonador. Este trabalho fornece uma solução viável
8 para estruturas de nano-filtros plasmônicos de grafeno para uso futuro em aplicações de
9 dispositivos plasmônicos altamente integrados em regiões de THz e FIR.

10 PALAVRAS-CHAVE: Grafeno, filtro, terahertz, ressonador e guia de onda e telecomunica-
11 ções.

Abstract

1

2 In this study, a compact nanoscale plasmonic filter was proposed and numerically analyzed.
3 The plasmonic filter is based on graphene nanoribbons coupled to a disc-shaped graphene
4 resonator with horizontal side cuts and 45° orientation, deposited on a dielectric substrate
5 of silica (SiO_2) and silicon (Si), operating in the THz region. We investigated simple
6 structures that allow tuning the resonance frequency of the resonator. This work provides
7 a viable solution for graphene plasmonic nanofilter structures for future use in highly
8 integrated plasmonic device applications in THz and FIR regions.

9 KEYWORDS: Graphene, filter, terahertz, resonator, waveguide and telecommunications.

Lista de ilustrações

Figura 2.1 – Estrutura eletrônica e cristalina do grafeno adaptado de [19]	18
Figura 2.2 – Representação do grafeno (adaptado de [22])	19
Figura 2.3 – Estruturação do modelo <i>top-down</i> para a síntese do grafeno (adaptado de [23])	20
Figura 2.4 – Método de esfoliação mecânica do grafeno (adaptado de [22])	20
Figura 2.5 – Representação do método de síntese do grafeno de esfoliação química (adptado de [27])	21
Figura 2.6 – Esfoliação química pelo método de Hummer (adaptado de [30])	22
Figura 2.7 – Método de síntese do grafeno CVD (adaptado de [31])	22
Figura 2.8 – Representação da rede de bravais triangular do grafeno (adaptado de [21])	23
Figura 2.9 – Representação do plano basal e de borda do grafeno (adaptado de [32])	24
Figura 2.10–Estrutura da banda de energia do grafeno (adaptado de [38])	25
Figura 2.11–Representação das ondas plasmônicas sobre uma distribuição de carga metal/dielétrico (adaptado de [40])	26
Figura 3.1 – Distribuição da componente E_z do campo elétrico dos modos: a) modo dipolo, b) modo quadrupolo e c) modo hexapolo.	29
Figura 3.2 – Distribuição da componente E_z do campo elétrico para o guia de onda de largura $w = 200$ nm, $l = 3000$ nm e $\epsilon_f = 0,15$ eV, $f = 5$ THz.	30
Figura 3.3 – Dependência da parte real do índice de refração do grafeno em função da frequência para diferentes larguras $\omega = 100$ nm, $\omega = 200$ nm, $\omega = 300$ nm e 400 nm adaptado de [21].	30
Figura 3.4 – Dependência da parte imaginária do índice de refração efetivo (n_{eff}) do grafeno em função da frequência para diferentes larguras $\omega = 100$ nm, $\omega = 200$ nm, $\omega = 300$ nm e 400 nm adaptado de [21].	31
Figura 3.5 – Distribuição de campo na componente E_z nos modos: a) modo 1; b) modo 2; modo 3. adaptado de [43]	31
Figura 3.6 – Esquema do filtro de grafeno: (a) sem corte no ressonador, b) com corte no ressonador na horizontal e c) com corte no ressonador inclinados em 45° , vista superior, (d) vista frontal.	32
Figura 4.1 – Coeficientes de transmissão e reflexão para a estrutura sem cortes. $R = 600$ nm, $w = 200$ nm, $L = 1500$ nm, $g = 5$ nm e $\epsilon_f = 0,15$ eV.	34
Figura 4.2 – Distribuição de campo elétrico da componente E_z : a) 5,4 THz (dipolo), b) 7,3 THz (quadrupolo), c) 8,1 THz (transição do modo dipolo para o quadrupolo), d) 8,8 THz (hexapolo) e d) 9,7 THz (octapolo) e $\epsilon_f = 0,15$	35

Figura 4.3 – a) Coeficientes de transmissão e reflexão para a estrutura com cortes laterais horizontais, $w_c = 100$ nm e $L_c = 200$ nm $\epsilon_F = 0,15$ eV e distribuição de campo elétrico da componente E_z em b) 5,4 THz modo dipolo sem corte, c) 4,55 THz modo dipolo com corte horizontal e d) 7,3 THz modo quadrupolo sem corte e e) 7,1 modo quadrupolo com corte horizontal.	36
Figura 4.4 – a) dipolo 5,35 THz $L_c = 50$ nm e $w_c = 100$ nm; b) quadrupolo 7,3 THz $L_c = 50$ nm e $w_c = 100$ nm; c) dipolo 5,2 THz $L_c = w_c = 100$ nm ; d) quadrupolo 7,45 THz $L_c = w_c = 100$ nm; e) dipolo 4,9 THz $L_c = 150$ nm e $w_c = 100$ nm; f) quadrupolo 7,3 THz $L_c = 150$ nm e $w_c = 100$ nm e $\epsilon_f = 0,15$	37
Figura 4.5 – Respostas de transmissão em relação a diferentes w_c dos cortes horizontais e $L_c = 200$ nm $R = 600$ nm, $w = 200$ nm, $L = 1500$ nm, $g = 5$ nm e $\epsilon_F = 0,15$ eV.	38
Figura 4.6 – Respostas de transmissão em relação a diferentes L_c dos cortes horizontais e $w_c = 100$ nm $R = 600$ nm, $w = 200$ nm, $L = 1500$ nm, $g = 5$ nm e $\epsilon_F = 0,15$ eV.	39
Figura 4.7 – Frequências ressonantes do modo dipolo em relação à largura L_c do corte horizontal e $w_c = 100$ nm $R = 600$ nm, $w = 200$ nm, $L = 1500$ nm, $g = 5$ nm e $\epsilon_F = 0,15$ eV.	39
Figura 4.8 – Coeficientes de transmissão e reflexão para a estrutura com cortes laterais em 45° , $w_c = L_c = 100$ nm e $\epsilon_f = 0,15$ eV e distribuição de campo elétrico da componente E_z em b) 5,4 THz modo dipolo sem corte , c) 5,3 THz modo dipolo com corte em 45° , d) 7,3 THz modo quadrupolo sem corte e e) 7,3 THz modo quadrupolo com corte em 45° $\epsilon_f = 0,15$ eV.	40
Figura 5.1 – ARTIGO INTERNATIONAL HASANKEYF SCIENTIFIC RESEARCH AND INNOVATION CONGRESS	42

Lista de abreviaturas e siglas

SPP	Surface Plasmonic Polaritons
LSP	Localized Surface Plasmons
THz	Terahertz
bandgap	Intervalo de Banda
CVD	Chemical Vapor Deposition
0D	Materiais de Dimensão Zero
1D	Materiais Unidimensionais
2D	Materiais Bidimensionais
3D	Materiais Tridimensionais
eV	Elétron-Volt
RF	Radio Frequency
SiO_2	Dióxido de Silício (Sílica)
Si	Silício
TM	Transverso Magnético
TE	Transverso Elétrico
MEF	Método de Elementos Finitos
RTD	Diodo Túnel Ressonante
FET	Transistor de Efeito de Campo
LED	Diodo Emissor de Luz
STM	Microscópio de Varredura por Tunelamento
AFM	Microscópio de Força Atômica
IBM	International Business Machines Corporation
ZB	Zona de Brillouin

Lista de símbolos

E_{SPP}	Energia da "Surface Plasmonic Polaritons"
ω_{SPP}	Frequência de Plasmons da "Surface Plasmonic Polaritons"
E_{LSP}	Energia da "Localized Surface Plasmons"
ω_{LSP}	Frequência de "Localized Surface Plasmons"
ϵ_2	Constante dielétrica do semi-espaço não absorvente
ω_{pv}	Frequência de Plasmons para um volume de Plasmons
E_{pv}	Energia de um volume de Plasmons
n_e	Densidade volumétrica de portadores de carga de semicondutores
n_{ref}	Índice de refração de um material
E_F	Energia de Fermi
$f(E)$	Função de densidade de probabilidade de um estado de energia E estar ocupado
μ_0	Permeabilidade magnética no vácuo
μ_r	Permeabilidade magnética relativa de um material
μ	Permeabilidade magnética de um meio material
ϵ_r	Permissividade elétrica relativa de um material
$\mathbf{D}$	Vetor Densidade de fluxo elétrico
$\mathbf{E}$	Vetor campo elétrico
$\mathbf{B}$	Vetor Densidade de fluxo magnético
$\mathbf{H}$	Vetor campo magnético
ρ	Densidade de carga
ρ_s	Densidade superficial de carga
$\mathbf{J}$	Vetor Densidade de corrente
$\mathbf{J}_{2D}$	Vetor Densidade superficial de corrente

σ	Condutividade elétrica de um meio
$\mathbf{D}_{1,2}$	Componente normal da densidade de fluxo elétrico
$\mathbf{H}_{1,2}$	Componente tangencial da intensidade de campo magnético
$\mathbf{B}_{1,2}$	Componente normal da densidade de fluxo magnético
$\hat{\mathbf{n}}$	Vetor normal ao plano de incidência
$\mathbf{k}$	Vetor de onda
k_x	Componente x do vetor de onda
k_y	Componente y do vetor de onda
Δ	Espessura do grafeno
τ	Tempo de relaxamento
D	Peso de Drude
σ_s	Condutividade elétrica do grafeno
m_0	massa de repouso do elétron
e	Carga elétrica elementar
E_x	Componente x do campo elétrico
E_y	Componente y do campo elétrico
E_z	Componente z do campo elétrico
H_x	Componente x do campo magnético
H_y	Componente y do campo magnético
H_z	Componente z do campo magnético
k_0	Número de onda no espaço livre
ω	Frequência angular incidente
$\hbar$	Constante reduzida de Planck reduzida
k_B	Constante de Boltzmann

Sumário

1	INTRODUÇÃO	14
2	ASPECTOS TEÓRICOS	16
2.1	Nanotecnologia	16
2.2	Utilização da nanotecnologia na indústria	16
2.3	Equações de Maxwell e condições de contorno	17
2.4	Grafeno	18
2.4.1	Métodos de síntese do grafeno	19
2.4.2	Propriedades Geométricas do Grafeno	22
2.4.3	Estrutura de Banda do Grafeno	24
2.5	Plasmônica	25
2.6	Filtros	27
3	METODOLOGIA	28
3.1	Modelagem Numérica do Grafeno	28
3.1.1	Modelo de drude	28
3.2	Princípio de Funcionamento do Dispositivo	28
3.2.1	Características do guia de onda de Grafeno	29
3.2.2	Características do Ressonador de Grafeno	31
3.3	Geometria do dispositivo	32
4	RESULTADOS NUMÉRICOS	34
4.1	Resultados numéricos	34
4.1.1	Ressonador com cortes laterais horizontais	36
4.1.2	Ressonador com cortes laterais em 45°	40
5	CONCLUSÃO	41
	REFERÊNCIAS	43

1 INTRODUÇÃO

Nos últimos anos, tem despontado o interesse pela nanociência e nanotecnologia, que por sua vez, demonstra uma verdadeira revolução científica. Desta forma, vários materiais vêm tomando destaque, dentre os quais o grafeno, que surge a partir da síntese do grafite através do método de esfoliação mecânica. Este alotropo do carbono cujo isolamento gera um material bidimensional e possui espessura monoatômica, o mesmo, possui propriedades de suma importância para a comunidades científica, no qual encontra-se: resistência mecânica, mobilidade eletrônica, condutividade térmica, flexibilidade, área superficial específica elevada [1, 2].

Estudos demonstram que o grafeno é um dos principais materiais quando o assunto são nanodispositivos operando nas faixas: infravermelho e terahertz. Dentre os dispositivos estão: células solares, transistores, baterias, switch, divisores de potência e filtros [3]. O grafeno possui uma excelente interação com ondas eletromagnéticas na região THz com uma pequena banda de espectro que fica na região fotônica, no entanto, possui um grande potencial em diversas áreas da telecomunicação, onde sua radiação é não ionizante com poder elevado de penetração e altas taxas de transmissão de dados [4–6].

As ondas plasmônicas no grafeno, os SPP, tornam o material uma excelente alternativa para dispositivos nanofotônicos, tornando mais vantajoso do que utilizar metal, devido as suas propriedades físicas ajustáveis para ajustes dinâmicos através da inserção de campo magnético externo, bem como dopagem química sem quaisquer alterações nas suas propriedades geométricas. Por sua vez, o grafeno possui alta capacidade de confinamento de plasmons, o que possibilita dispositivos compactos e rápidos [7–9].

Neste trabalho temos como objetivo desenvolver um filtro de frequência baseado em grafeno operando na região THz. O mesmo possui dois guias de onda acoplados frontalmente a um ressonador circular para a modelagem do dispositivo utilizamos software Comsol. Realizamos cortes no ressonador que denominamos: de fora pra dentro e cortes em 45° , com intuito de analisarmos a interferência do cortes em relação à transmissão do dispositivo.

No Capítulo 2, introduzem-se os conceitos básicos de nanotecnologia, eletromagnetismo, conceitos de grafeno e filtros eletromagnéticos

No Capítulo 3, são mostrados os modelos de condutividade elétrica para o grafeno aplicado na modelagem, bem como a geometria do dispositivo e o seu princípio de funcionamento. Posteriormente, é feita uma breve revisão a respeito de guias de onda e análise do acoplamento do ressonador aos guias de ondas.

No Capítulo 4, são apresentados os resultados que obtivemos através do filtro: com

- 1 corte de fora dentro, corte em 45° e sem corte.
- 2 No Capítulo 5, realizamos as considerações finais mostrando nossos principais resul-
- 3 tados, bem como apontando as principais dificuldades, além pretensões para o dispositivo.

2 ASPECTOS TEÓRICOS

Neste Capítulo pretendemos introduzir os conceitos básicos de nanotecnologia, eletromagnetismo, conceitos de grafeno e filtros eletromagnéticos.

2.1 Nanotecnologia

O termo nanotecnologia foi introduzido pela primeira vez pelo japonês Norio Taniguchi para designar uma nova tecnologia que entraria no mercado, a mesma trabalha com a utilização de materiais na escala nanométrica, onde tem atraído atenção das indústrias, como também dos estudiosos, as pesquisas com nanomaterias despontam devido às propriedades de grande valia para as grandes empresas, tornando-o assim mais eficientes os seus produtos, algumas destas propriedades podem ser mencionadas, dentre as quais: térmicas, ópticas, magnéticas, eletrônicas, dentre outras. Sendo assim, o investimento em estudos de nanociência vem crescendo assiduamente no decorrer dos anos, onde se movimenta o valor de 40 bilhões de dolares por ano. alguns países tem sido propulsores nesse ramo de conhecimento, como: Estados unidos, Japão, Coréia do sul, china, por sua vez, estes países são os que mais investem em nanociência e no programa de investimentos em estudos na área e possui um contingente elevado de patentes. [10, 11]

2.2 Utilização da nanotecnologia na indústria

A descoberta do universo quântico, bem como a necessidade de novas de tecnologias para diversos ramos do conhecimento, dentre os quais: engenharia, medicina, automotiva, telecomunicações, dentre outros, fizeram-no proliferar inúmeros estudos sobre a parte microscópica, então, trazem consigo a necessidade de miniaturização dos dispositivos como: sensores, placas m3es, transistores, baterias, capacitores, filtros de frequência e assim por diante. Sendo assim, a nanotecnologia aponta-se como uma ferramenta de suma importância para suprir tais necessidades, pois, seu ramo de estudos pode situar na manipulação individual de átomos, moléculas, fótons, com a criação de dispositivos na escala nanometrica [12, 13]

É notório que a nanotecnologia está presente em nosso cotidiano através de objetos como: notebooks, celulares, televisões, dentre outros. Através disso, percebemos a grande diversidade de elementos tecnológicos existentes em nosso cotidiano, alguns elementos tomam destaque no ramo de estudos na esfera nanotecnologia, devido aos seus altos índices de condutividade (térmica e elétrica), resistência mecânica, assim por diante [12].

2.3 Equações de Maxwell e condições de contorno

No prelúdio, após a descoberta experimental de Oersted de que a corrente contínua pode gerar um campo magnético $\vec{B}$, através disso, surgiu a possibilidade de investigação de que um campo magnético $\vec{B}$ poderia gerar eletricidade. Em 1831, foi descoberto que um campo magnético variável no tempo gera uma corrente elétrica [14]. Na física possui um ramo bastante conhecido que é o eletromagnetismo, o mesmo comporta estudos dos campos elétricos e magnéticos existentes, por sua vez, são grandezas vetoriais, ou seja, possui direção, sentido e módulo. Todavia, o eletromagnetismo ganha expressão matemática através das equações de James Clark Maxwell popularmente conhecidas como equações de Maxwell [15, 16], as mesmas, se encontram na forma diferencial e integral na forma macroscópica no sistema de unidade MKS como demonstrado a seguir:

Equações de Maxwell na forma diferencial

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

$$\nabla \times \mathbf{H} = \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} + \mathbf{J}, \quad (2.2)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \quad (2.3)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0, \quad (2.4)$$

desta forma, podemos mencionar que o $\mathbf{J}$ é a densidade superficial de carga e o ρ_f densidade volumétrica de carga. A partir disso, é importante mencionar as relações existentes válidas para materiais existentes isotrópicos lineares como exemplo: $\mathbf{B} = \mu \mathbf{H}$, podemos observar a relação da densidade do campo magnético ($\mathbf{B}$) com a intensidade de campo magnético ($\mathbf{H}$), onde μ é a permeabilidade magnética. Em seguida, temos $\mathbf{D} = \epsilon \mathbf{E}$, a mesma, faz a relação entre a densidade de campo elétrico ($\mathbf{E}$) e a intensidade de campo elétrico ($\mathbf{D}$) e ϵ representa a permissividade elétrica, tais elementos mencionados são propriedades intrínsecas de cada material [17, 18].

Em se tratar de grafeno, podemos destacar que é considerado um material 2D, por conveniência esteja no plano XY e definimos $\mathbf{J}_f$ e $\mathbf{P}_f$ como:

$$\mathbf{J}_f = \mathbf{J}_s \delta(z) \quad (2.5)$$

$$\mathbf{P}_f = \mathbf{P}_s \delta(z), \quad (2.6)$$

1 outro fator importante é o conjunto de equações que estão relacionadas às condições de
 2 contorno, das componentes normais e transversais dos campos elétrico e magnético, na
 3 interface de dois meios.

$$\mathbf{E}_{1t} = \mathbf{E}_{2t} \quad (2.7)$$

$$\mathbf{H}_{1t} - \mathbf{H}_{2t} = \mathbf{J}_s \times \hat{n} \quad (2.8)$$

$$\mathbf{D}_{1n} - \mathbf{D}_{2n} = \mathbf{P}_s \quad (2.9)$$

$$\mathbf{B}_{1n} = \mathbf{B}_{2n}, \quad (2.10)$$

7 onde, $\hat{n}$ trata-se da normal à estrutura. vale a pena salientar, que as equações de maxwell
 8 e condições de contorno são peças fundamentais para a construção desse trabalho, haja
 9 vista, eficaz para se obter a solução analítica da camada infinita de grafeno, bem como
 10 subsidiar no uso do programa COMSOL.

11 2.4 Grafeno

12 No mundo, existem várias formas alotrópicas do carbono como exemplo: diamante,
 13 nanotubo de carbono (NTC), grafite e o grafeno. Devido a crescente demanda mundial
 14 por dispositivos de alto desempenho, os alotropos do carbono tem ganhado destaque no
 15 que tange o rumo das pesquisas para tais dispositivos. Desta forma, torna-se de suma
 16 importância a definição do grafeno neste trabalho, pois o mesmo é dos grandes expoentes
 17 no que diz respeito à tecnologia. A sua estrutura de uma única camada de átomos de
 18 carbono que estão sobre uma estrutura cristalina hexagonal hibridizados na forma Sp^2
 19 como demonstrado na Figura 2.1, torna esse material muito explorado na comunidade
 20 científica.

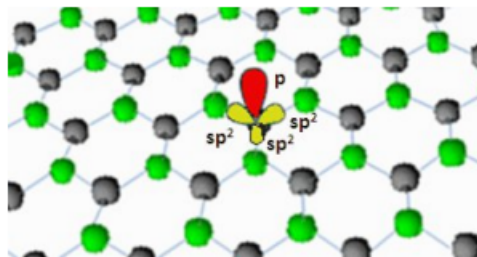


Figura 2.1 – Estrutura eletrônica e cristalina do grafeno adaptado de [19]

21 O grafeno é um material bidimensional com espessura monoatômica, no entanto,
 22 pode ser representado de maneira mais ampla pela junção de outras folhas de grafeno cuja
 23 a espessura $d_{002} = 0,335nm$ formado a partir de uma série de ligações covalentes, esse
 24 grupo pode interagir através de ligações de Van der Waals com outra estrutura acoplada
 25 de folhas de grafeno como representado na Figura 2.2 [19–22] .

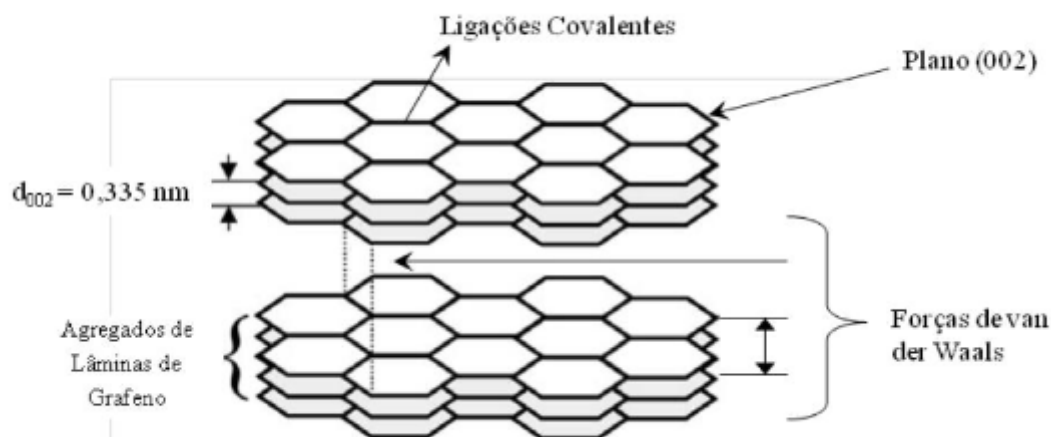


Figura 2.2 – Representação do grafeno (adaptado de [22])

Esse material possui alta condutividade no que se refere a eletricidade e a energia térmica, como também uma excelente resistência mecânica, em relação condutividade elétrica pode chegar até $2 \cdot 10^4 S/cm$, por sua vez a condutividade térmica do grafeno em temperatura ambiente pode atingir $5000 W/m.K$ [20].

2.4.1 Métodos de síntese do grafeno

Desde a sua descoberta em 2004 por pesquisadores da universidade manchester, no qual rendeu o prêmio nobel de física em 2010, alguns métodos de síntese do grafeno foram descobertos com a subsequência dos dias, dentro os quais estão: esfoliação mecânica, esfoliação química e deposição química a vapor(CVD). Vale a pena destacar, que os métodos de esfoliação química e mecânica derivam do grafite, onde a principal diferença seja que na química, a estrutura do grafite é tratada através de procedimentos físicos e químicos, enquanto na mecânica acontece a descamação das lâminas de grafeno do flocos de grafite por repetições de movimentos de cola e descola, onde a fita adesiva mergulha-se em acetona.

No método de esfoliação mecânica juntamente com a esfoliação química é um processo conhecido com top-down, isso indica que o grafeno pode ser sintetizado por separação ou esfoliação, por sua vez, esses métodos de síntese possui um menor valor econômico, no qual tornam o processo de síntese muito mais prático. Na Figura 2.3 temos a representação esquemática dos métodos *top-down*. [23,24]



Figura 2.3 – Estruturação do modelo *top-down* para a síntese do grafeno (adaptado de [23])

Então, o método de esfoliação mecânica é processo rudimentar que consiste na descamação das monocamadas de grafeno dos cristais de grafite através de fitas adesivas, onde essas são banhadas por acetona e dopadas com uma camada de sílica (SiO_2). em seguida, as lâminas de grafeno ficam retidas na superfície SiO_2/Si na Figura 2.4 demonstra o processo supramencionado, [21, 25].

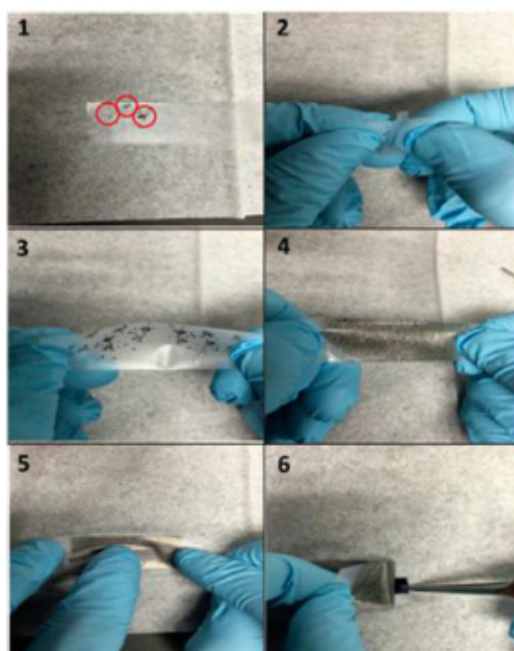


Figura 2.4 – Método de esfoliação mecânica do grafeno (adaptado de [22])

Em seguida, temos o método de esfoliação química, sendo o método mais adotado de síntese do grafite devido ao seu custo-benefício, produção em larga escala e qualidade do material. Este processo consiste no enfraquecimento das interações de Van der Waals entre os planos atômicos do grafite, por meio de elementos oxidantes que formam grupos funcionais em sua camada. através disso, ocorre a formação de gases gerando rompimentos nas ligações Sp^2 existentes no plano atômico do grafite, com isso, forma-se uma folha de grafite de menor instabilidade. Na Figura 2.5, temos a representação do método de síntese

de esfoliação química [21, 23, 26].

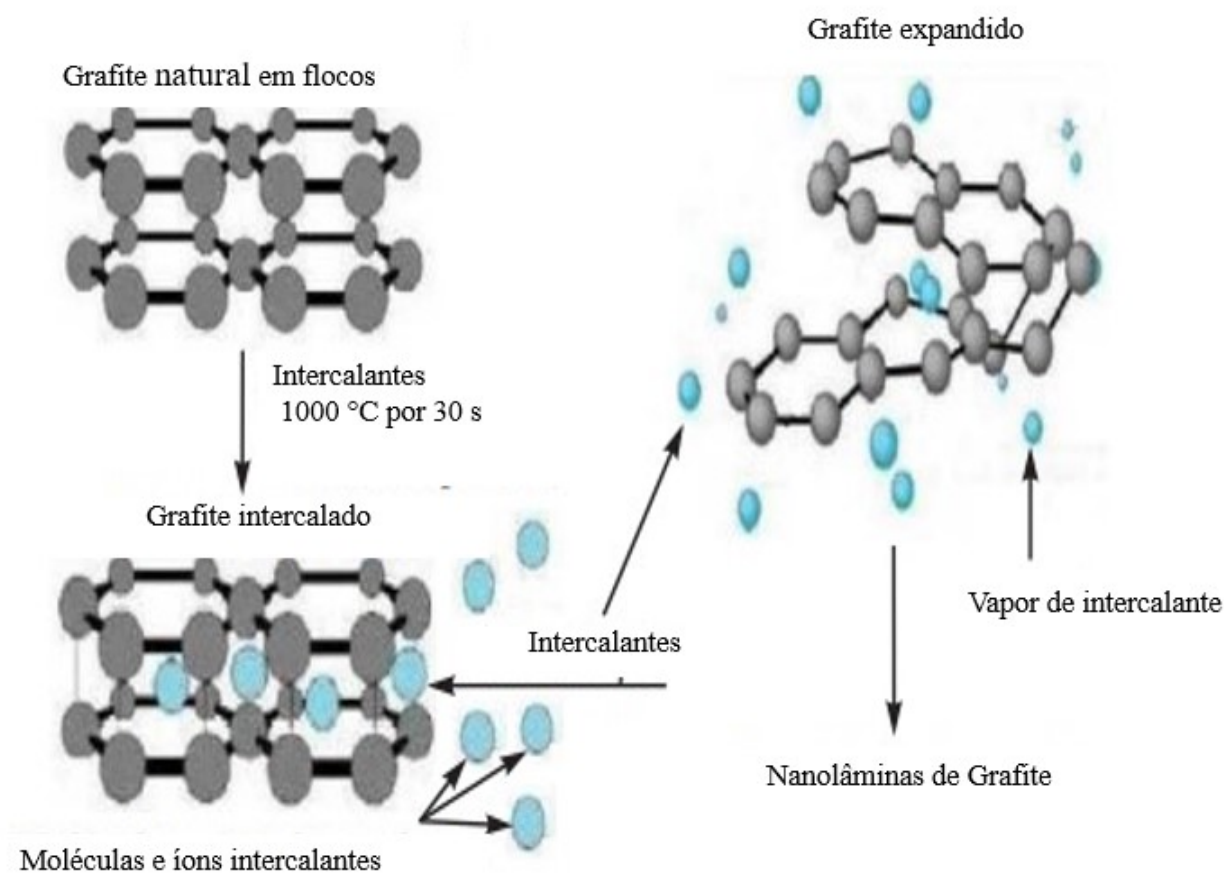


Figura 2.5 – Representação do método de síntese do grafeno de esfoliação química (adptado de [27])

1

2 Em 2006 Ruoff e colaboradores divulgaram uma nova rota para obtenção do grafeno
 3 como demonstrado na Figura 2.6, a partir do método de Hummer que tem como objetivo a
 4 redução do óxido de grafeno. Sendo assim, o grafeno é disperso em uma solução composta
 5 de ácido sulfúrico, nitrato de sódio e permanganato de potássio em uma temperatura
 6 de 45°C em duas horas, a partir disso, a formação de radicais de carboxila e hidroxila
 7 anexados, onde gera a dispersão do grafite, a partir dessa separação acontece o processo
 8 químico de redução, com intuito de eliminar os radicais anexados e reestabelecer a rede
 9 gráfitica inerente ao grafeno [28, 29]

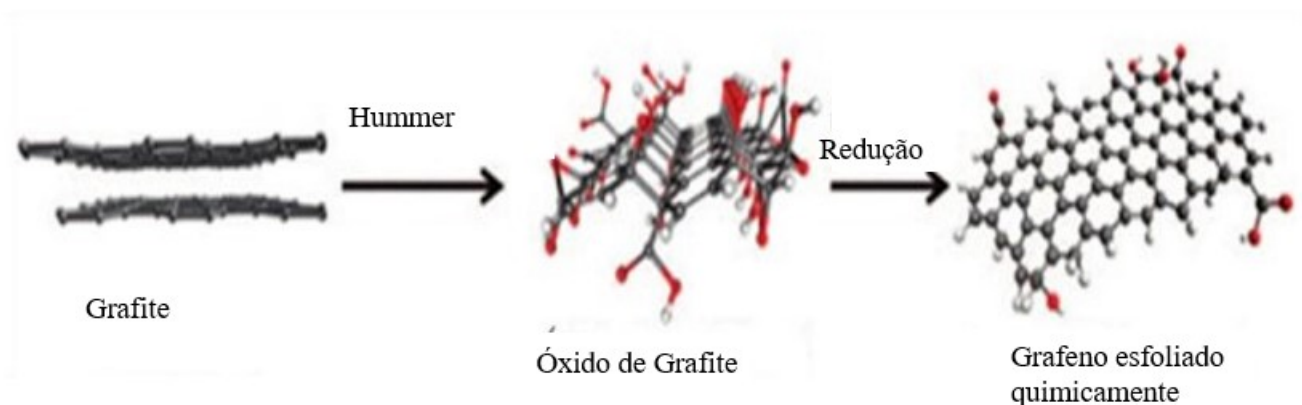


Figura 2.6 – Esfoliação química pelo método de Hummer (adaptado de [30])

1 Por último, temos o método de síntese do grafeno deposição de vapor químico,
 2 que toma notoriedade a partir da década de 70. O mesmo, consiste na decomposição
 3 do material a partir de um gás, ou outro componente volátil composto por carbono que
 4 catalisa-se por uma superfície metálica, sintetizando o processo CVD em três partes, o
 5 catalisador, o precursor de carbono e a energia térmica, onde a mesma deve ser suficiente
 6 para a decomposição do precursor, na figura 2.7 temos a representação do método CVD. O
 7 processo funciona a partir da mistura de três gases, o precursor que é um hidrocarboneto,
 8 um segundo gás que na grande maioria da vezes é o Argônio (A_r), responsável por manter
 9 a atmosfera inerte e também a velocidade do processo e por último o gás hidrogênio (H_2),
 10 no qual estimula o processo de decomposição [1, 31].

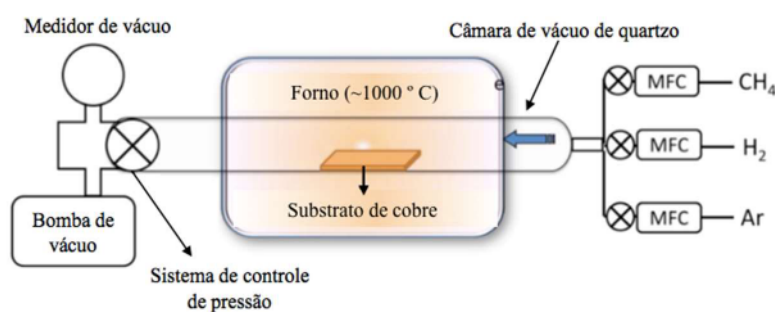


Figura 2.7 – Método de síntese do grafeno CVD (adaptado de [31])

11 2.4.2 Propriedades Geométricas do Grafeno

12 O grafeno possui uma estrutura bidimensional, cujo átomos de carbono estão
 13 ligados através de ligações covalentes, o mesmo possui uma rede de bravais triangular 2D,
 14 onde cada célula unitária comporta dois átomos cuja as ligações entre carbonos são do
 15 tipo σ e a distância entre os carbonos $a_{cc} = 1,42\text{\AA}$, onde esses dois átomos possui vetores
 16 unitários a_1 e a_2 e pode ser definidos pela equação 2.11 [32, 33].

$$a_1 = \frac{a}{2}(3, \sqrt{3}); a_2 = \frac{a}{2}(3, -\sqrt{3}), \quad (2.11)$$

1 partindo do ponto de vista do espaço real a célula unitária do grafeno é a primeira zona
 2 brillouin (Γ) que limita-se no espaço recíproco pelos vetores b_1 e b_2 como é demonstrado
 3 pela equação 2.12. A zona de brillouin tem um papel de suma importância para o estudo
 4 do grafeno, haja vista, possui as informações das propriedades eletrônicas do grafeno, bem
 5 como o seu nível de dispersão [21, 33].

$$b_1 = \frac{3\pi}{3a}(1, \sqrt{3}); b_2 = \frac{3\pi}{3a}(1, -\sqrt{3}), \quad (2.12)$$

6 a estrutura hexagonal do grafeno cuja rede de bravais triangular pode ser representada
 7 pela figura 2.8, a estrutura hexagonal possui 6 átomos de carbono em cada encontro de
 8 vértice que compartilham-se em 3 células unitárias [33].

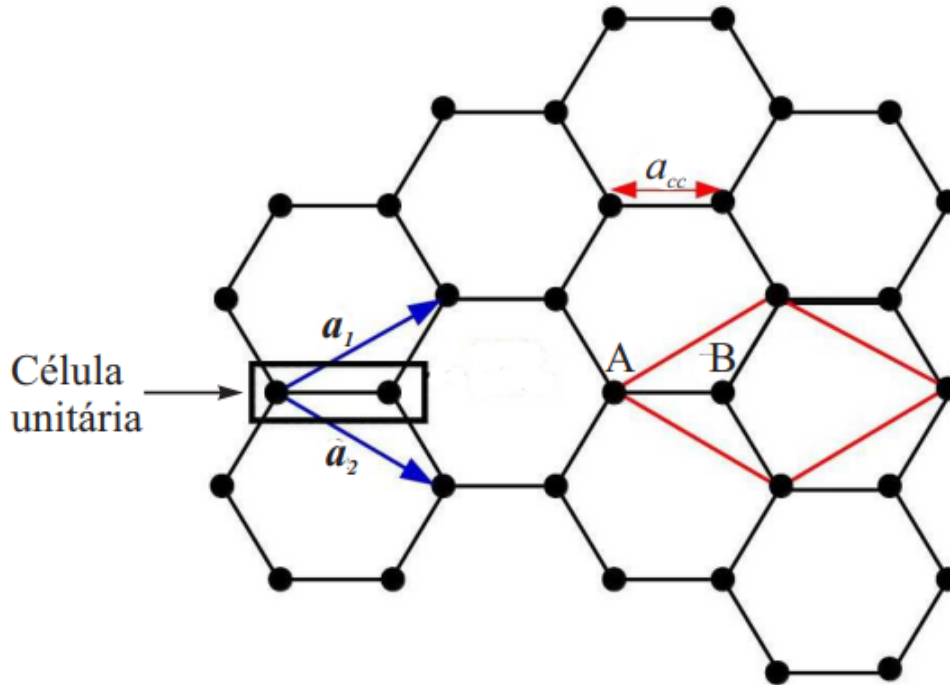


Figura 2.8 – Representação da rede de bravais triangular do grafeno (adaptado de [21])

9 É importante frisar, que o grafeno possui duas regiões distintas que são: plano
 10 basal e o plano de borda, no plano basal os átomos de carbono fazem 3 ligações fortes.
 11 Os orbitais híbridos $2S$, $2P_x$ e $2P_y$ estão em um plano para três elétrons de valência a
 12 quarta ligação está diretamente associada ao orbital $2P_z$, tal características do grafeno
 13 influência na deslocamento dos elétrons por toda a sua rede cristalina. na figura 2.9 temos
 14 representação do plano basal e borda, a célula unitária do grafeno está representada pelo
 15 losango verde, temos também a representação do espaço real através dos vetores unitários
 16 a_1 e a_2 e do recíproco através b_1 e b_2 [32, 34, 35].

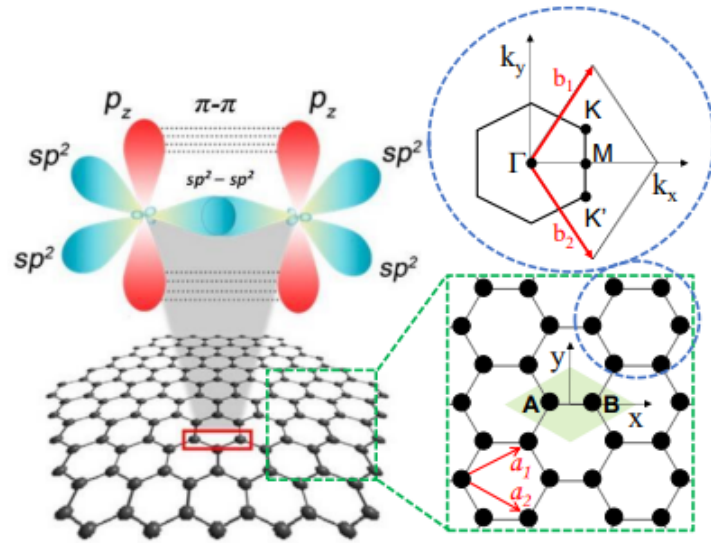


Figura 2.9 – Representação do plano basal e de borda do grafeno (adaptado de [32])

2.4.3 Estrutura de Banda do Grafeno

A estrutura do grafeno pode ser obtida por aproximação através do método computacional de tight-binding, o mesmo pode ser utilizado quando há sobreposição da função de onda atômica entre a sua vizinhança e torna suficiente para descrever a correção dos átomos isolados de um sólido cristalino. Este método descreve de maneira fidedigna a estrutura de bandas por toda a zona brillouin. Na equação (2.13) temos a representação do método de tight-binding [21, 36].

$$E(K) = \pm \gamma \sqrt{1 + 4 \cos(K_x \frac{a\sqrt{3}}{2}) \cos(K_y \frac{a}{2}) + 4 \cos^2(K_y \frac{a}{2})}, \quad (2.13)$$

na equação (2.13) temos a banda de condução quando ($E > 0$) e a banda de valência ($E < 0$), podemos observar através da figura 2.10, que a banda de condução de menor energia toca a banda de valência de maior energia em seis distintos pontos conhecidos como cones de dirac, por sua vez, demonstra o gap zero do grafeno puro tornando o grafeno com propriedades únicas. Na óptica linear devido a estrutura eletrônica de valência no formato cônico a condutividade do grafeno é o elemento essencial da plasmônica, pois traz consigo elemento físico que governa as interações eletromagnéticas entre o grafeno e estímulos externos [37–39].

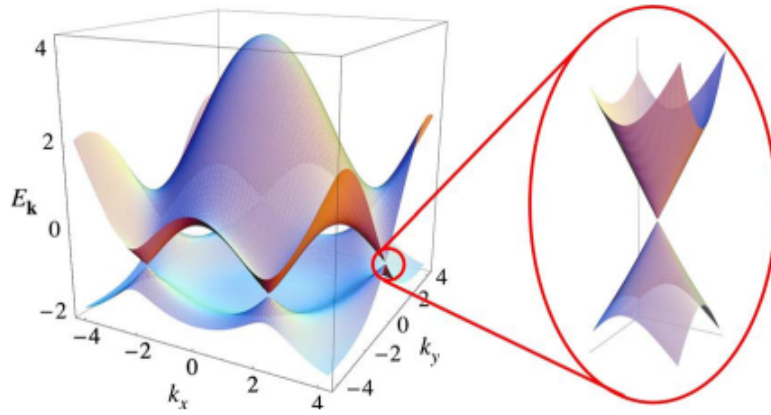


Figura 2.10 – Estrutura da banda de energia do grafeno (adaptado de [38])

2.5 Plasmônica

Recentemente tiveram-se vários avanços nos estudos de dispositivos fotônicos a base de silício em áreas como: biomedicina, engenharias, dentre outras. Devido a minituralização dos componentes e um baixo custo de produção concatenado a eficiência, torna-se necessário falar sobre plasmônica que nada mais é que a interação da luz com a matéria em dimensões menores que o comprimento de onda da luz no ar. Com o surgimento do termo plasmons em 1956 por David Pines, o mesmo se refere a perdas coletivas de elétrons no metal, no ano de 1968, Ritchie através da experimentação desobre os plasmons de superfície (surface plasmon-SP). Os SPs são descritos como o acoplamento coletivo de oscilações de elétrons livres (ou de condução), posteriormente, surge a ressonância de plasmons de superfície (surface plasmons ressonance-SPR) que define-se como: a ressonância gerada pela interação de luz com filmes finos metálicos [37, 40].

Vale a pena salientar, que através da plasmônica torna-se cabível a compreensão de dispositivos nanofotônicos, e também o funcionamento de elétrons livres de condução, os mesmos interagem em uma interface metal/dielétrico. Os elétrons de condução tem comportamento similar com o plasma, onde as partículas oscilam de maneira coletiva em função da frequência, no qual pode ser denominada frequência de plasma, onde pode ser representada pela equação (2.14) [14].

$$\omega_p = \sqrt{\frac{4\pi e^2 n}{m^*}}, \quad (2.14)$$

onde e é a carga do elétron, m^* é a massa efetiva do elétron e n é a concentração dos elétrons de condução, como já definido o plasmon como a associação de elétrons livres dos metais e possui uma energia dada pela equação (2.15) [37]

$$E = \hbar\omega_p, \quad (2.15)$$

1 onde $\hbar$ é a constante de Planck normalizada. Ao incidirmos uma onda eletromagnética em
 2 uma interface teremos o acoplamento de fótons aos plasmons de superfície, conhecido
 3 como ondas plasmônicas, as mesmas confinam a luz na interface meta/dielétrico, cujo o
 maior poder de penetração está no dielétrico como demonstrado pela figura 2.11 [40].

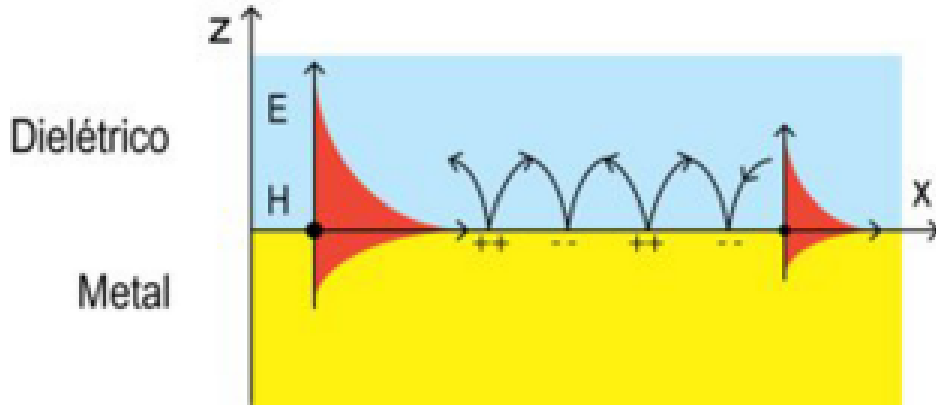


Figura 2.11 – Representação das ondas plasmônicas sobre uma distribuição de carga metal/dielétrico (adaptado de [40])

4

5 O comportamento dessas ondas obedecem as equações de Maxwell e suas respec-
 6 tivas condições de contorno. Com isso, podemos obter a relação de dispersão do modo
 7 transversal magnético (TM) para ondas de plasmon para uma interface metal/dielétrico
 8 comportamento define-se pela equação (2.18) [41].

$$q = \frac{\omega}{c} \sqrt{\frac{\epsilon_1 \epsilon_2}{\epsilon_1 + \epsilon_2}}, \quad (2.16)$$

9 ϵ_1 representa a permissividade elétrica do meio dielétrico, cujo valor é a constante real e
 10 positivo, ϵ_2 caracteriza a permissividade elétrica dos metais, no qual é uma função complexa,
 11 que depende da frequência de plasma ω_p , ω é a frequência angular e c é a velocidade da
 12 Luz. Ao analisarmos o grafeno podemos perceber que há propagação de ondas plasmônicas
 13 tanto para o modo transversal elétrico (TE), como para o modo transversal eletromagnético
 14 (TM), por sua vez, o grau dissipativo de energia é menor no grafeno do que em relação há
 15 um metal em uma faixa de frequência maior que vai do THz ao infravermelho. Outro fator
 16 importante, o grafeno tem a possibilidade de ajuste dinâmico de suas propriedades físicas,
 17 ou seja, não precisa de mudanças geométricas em sua estrutura alterando-se apenas o seu
 18 potencial químico ou a realização de uma dopagem química [37, 41, 42].

19 A relação de dispersão para os modos *TE* e *TM* no grafeno magnetizado e não
 20 magnetizado está relacionada às equações de Maxwell. A análise de ressonadores de
 21 grafeno magnetizado, possui uma relação de dispersão dada por: $\beta_{Spp} = \beta'_{Spp} + i\beta''_{Spp}$, cuja

1 a expressão real e imaginária é dada pelas equações (2.17) e (2.18) [37].

$$\beta'_{spp} = \frac{\epsilon(\omega\hbar)^2}{4\alpha\mu_c\hbar c} \left(1 - \frac{\omega_c^2}{\omega^2}\right) \quad (2.17)$$

$$\beta''_{spp} = \frac{\epsilon(\omega\hbar)^2}{4\alpha\mu_c\hbar c} \left(\frac{\alpha}{\omega}\right), \quad (2.18)$$

2 para o filtro de frequência plasmônico não magnetizado temos a parte real e imaginária
3 representado pelas equações (2.19) e (2.20).

$$\beta'_{spp} = \frac{\epsilon(\omega\hbar)^2}{4\alpha\mu_c\hbar c} \quad (2.19)$$

$$\beta'_{spp} = \frac{\epsilon(\omega\hbar\alpha)}{4\alpha\mu_c c}, \quad (2.20)$$

4 onde $\alpha \approx 0,007$ é a constante de de estrutura fina convencional, $\hbar$ constante reduzida de
5 planck μ_c potencial químico, C velocidade da luz, ω_c frequência de cíclotron e γ taxa de
6 espalhamento para o grafeno a cosntante de estrutura fina $\alpha_g = \frac{\epsilon^2}{\epsilon\hbar v_f}$ [37, 43].

7 2.6 Filtros

8 Os filtros são dispositivos de dois pólos cuja função é atenuar altas frequências,
9 estes filtros podem ser classificados quanto a sua resposta em frequência como: passa-baixa,
10 rejeita-faixa, passa-alta e passa-faixa. Podemos caracterizar que os filtros passa-baixas e
11 passa-alta são formados por duas regiões de interesse que são: faixa de passagem e faixa
12 de rejeição. Na de passagem deseja-se que o sinal se mantenha minimamente atenuado,
13 enquanto na faixa de rejeição o sinal deve ser completamente atenuado [4]

14 Desta forma, buscamos caracterizar de maneira sistematizada todos os aspectos
15 que compõem este trabalho, sendo assim, esta pesquisa retrata um filtro de frequência
16 baseado em grafeno, composto de sílica, silício e grafeno. Onde é composta por dois guias
17 de onda é um ressonador, utiliza-se para síntese computacional o software Comsol [33].

3 METODOLOGIA

No presente capítulo são mostrados os modelos de condutividade elétrica para o grafeno aplicado na modelagem, bem como a geometria do dispositivo e o seu princípio de funcionamento. Posteriormente, é feita uma breve revisão a respeito de guias de onda e análise do acoplamento do ressonador aos guias de onda.

3.1 Modelagem Numérica do Grafeno

A partir do avanço da nanotecnologia vários materiais bidimensionais vem tomando a atenção da comunidade científica, dentre o qual encontra-se o grafeno se destacando devido possuir intrinsecamente excelente propriedade eletrônica, devido ser um semiconductor com gap nulo com características de condução excelentes. partindo deste pressuposto, dentre os métodos teóricos eficientes temos o modelo de drude [44, 45].

3.1.1 Modelo de drude

No século XIX o alemão Paul Drude considerou que metais unidos formam um material metálico, onde os elétrons da última camada se desprendem e se tornam livres, enquanto que os íons permanecem fixos. No modelo de Drude as interações mecânicas entre elétrons e íons são consideradas instantâneas, assim como na teoria cinética dos gases.

Em relação ao grafeno, a partícula são Fermions de Dirac. O modelo de Drude descreve com eficiência a condutividade elétrica de forma eficiente da região do THz e infravermelho, onde na ausência de campo magnético externo a condutividade é descrita através da equação (3.1) [44–46].

$$\sigma_{intra}(\omega) = \frac{\sigma_0}{\pi} \frac{4\mu_c}{\hbar\gamma - i\hbar\omega}, \quad (3.1)$$

onde, $\sigma_0 = e^2 / 4\hbar$ é a condutividade universal, μ_c potencial químico, ω frequência angular, $\gamma = 1 / \tau$ taxa de espalhamento, $\hbar$ constante de planck reduzida [47]. Esta equação torna-se necessário para o resultado numérico de nosso dispositivo.

3.2 Princípio de Funcionamento do Dispositivo

O princípio de funcionamento do dispositivo se dá a partir da propagação de ondas plasmônica na superfície do grafeno que excitam os modos ressonantes no ressonador Figura 3.1.

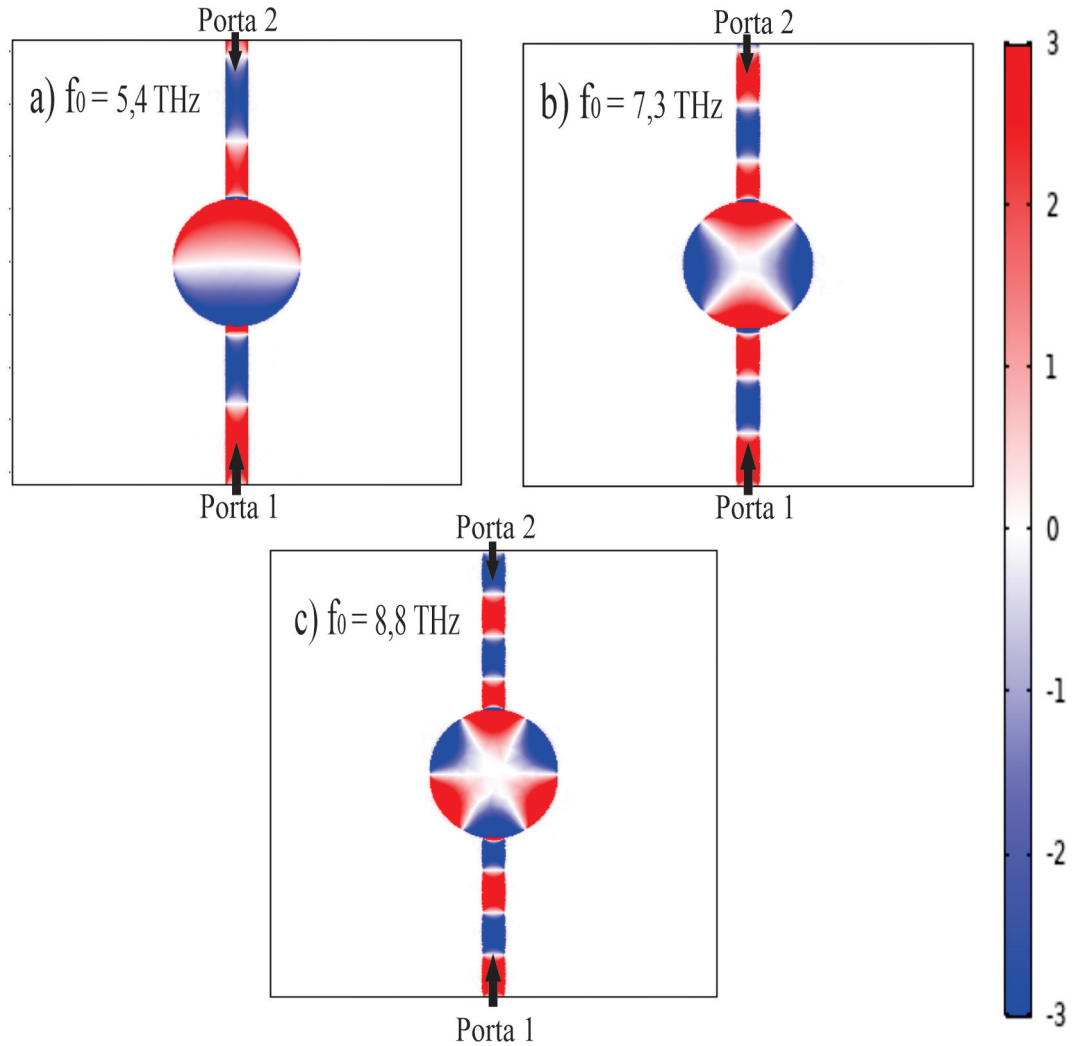


Figura 3.1 – Distribuição da componente E_z do campo elétrico dos modos: a) modo dipolo, b) modo quadrupolo e c) modo hexapolo.

1 Desta forma, através dos íons livres do grafeno forma-se a ondas plasmônicas (SPP)
 2 que se propagam na superfície de grafeno.

3 3.2.1 Características do guia de onda de Grafeno

4 Os circuitos eletrônicos estão a encolher como preconiza à lei de moore [48]. Devido
 5 a evolução do modo de guia de onda, observou-se que o guia de onda de grafeno é capaz de
 6 suportar o modo de propagação SPP. A nanofita de grafeno concatenada em um substrato
 7 de silício pode aumentar o modo de propagação [43, 48]. Para analisarmos as perdas do
 8 dispositivo realizamos simulações apenas com os guias de onda sem ressonador como
 9 demonstra a Figura 3.2.

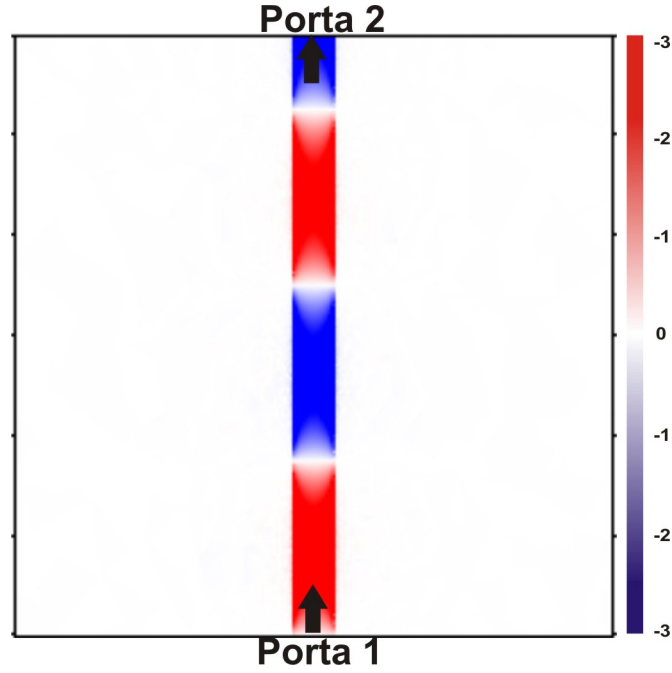


Figura 3.2 – Distribuição da componente E_z do campo elétrico para o guia de onda de largura $w = 200$ nm, $l = 3000$ nm e $\epsilon_f = 0,15$ eV, $f = 5$ THz.

Em [21], foi calculado a dependência da parte real do índice de refração efetivo do grafeno em função da frequência para diferentes larguras do guia de onda, $w = 100$ nm, $w = 200$ nm, $w = 300$ nm e $w = 400$ nm, como podemos observar na figura 3.3.

O guia de onda com largura de 100 nm possui valores mais altos para a parte real do n_{eff} em comparação com as outras larguras. A parte real de n_{eff} define o comprimento de onda, o qual aumenta com a frequência.

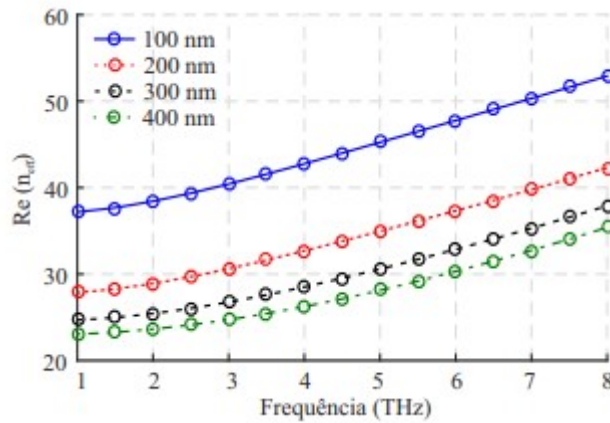


Figura 3.3 – Dependência da parte real do índice de refração do grafeno em função da frequência para diferentes larguras $w = 100$ nm, $w = 200$ nm, $w = 300$ nm e 400 nm adaptado de [21].

As perdas no guia de onda de grafeno, definida pela parte imaginária do n_{eff} , diminui com o aumento da frequência.

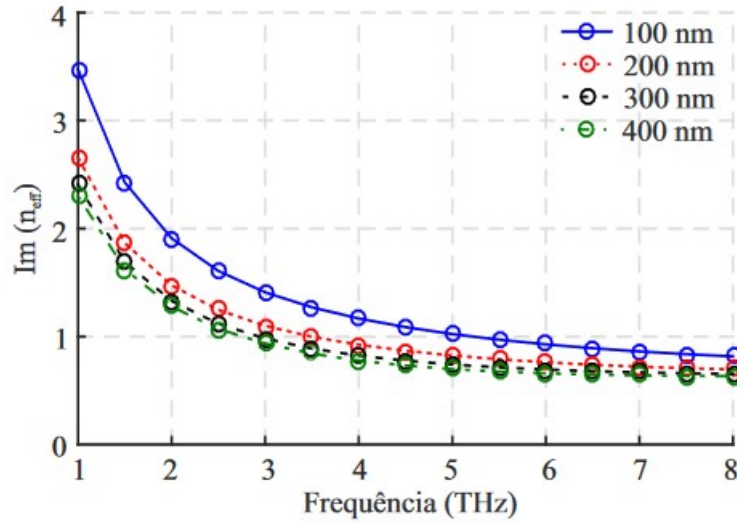


Figura 3.4 – Dependência da parte imaginária do índice de refração efetivo (n_{eff}) do grafeno em função da frequência para diferentes larguras $\omega = 100$ nm, $\omega = 200$ nm, $\omega = 300$ nm e 400 nm adaptado de [21].

Os modos SPP foram investigados em [43] para fitas de até 260 nm, onde temos o modo(1), modo (2) e modo(3) para as respectivas frequências 20 THz, 30 THz e 40 THz, podemos ver a distribuição da componente do campo elétrico E_z na Figura 3.5.

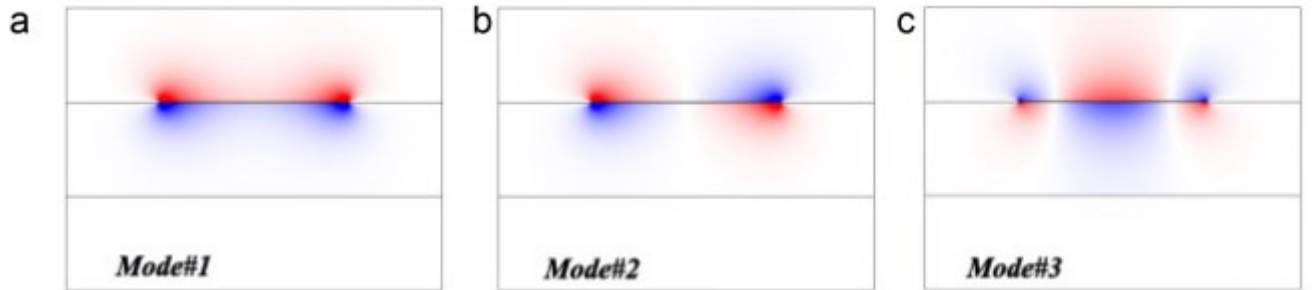


Figura 3.5 – Distribuição de campo na componente E_z nos modos: a) modo 1; b) modo 2; modo 3. adaptado de [43]

Então, para a análise do filtro eletromagnético optamos pelo modo 1 devido ao seu menor grau dispersão em relação aos outros dois modos, bem como uma melhor excitação no ressonador.

3.2.2 Características do Ressonador de Grafeno

As frequências de ressonância do ressonador de grafeno podem ser obtidas a partir do raio do ressonador com o comprimento de onda plasmônico. Neste caso, utilizamos o modo de propagação TM sem campo magnético externo. Sendo assim, iremos obter o raio R do ressonador para os modos dipolo, quadrupolo e hexapolo através da seguinte

- 1 condição $2\pi R = n\lambda_{spp}$, onde λ_{spp} é o comprimento de onda plasmônica. Então, é possível
 2 obter uma aproximação do raio do ressonador, considerando apenas a parte real, onde
 3 $R = n\lambda_{spp}/2\pi$, substitui-se λ_{spp} temos a equação (3.2). Onde, μ_c é o potencial químico e
 4 ϵ_1 é a permissividade. [49].

$$R \approx n8,3 \times 10^{40} \frac{\mu_c}{(1 + \epsilon_1)(\omega)^2}, \quad (3.2)$$

- 5 onde, $n = 1, 2, 3$ assumi os valores de 1, 2 ou 3, respectivamente para os modos dipolo,
 6 quadrupolo e hexapolo.

7 3.3 Geometria do dispositivo

- 8 Representações esquemáticas dos projetos possíveis são dadas na Figura 3.6. As
 9 fig: 3.5(a), 3.5(b) e 3.5(c), mostram as vistas superiores e a Fig. 3.5(d) apresenta a vista
 10 lateral dos dispositivos. Como mostrado nas Figs. 3.5(a), 3.5(b) e 3.5(c), os dispositivos
 11 consistem em guias de onda de grafeno conectados ao ressonador circular de grafeno sem
 12 cortes, com cortes laterais na horizontal e com cortes inclinados em 45° , respectivamente.
 13 Os guias de onda são separados do ressonador por um gap g .

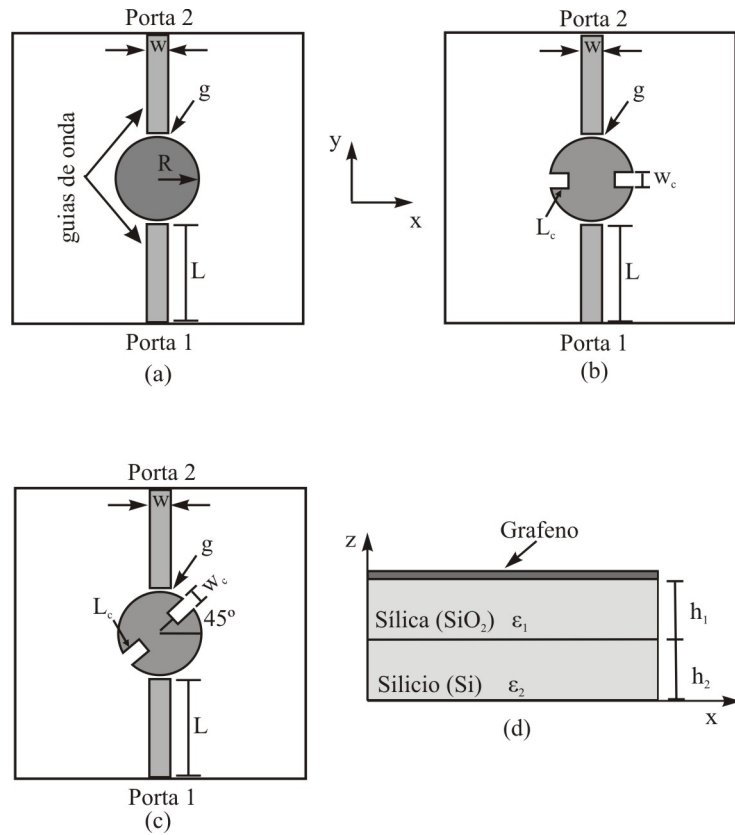


Figura 3.6 – Esquema do filtro de grafeno: (a) sem corte no ressonador, b) com corte no ressonador na horizontal e c) com corte no ressonador inclinados em 45° , vista superior, (d) vista frontal.

1 Os componentes do grafeno estão sobre um substrato dielétrico composto pelas
2 camadas de sílica (SiO_2) e de silício (Si) com espessuras h_1 e h_2 de 2500 nm e as
3 permissividades relativas de $\epsilon_1 = 2,09$ e $\epsilon_2 = 11,9$, respectivamente. O ressonador de
4 grafeno tem raio $R = 600$ nm, guias de onda de largura $w = 200$ nm e comprimento
5 $L = 1500$ nm, acoplados frontalmente por uma distância $g = 5$ nm. As dimensões w_c e L_c
6 corresponde a largura e o comprimento dos cortes laterais horizontais e inclinados em 45° ,
7 feitos no ressonador de grafeno, respectivamente.

4 RESULTADOS NUMÉRICOS

4.1 Resultados numéricos

O princípio de funcionamento do dispositivo é baseado em ondas plasmônicas nos guias de ondas de grafeno, que excitam ressonâncias de modos dipolo, quadrupolo, hexapolo e octapolo no ressonador circular também de grafeno. Primeiramente, as características de frequência do filtro sem cortes laterais no ressonador são plotadas na Figura 4.1, com o intuito de serem comparadas com a estrutura proposta (ver Figuras 3.5a e 3.5b). Nós devemos considerar a seguir, apenas as perdas relacionadas ao ressonador. Para tanto, subtraímos de todas as perdas do filtro, as perdas dos guias de onda com o comprimento $2L$ (ver Figura 3.5 - guia). É possível observar que existem cinco picos de transmissão nas frequências 5,4 THz (modo dipolo), 7,3 THz (modo quadrupolo), 8,1 THz (transição do quadrupolo para o hexapolo) 8,8THz (modo hexapolo) e 9,7 THz (modo octapolo).

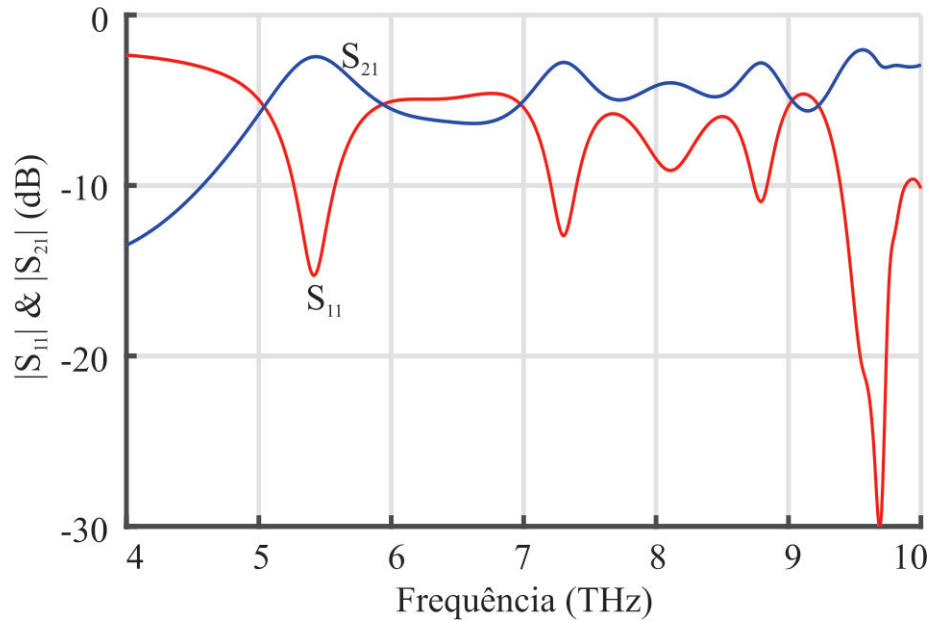


Figura 4.1 – Coeficientes de transmissão e reflexão para a estrutura sem cortes. $R = 600$ nm, $w = 200$ nm, $L = 1500$ nm, $g = 5$ nm e $\epsilon_f = 0,15$ eV.

- 1 A onda injetada na porta 1 será transmitida para a porta 2, como pode ser visto
 2 na distribuição de campo da componente E_z do campo elétrico para os modos dipolo,
 3 quadrupolo, hexapolo e octapolo, apresentadas nas figuras 4.2 a-d, respectivamente.

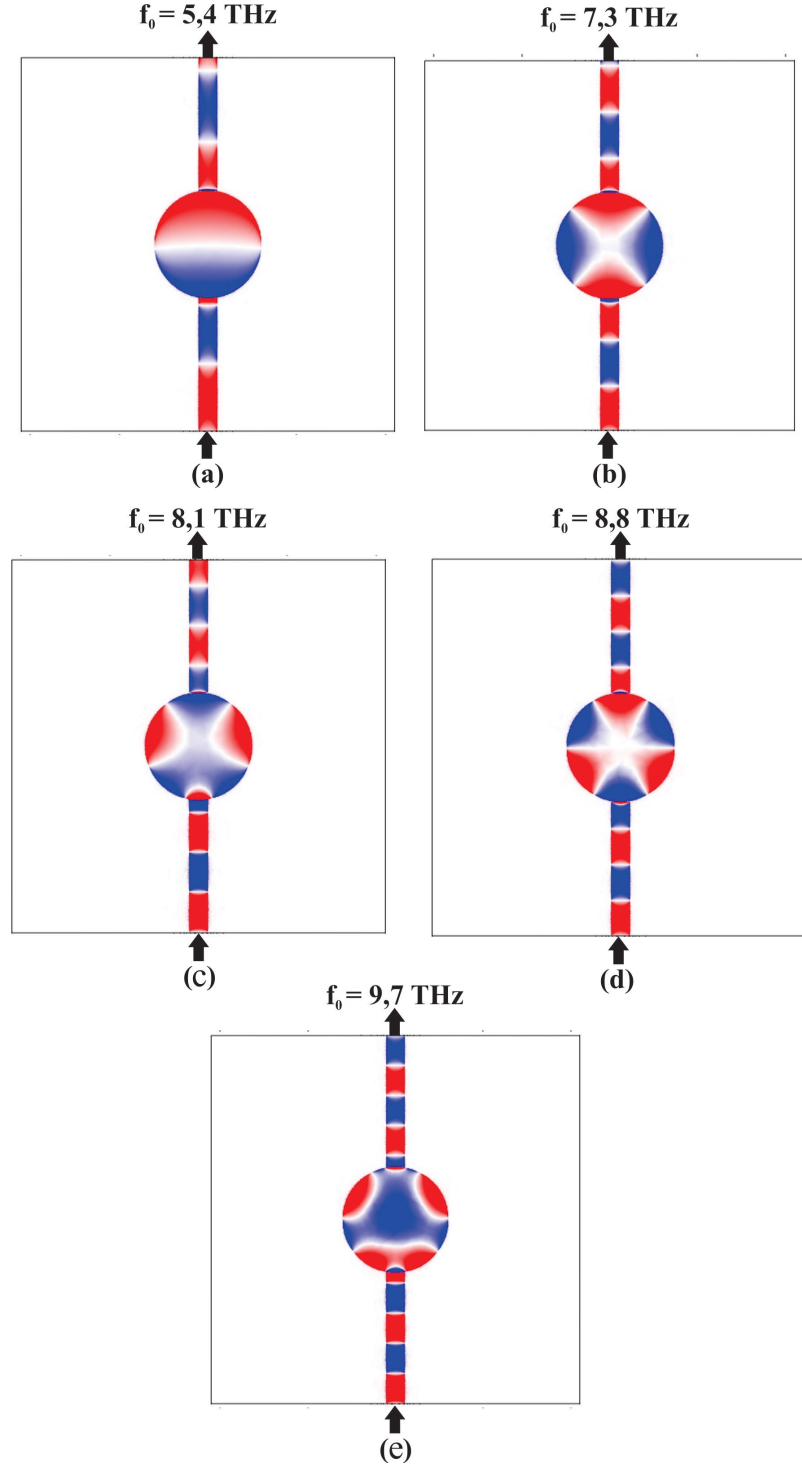


Figura 4.2 – Distribuição de campo elétrico da componente E_z : a) 5, 4 THz (dipolo), b) 7, 3 THz (quadrupolo), c) 8, 1 THz (transição do modo dipolo para o quadrupolo), d) 8, 8 THz (hexapolo) e d) 9, 7 THz (octapolo) e $\epsilon_f = 0, 15$.

4.1.1 Ressonador com cortes laterais horizontais

Cortes duplos horizontalmente com largura de 100 nm e comprimentos de 200 nm foram feitos no ressonador (ver Figura 3.5b). As características em frequência e as distribuições de campo da propagação de SPPs para quatro frequências diferentes (4,55 THz, 5,4 THz, 7,3 THz e 7,1 THz) estão presentes nas figuras 4.3 a-e, respectivamente.

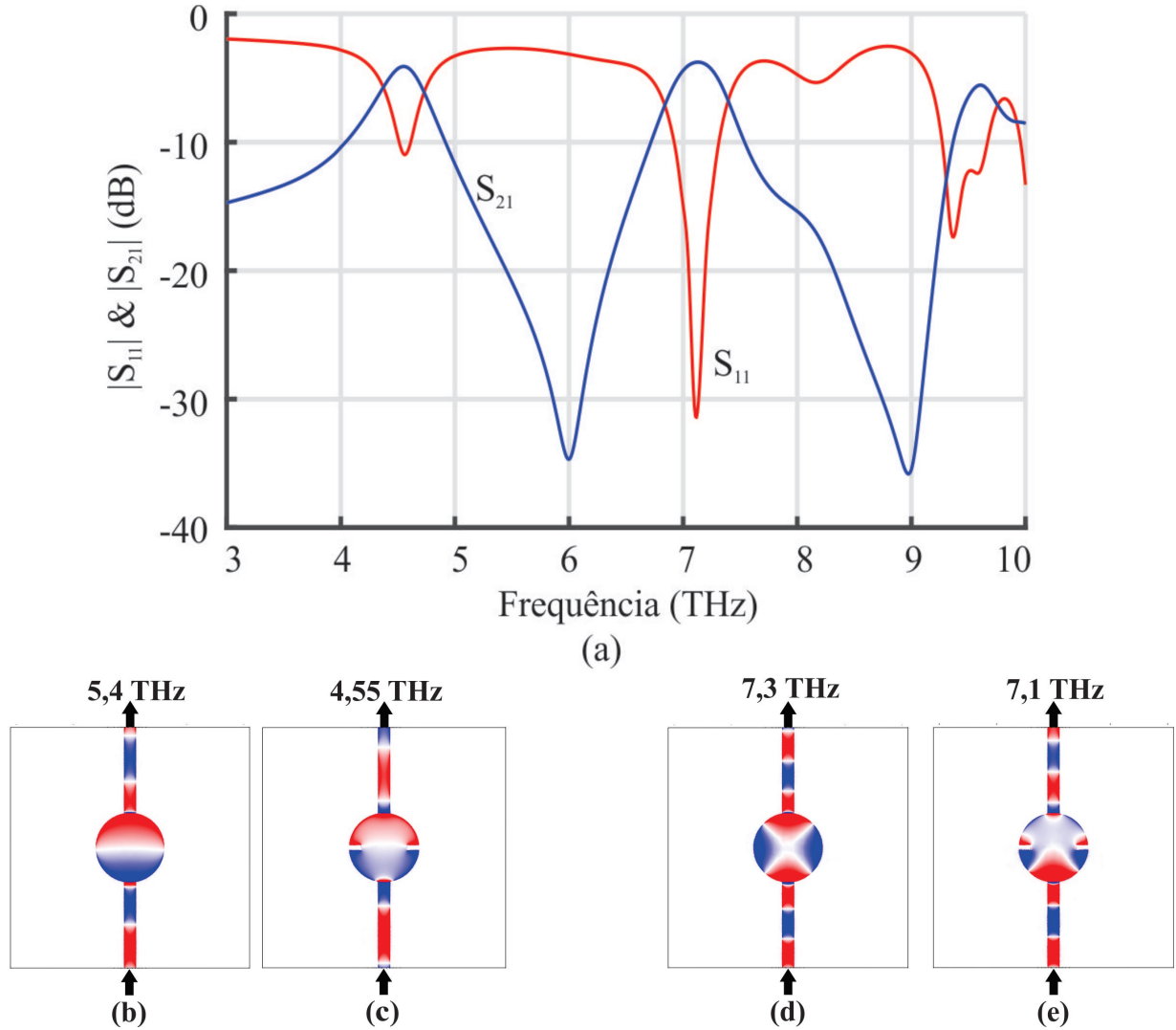


Figura 4.3 – a) Coeficientes de transmissão e reflexão para a estrutura com cortes laterais horizontais, $w_c = 100$ nm e $L_c = 200$ nm $\epsilon_F = 0,15$ eV e distribuição de campo elétrico da componente E_z em b) 5,4 THz modo dipolo sem corte, c) 4,55 THz modo dipolo com corte horizontal e d) 7,3 THz modo quadrupolo sem corte e e) 7,1 THz modo quadrupolo com corte horizontal.

Todos os outros parâmetros, tanto geométricos como físicos são mantidos fixos, ou seja, $R = 600$ nm, $w = 200$ nm, $L = 1500$ nm, $g = 5$ nm e $\epsilon_F = 0,15$ eV. Observa-se que o dispositivo começa a operar na frequência de ressonância do modo dipolo em 4,55 THz (Figura 4.3 a), com perdas de inserção de -4 dB. Pode-se entender que o aumento das perdas de inserção encontradas nos resultados do FEM, são causados por múltiplas reflexões nas bordas dos cortes laterais no ressonador. Além disso, as demais frequências

1 de ordem superior (modos quadrupolo, hexapolo e octapolo) sofrem distorções devido
 2 também às reflexões múltiplas com interferência destrutiva causada pela influência dos
 3 cortes laterais. Podemos destacar que há uma grande mudança na frequência de ressonância
 4 em relação ao dispositivo sem corte. Desta forma, observa-se que o cortes realizados na
 5 parte horizontal do ressonador possuem grande influência na frequência de ressonância
 6 como apresentando no modo dipolo e quadrupolo.

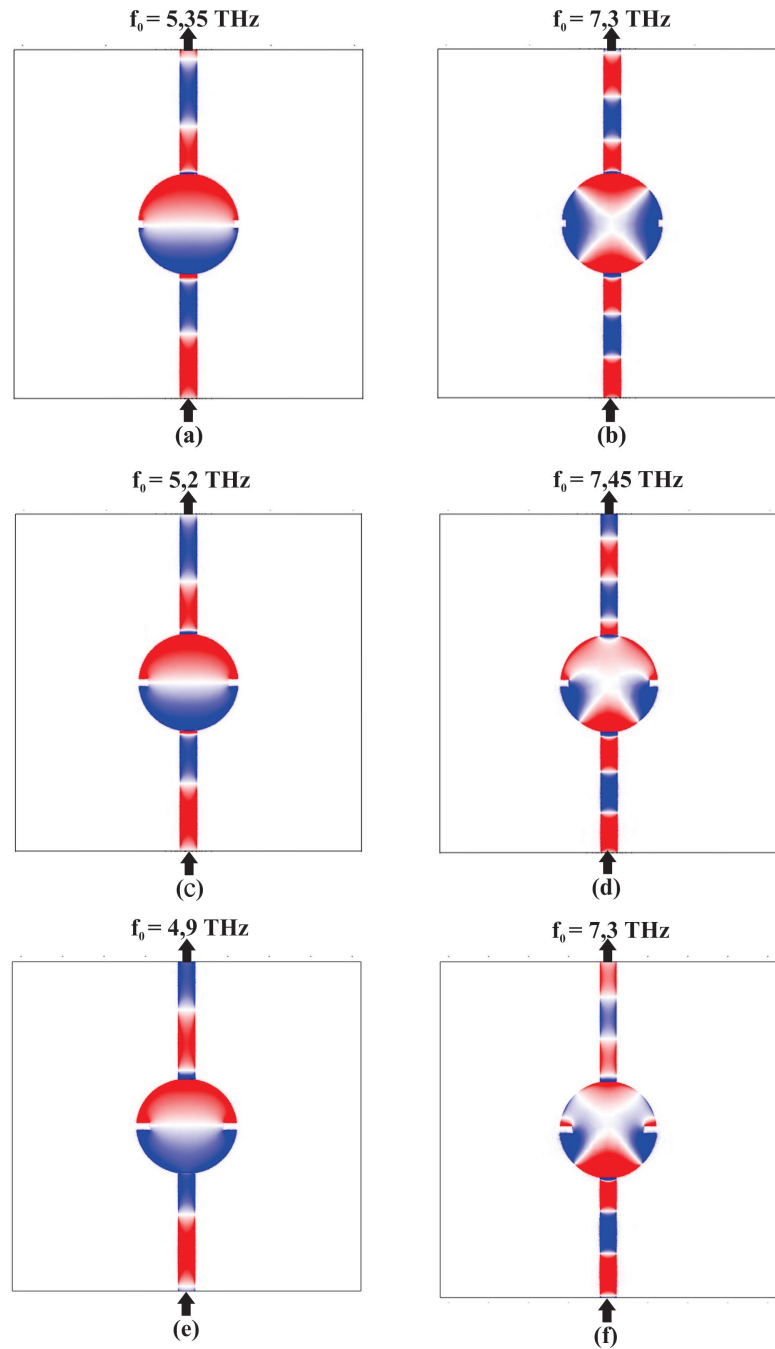


Figura 4.4 – a) dipolo 5,35 THz $L_c = 50$ nm e $w_c = 100$ nm; b) quadrupolo 7,3 THz $L_c = 50$ nm e $w_c = 100$ nm; c) dipolo 5,2 THz $L_c = w_c = 100$ nm ; d) quadrupolo 7,45 THz $L_c = w_c = 100$ nm; e) dipolo 4,9 THz $L_c = 150$ nm e $w_c = 100$ nm; f) quadrupolo 7,3 THz $L_c = 150$ nm e $w_c = 100$ nm e $\epsilon_f = 0,15$

Na figura 4.4 mantivemos todos os parâmetros da figura 4.3, tanto geométricos como físicos são mantidos fixos, ou seja, $R = 600$ nm, $w = 200$ nm, $L = 1500$ nm, $g = 5$ nm e $\epsilon_F = 0,15$ eV. Realizamos a variação no comprimento (L_c) entre 50 nm à 150 nm para termos a compreensão sobre a frequência de ressonância dos modos dipolo e quadrupolo referente a figura 4.3. Desta forma, observa-se que a medida que aumentamos o comprimento (L_c) do corte diminuímos a frequência de ressonância no modo dipolo. Conseguimos observar através dessas variações no comprimento do corte no ressonador que na figura 4.3 c) e figura 4.3 e) ocorre a formação do modo dipolo e quadrupolo, respectivamente devido o comportamento se repetir nas regiões supramencionadas através da figura 4.4.

Em seguida, investigamos a influência de diferentes cortes laterais no ressonador de grafeno nas frequências de ressonância do dispositivo. A largura w_c do corte horizontal foi variada de 50 nm a 500 nm e o comprimento L_c foi definido como 200 nm, enquanto outros parâmetros são fixados conforme acima. A Figura 4.5 mostra os espectros de transmissão do modo dipolo para três variações de w_c (100 nm, 200 nm e 300 nm). Observamos que as excitações dos modos dipolares ressonantes na nanocavidade não alteram a frequência de operação do dispositivo.

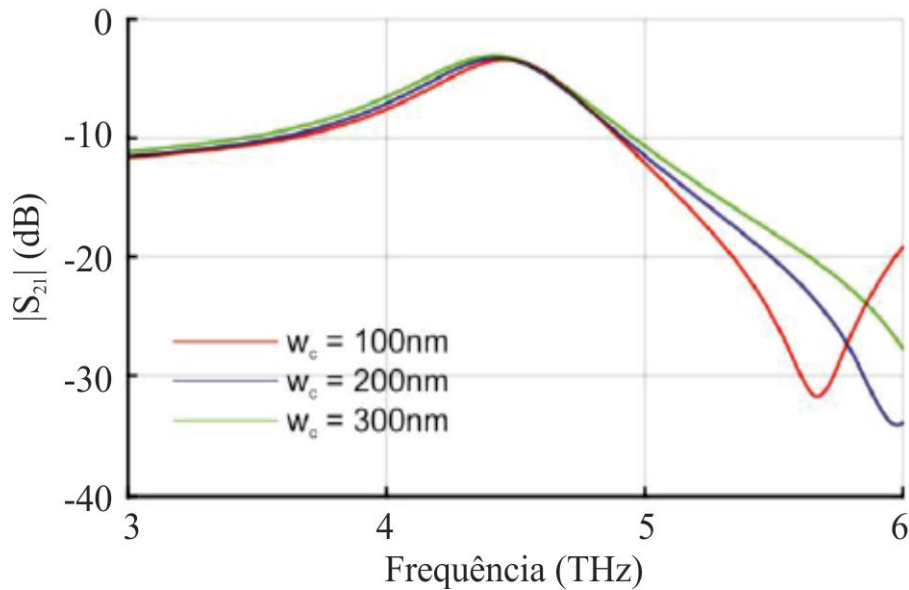


Figura 4.5 – Respostas de transmissão em relação a diferentes w_c dos cortes horizontais e $L_c = 200$ nm, $R = 600$ nm, $w = 200$ nm, $L = 1500$ nm, $g = 5$ nm e $\epsilon_F = 0,15$ eV.

Além disso, os espectros de transmissão com diferentes comprimentos L_c dos cortes laterais no nanodisco de grafeno também foram estudados. A Figura 4.6 apresenta a resposta de transmissão para três comprimentos (100 nm, 200 nm e 300 nm), enquanto os outros parâmetros são definidos como $R = 600$ nm, $w = 100$ nm, $L = 1500$ nm, $g = 5$ nm, $w_c = 200$ nm e $\epsilon_F = 0,15$ eV.

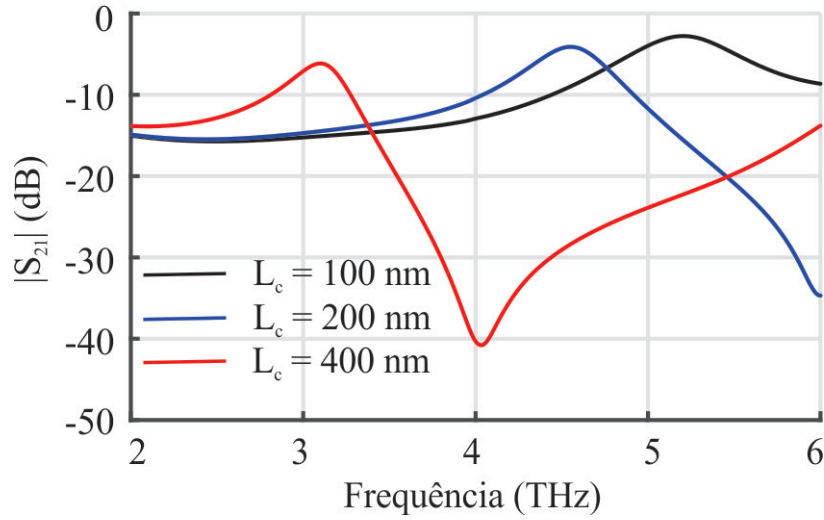


Figura 4.6 – Respostas de transmissão em relação a diferentes L_c dos cortes horizontais e $w_c = 100$ nm $R = 600$ nm, $w = 200$ nm, $L = 1500$ nm, $g = 5$ nm e $\epsilon_F = 0,15$ eV.

1 Ao introduzir cortes laterais horizontais no ressonador de disco, a transmissão do
 2 modo de ressonância dipolo pode ser efetivamente ajustada alterando o comprimento (L_c).
 3 Isso revela que o pico de transmissão do modo dipolo é deslocado para frequências mais
 4 baixas com o aumento do comprimento do corte horizontal L_c . Na Figura 4.7, existe uma
 5 relação linear entre a frequência de ressonância e o comprimento L_c (aumentando de 50
 6 nm para 500 nm em passos de 50 nm).

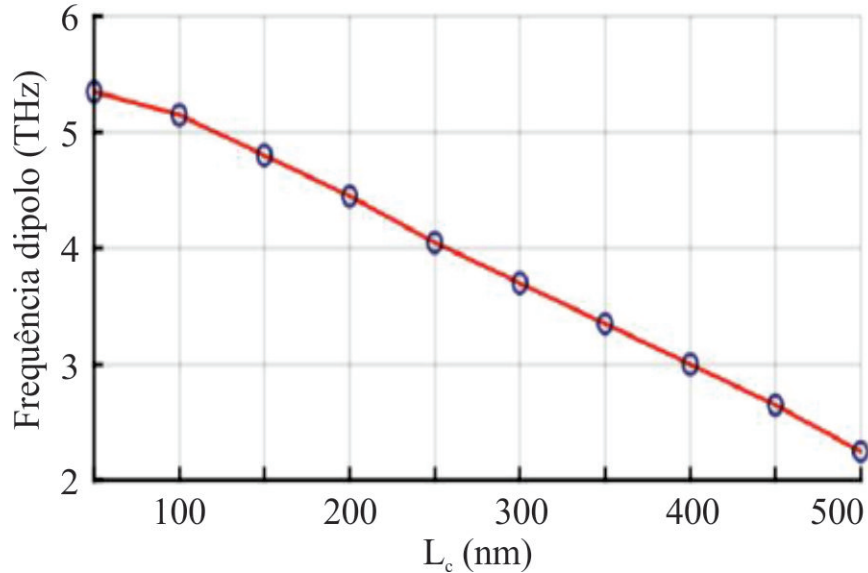


Figura 4.7 – Frequências ressonantes do modo dipolo em relação à largura L_c do corte horizontal e $w_c = 100$ nm $R = 600$ nm, $w = 200$ nm, $L = 1500$ nm, $g = 5$ nm e $\epsilon_F = 0,15$ eV.

4.1.2 Ressonador com cortes laterais em 45°

1 cortes duplos em 45° com larguras de 100 nm e comprimentos de 200 nm foram
 2 feitos no ressonador (ver Figura 3.5c). As características em frequência e as distribuições
 3 de campo da propagação de SPPs para quatro frequências (5,4 THz, 5,3 THz, 7,3 THz e
 4 7,3 THz) estão presentes nas figuras 4.7 a-e, respectivamente.

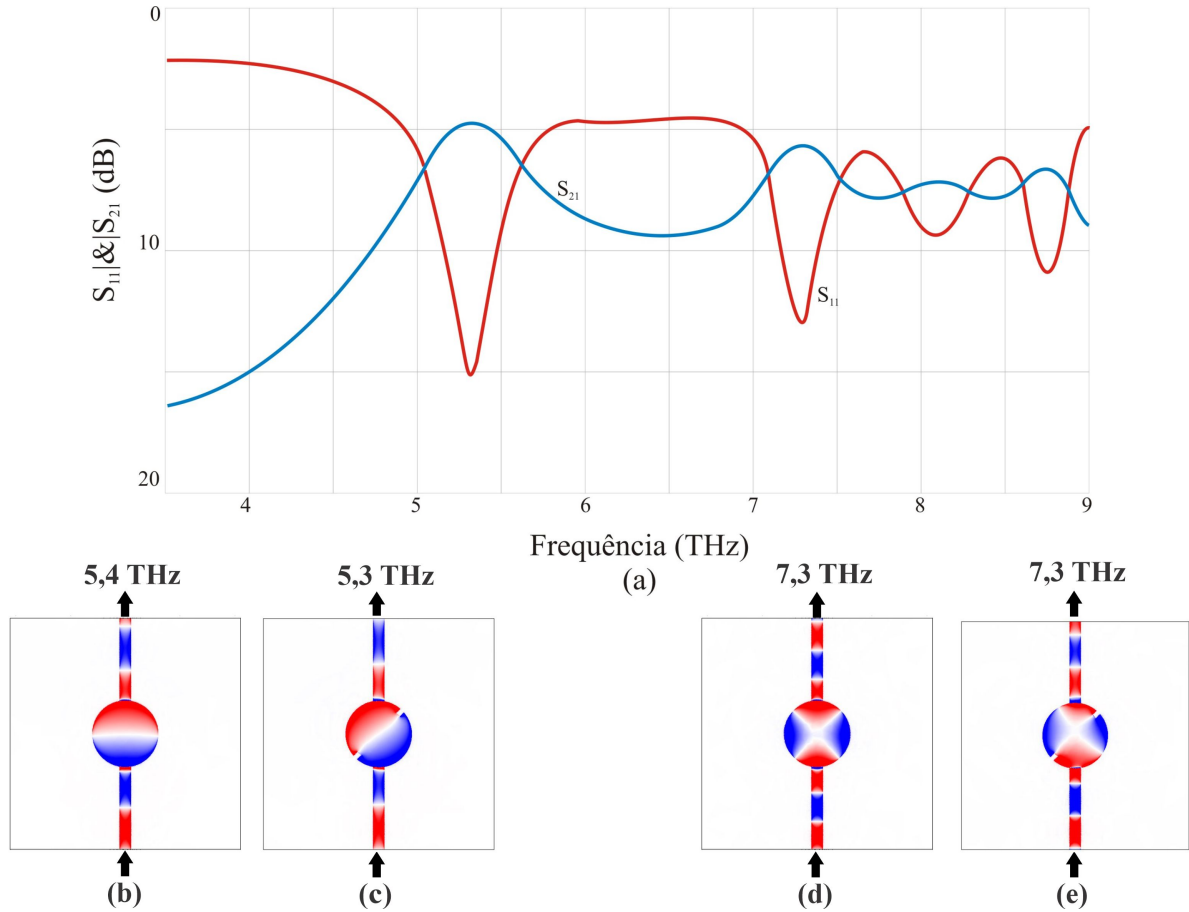


Figura 4.8 – Coeficientes de transmissão e reflexão para a estrutura com cortes laterais em 45° , $w_c = L_c = 100$ nm e $\epsilon_f = 0,15$ eV e distribuição de campo elétrico da componente E_z em b) 5,4 THz modo dipolo sem corte, c) 5,3 THz modo dipolo com corte em 45° , d) 7,3 THz modo quadrupolo sem corte e e) 7,3 THz modo quadrupolo com corte em 45° $\epsilon_f = 0,15$ eV.

5 Todos os outros parâmetros, tanto geométricos como físicos são mantidos fixos,
 6 ou seja, $R = 600$ nm, $w = 200$ nm, $L = 1500$ nm, $g = 5$ nm e $\epsilon_F = 0,15$ eV. Observa-se
 7 que o dispositivo começa a operar na frequência de ressonância do modo dipolo em 5,3
 8 THz (Figura 4.7 a). Desta forma, é importante frisar que a inclinação não é um fator que
 9 afetou a frequência de ressonância do dispositivo, haja vista, a diferença é mínima em
 10 relação ao dispositivo sem corte. Além disso, as demais frequências de ordem superior
 11 modos (hexapolo e octapolo) sofrem distorções devido também às reflexões múltiplas com
 12 interferência destrutiva causada pela influência dos cortes laterais em 45° .

1 5 Conclusão

2 Neste trabalho foi elaborado um filtro baseado em grafeno, depositado sobre uma
 3 superfície de SiO_2 e Si operando na faixa THz. Começamos o trabalho estruturando o
 4 dispositivo no software Comsol, onde a mesma possui dois guias de onda retangulares
 5 acoplados frontalmente a um ressonador circular depositado sobre substrato dielétrico
 6 compostos SiO_2 e Si . Onde o guia de onda composto de grafeno é capaz de suportar o
 7 modo de propagação SPP. Sendo assim, através das equações de Maxwell e as condições
 8 de contorno, bem como do método de elementos finitos (FEM) possibilitou-se a análise
 9 numérica do dispositivo.

10 Desta forma, realizamos a análise do dispositivo sem corte, onde observou-se que
 11 o mesmo comporta-se como filtro eletromagnético, onde seu princípio de funcionamento
 12 está baseado em ondas plasmônicas de grafeno que excitam os seus respectivos modos
 13 dipolos 5,4 THz, quadrupolo 7,3 THz, 8,1 THz (transição do modo quadrupolo para o
 14 hexapolo) 8,8 THz hexapolo e 9,7 THz octapolo. Além disso, podemos observar no decorrer
 15 do trabalho que há uma mudança significativa na frequência de ressonância do modo
 16 dipolo e quadrupolo quando realizamos cortes horizontais, no entanto ao realizamos cortes
 17 inclinados em 45° , percebemos que não alteração expressiva na frequência de ressonância
 18 tomando como referência o dispositivo sem corte para ambos os casos.

19 Em seguida, realizamos corte no ressonador para analisarmos a interferência do corte
 20 na transmissão. Podemos detectar que à medida em que aumentamos o corte diminuimos
 21 a transmissão, bem como a frequência de ressonância. Ao analisarmos o dispositivo com
 22 cortes horizontais laterais percebemos uma perda de inserção de -4 dB. Tais perdas
 23 de inserção são ocasionadas devido múltiplas reflexões nas bordas dos cortes laterais no
 24 ressonador as frequências de ordem superior dos modos (quadrupolo, hexapolo e octapolo)
 25 extingue devido as reflexões múltiplas que interferem de maneira destrutiva que ocorrem
 26 devido a interferência do corte.

27 Demonstramos no decorrer do trabalho uma solução factível na utilização de grafeno
 28 para aplicações em dispositivos plasmônicos em especial nano-filtros que operem na região
 29 THZ. Com isso, mostramos que o grafeno é opção para dispositivos plasmônicos com alta
 30 possibilidade de revolução no mercado.

1 **Trabalhos futuros**

- 2 • Variação do gap em relação ao filtro de frequência
- 3 • Variação do potencial químico na estrutura do dispositivo
- 4 • Criação de novos dispositivos baseados no grafeno exemplo: swicth

5 **Trabalhos realizados durante o período de mestrado**

- 6 • ARTIGO APRESENTADO: INTERNATIONAL HASANKEYF SCIENTIFIC RESE-
- 7 ARCH AND INNOVATION CONGRESS 29-30 APRIL, 2023 BATMAN/TURKEY



Figura 5.1 – ARTIGO INTERNATIONAL HASANKEYF SCIENTIFIC RESEARCH AND INNOVATION CONGRESS

Referências

- [1] A. J. Zarbin and M. M. Oliveira, “Nanoestruturas de carbono (nanotubos, grafeno): Quo vadis?,” *Química Nova*, vol. 36, pp. 1533–1539, 2013. Citado 2 vezes nas páginas 14 e 22.
- [2] M. G. PALACIO *et al.*, “Estudo das propriedades do grafeno: do conhecimento teórico as aplicações,” *ETIC-ENCONTRO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA-ISSN 21-76-8498*, vol. 15, no. 15, 2019. Citado na página 14.
- [3] A. K. Geim and K. S. Novoselov, “The rise of graphene,” *Nature materials*, vol. 6, no. 3, pp. 183–191, 2007. Citado na página 14.
- [4] V. Dmitriev and C. M. do Nascimento, “Planar thz electromagnetic graphene pass-band filter with low polarization and angle of incidence dependencies,” *Applied Optics*, vol. 54, no. 6, pp. 1515–1520, 2015. Citado 2 vezes nas páginas 14 e 27.
- [5] M. Wang and E.-H. Yang, “Thz applications of 2d materials: Graphene and beyond,” *Nano-Structures & Nano-Objects*, vol. 15, pp. 107–113, 2018. Citado na página 14.
- [6] S. Asgari, Z. G. Kashani, and N. Granpayeh, “Tunable nano-scale graphene-based devices in mid-infrared wavelengths composed of cylindrical resonators,” *Journal of Optics*, vol. 20, no. 4, p. 045001, 2018. Citado na página 14.
- [7] G. Wang, H. Lu, X. Liu, D. Mao, and L. Duan, “Tunable multi-channel wavelength demultiplexer based on mim plasmonic nanodisk resonators at telecommunication regime,” *Optics Express*, vol. 19, no. 4, pp. 3513–3518, 2011. Citado na página 14.
- [8] H. Zhuang, F. Kong, K. Li, and S. Sheng, “Plasmonic bandpass filter based on graphene nanoribbon,” *Applied optics*, vol. 54, no. 10, pp. 2558–2564, 2015. Citado na página 14.
- [9] S. Asgari and N. Granpayeh, “Tunable plasmonically induced reflection in graphene-coupled side resonators and its application,” *Journal of Nanophotonics*, vol. 11, no. 2, pp. 026012–026012, 2017. Citado na página 14.
- [10] H. S. Ferreira and M. d. C. Rangel, “Nanotecnologia: aspectos gerais e potencial de aplicação em catálise,” *Química nova*, vol. 32, pp. 1860–1870, 2009. Citado na página 16.
- [11] L. E. d. S. d. SANTOS *et al.*, “Desenvolvimento de célula eletrolítica nanoestruturada baseada em mandioca/lítio e eletrodos de nanotubos de carbono,” 2019. Citado na página 16.

- [12] R. C. Gomes, V. A. A. Pastore, O. A. Martins, and G. F. Biondi, “Aplicações da nanotecnologia na indústria de alimentos. uma revisão,” *Revista Brasileira de Higiene e Sanidade Animal*, vol. 9, no. 1, pp. 1–8, 2015. Citado na página 16.
- [13] I. Miles and E. R. Leite, “Nanotecnologia: oportunidade para a indústria e novas qualificações profissionais,” 2015. Citado na página 16.
- [14] E. P. Lima, “Análise e projeto de acopladores de guia de onda plasmônico,” 2019. Citado 2 vezes nas páginas 17 e 25.
- [15] E. de Maxwell, “Maxwell e a física-matemática,” Citado na página 17.
- [16] A. P. B. Oberziner *et al.*, “As equações de maxwell e aplicações,” 2008. Citado na página 17.
- [17] J. T. Oden and J. N. Reddy, *An introduction to the mathematical theory of finite elements*. Courier Corporation, 2012. Nenhuma citação no texto.
- [18] C. A. Balanis, *Advanced engineering electromagnetics*. John Wiley & Sons, 2012. Citado na página 17.
- [19] M. J. Bueno *et al.*, “Propriedades eletrônicas de grafeno com defeitos,” 2011. Citado 2 vezes nas páginas 8 e 18.
- [20] J. Segundo and E. O. Vilar, “Grafeno: Uma revisão sobre propriedades, mecanismos de produção e potenciais aplicações em sistemas energéticos,” *Revista Eletrônica de Materiais e Processos*, vol. 11, no. 2, pp. 54–57, 2016. Citado 2 vezes nas páginas 18 e 19.
- [21] W. O. P. Castro *et al.*, “Dispositivos não-recíprocos baseados em grafeno na região de thz,” 2019. Citado 8 vezes nas páginas 8, 18, 20, 21, 23, 24, 30 e 31.
- [22] J. S. F. Camargos, A. de Oliveira Semmer, and S. N. da Silva, “Características e aplicações do grafeno e do óxido de grafeno e as principais rotas para síntese,” *The Journal of Engineering and Exact Sciences*, vol. 3, no. 8, pp. 1118–1130, 2017. Citado 4 vezes nas páginas 8, 18, 19 e 20.
- [23] A. OLIVEIRA, H. KITAMURA, and V. AGUIAR, “Estudo e avaliação de métodos de síntese e caracterização de grafeno,” *Blucher Chemical Engineering Proceedings*, vol. 1, no. 3, pp. 2365–2370, 2015. Citado 4 vezes nas páginas 8, 19, 20 e 21.
- [24] F. d. C. Fim, “Síntese e propriedades de nanocompósitos de polietileno/nanolâminas de grafeno obtidos através de polimerização in situ,” 2012. Citado na página 19.

- [25] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D.-e. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, and A. A. Firsov, “Electric field effect in atomically thin carbon films,” *science*, vol. 306, no. 5696, pp. 666–669, 2004. Citado na página 20.
- [26] C. L. G. P. Martins, “Síntese de grafeno e sua redução pelo método de esfoliação química,” B.S. thesis, Universidade Federal do Rio Grande do Norte, 2020. Citado na página 21.
- [27] L. S. Montagna *et al.*, “Síntese de nanocompósitos de polipropileno/grafite obtidos por meio da polimerização in situ,” 2010. Citado 2 vezes nas páginas 8 e 21.
- [28] M. O. d. Castro, “Síntese de grafeno pelo método cvd,” 2011. Citado na página 21.
- [29] I. S. Lopez, R. P. H. López, B. P. González, A. J. Hernández, I. Y. Gutiérrez, and L. A. Carrasco, “Síntesis y caracterización del grafeno, a partir del método de hummers y reducción térmica con ácido ascórbico,” *XII ENCUESTRO PARTICIPACIÓN DEL LA MUJER EN LA CIENCIA*, 2015. Citado na página 21.
- [30] M. J. Allen, V. C. Tung, and R. B. Kaner, “Honeycomb carbon: a review of graphene,” *Chemical reviews*, vol. 110, no. 1, pp. 132–145, 2010. Citado 2 vezes nas páginas 8 e 22.
- [31] K. E. F. Maximiano, “Caracterização de grafeno cvd por imageamento em ângulo de brewster,” 2020. Citado 2 vezes nas páginas 8 e 22.
- [32] M. D. d. O. Souza, “Estudo teórico de materiais à base de grafeno modificado para aplicações em eletrocatalise,” 2020. Citado 4 vezes nas páginas 8, 22, 23 e 24.
- [33] C. L. A. Araujo, “Grafeno: composição, propriedades, aplicabilidade e perspectivas,” *Revista Brasileira de Processos Químicos*, vol. 3, no. 2, pp. 33–47, 2022. Citado 3 vezes nas páginas 22, 23 e 27.
- [34] T. Wassmann, A. P. Seitsonen, A. M. Saitta, M. Lazzeri, and F. Mauri, “Clar’s theory, π -electron distribution, and geometry of graphene nanoribbons,” *Journal of the American Chemical Society*, vol. 132, no. 10, pp. 3440–3451, 2010. Citado na página 23.
- [35] D. Zhan, J. Yan, L. Lai, Z. Ni, L. Liu, and Z. Shen, “Engineering the electronic structure of graphene,” *Advanced Materials*, vol. 24, no. 30, pp. 4055–4069, 2012. Citado na página 23.
- [36] P. R. Wallace, “The band theory of graphite,” *Physical review*, vol. 71, no. 9, p. 622, 1947. Citado na página 24.
- [37] G. S. de Melo, “Ufpa/itec/ppgee,” Citado 4 vezes nas páginas 24, 25, 26 e 27.

- [38] J. L. Huamaní Correa, “Estrutura eletrônica e propriedades de transporte quântico em nanoestruturas de grafeno e siliceno,” 2014. Citado 3 vezes nas páginas 8, 24 e 25.
- [39] C. R. M. d. SANTOS *et al.*, “Efeitos de faraday e kerr em estruturas periódicas metálicas: Grafeno na faixa de thz e ouro-dielétrico-bi: Yig na faixa do infravermelho,” 2018. Nenhuma citação no texto.
- [40] A. Andrade-Neto, A. Ribeiro, and A. Jorio, “Relação de dispersão para os plásmo-polárítos de superfície em uma interface plana metal/dielétrico,” *Revista Brasileira de Ensino de Física*, vol. 39, 2017. Citado 3 vezes nas páginas 8, 25 e 26.
- [41] A. N. Grigorenko, M. Polini, and K. Novoselov, “Graphene plasmonics,” *Nature photonics*, vol. 6, no. 11, pp. 749–758, 2012. Citado na página 26.
- [42] E. J. M. C. B. Dias, *Efeitos plasmônicos em estruturas unidimensionais e em nanoestruturas à base de grafeno*. PhD thesis, 2016. Citado na página 26.
- [43] S. Sheng, K. Li, F. Kong, and H. Zhuang, “Analysis of a tunable band-pass plasmonic filter based on graphene nanodisk resonator,” *Optics Communications*, vol. 336, pp. 189–196, 2015. Citado 4 vezes nas páginas 8, 27, 29 e 31.
- [44] F. Kneubil, “Modelo de drude e a interação da luz com a matéria,” *Caderno Brasileiro de Ensino de Física*, vol. 38, no. 1, pp. 775–802, 2021. Citado na página 28.
- [45] G. W. Hanson, “Dyadic green’s functions and guided surface waves for a surface conductivity model of graphene,” *Journal of Applied Physics*, vol. 103, no. 6, p. 064302, 2008. Citado na página 28.
- [46] H. Yan, F. Xia, W. Zhu, M. Freitag, C. Dimitrakopoulos, A. A. Bol, G. Tulevski, and P. Avouris, “Infrared spectroscopy of wafer-scale graphene,” *Acs Nano*, vol. 5, no. 12, pp. 9854–9860, 2011. Citado na página 28.
- [47] J. Horng, C.-F. Chen, B. Geng, C. Girit, Y. Zhang, Z. Hao, H. A. Bechtel, M. Martin, A. Zettl, M. F. Crommie, *et al.*, “Drude conductivity of dirac fermions in graphene,” *Physical Review B*, vol. 83, no. 16, p. 165113, 2011. Citado na página 28.
- [48] S. He, X. Zhang, and Y. He, “Graphene nano-ribbon waveguides of record-small mode area and ultra-high effective refractive indices for future vlsi,” *Optics express*, vol. 21, no. 25, pp. 30664–30673, 2013. Citado na página 29.
- [49] P. A. D. Gonçalves and N. M. Peres, *An introduction to graphene plasmonics*. World Scientific, 2016. Citado na página 32.