

TD 03/2025

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

Gildenilson Mendes Duarte

**Dispositivos de estruturas planares periódicas
baseadas em ressonadores de fosforeno na faixa
de infravermelho**

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

2025

Gildenilson Mendes Duarte

**Dispositivos de estruturas planares periódicas baseadas em
ressonadores de fosforeno na faixa de infravermelho**

Tese submetida à Banca Examinadora do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Elétrica da UFPA como requisito para obtenção do título de Doutor em Engenharia Elétrica, Área de concentração: Telecomunicações, Linha de pesquisa: Eletromagnetismo Aplicado.

Orientador: Prof. Dr. Victor Alexandrovich Dmitriev

Coorientador: Prof. Dr. Cristiano Braga de Oliveira

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

2025

**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)**

D812d Duarte, Gildenilson Mendes.
Dispositivos de estruturas planares periódicas baseadas em
ressonadores de fosforeno na faixa de infravermelho / Gildenilson
Mendes Duarte. — 2025.
78 f. : il. color.

Orientador(a): Prof. Dr. Victor Alexandrovich Dmitriev
Coorientador(a): Prof. Dr. Cristiano Braga de Oliveira
Tese (Doutorado) - Universidade Federal do Pará, Instituto de
Tecnologia, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Elétrica,
Belém, 2025.

1. Fosforeno. 2. Estruturas periódicas. 3. Filtros
eletromagnéticos. 4. Infravermelho. 5. Independência de
polarização. I. Título.

CDD 600

TD 03/2025

Gildenilson Mendes Duarte

Dispositivos de estruturas planares periódicas baseadas em ressonadores de fosforeno na faixa de infravermelho

APROVADO EM: 27/02/2025

**Prof. Dr. Victor Alexandrovich
Dmitriev**
Orientador - PPGEE/UFPA

Prof. Dr. Cristiano Braga de Oliveira
(Coorientador / Avaliador Externo - IFRR)

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

**Prof. Dr. Nilton Rodolfo Nascimento
Melo Rodrigues**
(Avaliador Externo ao PPGEE/UFPA)

**Prof. Dr. Licinius Dimitri Sá de
Alcantara**
(Avaliador Externo - UFRA)

UFPA / ITEC / PPGEE
Campus Universitário do Guamá
Belém-Pará-Brasil
2025

Louvado e Glorificado seja Deus pela conclusão deste trabalho. Dedico este trabalho à minha Mãe Abgail, à minha filha Melissa e à minha esposa Marcilene.

Agradecimentos

Louvado e Glorificado seja Deus pela conclusão deste trabalho.

Meus agradecimentos à minha Mãe Abgail, à minha Filha Melissa e à minha Esposa Marcilene, por terem sempre me motivado e me apoiado nos momentos mais difíceis de minha vida.

A todos os meus familiares, pois sempre estiveram torcendo por mim.

À Universidade Federal do Pará (UFPA), em especial, ao meu orientador Prof. Dr. Victor Alexandrovich Dmitriev, pela oportunidade de desenvolver este trabalho, pelo encorajamento e incentivo, pelos ensinamentos, pela paciência e por me conceder o grande privilégio em receber suas orientações.

Ao meu coorientador Prof. Dr. Cristiano Braga de Oliveira, pelas valiosas orientações, por me encorajar em momentos difíceis e por ser mais que um coorientador.

Ao PPGEE, pela oportunidade de cursar este doutorado.

À Universidade Federal Rural da Amazônia (UFRA) por me conceder a licença necessária para dedicação a esse doutorado.

A todos os professores do PPGEE os quais, foram de suma importância para a composição de todo o meu embasamento teórico para este trabalho.

À Dra. Ana Claudia Bentes, ao Dr. Benedito, à assistente social Rosana e ao Dr. Rodrigo D'Oliveira por nunca terem desistido de mim.

Ao casal pastoral da Igreja Adventista do Sétimo Dia (IASD), Pedro Guedelha e Eliane Guedelha, pelos sábios conselhos e grande apoio.

Ao irmão Marcelo Furtado da IASD-Augusto Montenegro, pela sensibilidade ao ter me proporcionado tranquilidade financeira no momento em que mais necessitei.

A todos os irmãos da IASD-Augusto Montenegro, por terem sempre orado por mim.

Ao Prof. Dr. Luís Carlos Bassalo Crispino, por ter sido o meu mentor acadêmico durante toda a minha trajetória de discente na Universidade Federal do Pará.

Ao Prof. Dr. José Gouvêa Luiz, por ter acreditado em mim ao me recomendar ao PPGEE da UFPA.

A todos os colegas do Laboratório de Nanoeletrônica e Nanofotônica (Nanotribo) pelas importantes trocas de informações e também pelos momentos de descontração.

Especialmente aos amigos: Prof. Dr. Wagner Ormanes Palheta Castro, Prof. Dr. Geraldo de Souza Melo, Prof. Dr. Herson Rocha, Prof. Dr. João Andrade, Prof. Dr. Diego Miranda, Prof. Dr. Saulo Martins, Prof. Dr. Júlio César Santos e à Amanda, pelas grandiosas contribuições, incentivo e descontrações desde minha entrada no grupo de Nanoeletrônica e Nanofotônica até a conclusão deste trabalho.

Aos demais colegas: Tiago, Francisco, Luiz, Gabriel, Erik, Mel, Augusto e Dalila.

"O primeiro gole da taça da ciência natural gera ateus, mas, no fundo da taça Deus está esperando." (Autor: Wernner Heisenberg, 1932)

Resumo

1

2 As propriedades anisotrópicas do fosforeno podem ser exploradas para o desenvolvimento
3 de dispositivos optoeletrônicos para as mais variadas aplicações. Este trabalho apresenta
4 modelagem de dispositivos que consistem em estruturas periódicas planares baseadas
5 em fosforeno na faixa de infravermelho. Com a modelagem dessas estruturas realizamos
6 estudos relacionados à verificação de níveis de transmitância e de ressonâncias. Analisamos
7 a eficácia da geometria de ressonadores de fosforeno e também o controle das ressonâncias
8 por meio da dopagem eletrônica do material. A primeira estrutura proposta consiste
9 em um filtro, cuja célula unitária possui uma camada de fosforeno, em forma de disco,
10 sobre um substrato dielétrico de SiO_2 , com funcionamento dependente da
11 polarização da onda. A segunda estrutura possui uma célula unitária que consiste em
12 duas folhas de fosforeno, também em forma de disco, acopladas, em sanduíche, a um
13 substrato dielétrico de SiO_2 , com funcionamento de filtro. A terceira estrutura consiste
14 em duas folhas quadradas de fosforeno, com dimensões diferentes, também acopladas
15 a um substrato dielétrico de SiO_2 , com função de um filtro de banda dupla. A quarta
16 estrutura é um filtro cuja célula unitária consiste em duas folhas quadradas idênticas
17 de fosforeno, em sanduíche com uma fina folha dielétrica de h-BN. Nesse filtro, folha
18 quadrada inferior foi rotacionada em 90° em relação à de cima. Tal estrutura fornece uma
19 curva de transmitância com uma frequência de ressonância dipolar, independentemente
20 da polarização da onda incidente. Os resultados numéricos estão em bom acordo com os
21 resultados analíticos obtidos pela teoria dos modos acoplados temporal (TCMT). Além da
22 independência da polarização, esse dispositivo possui uma baixa dependência do ângulo
23 de incidência da onda. Essa quarta estrutura pode ser usada como filtro, interruptor,
24 modulador e sensor. Verificamos que essas quatro estruturas propostas, por serem baseadas
25 em fosforeno, pode ser dinamicamente ajustável em faixas de frequências maiores do que
26 as que são feitas baseadas em grafeno. Todos os resultados foram obtidos por meio de
27 simulações eletromagnéticas que utilizam o método de elementos finitos.

28 PALAVRAS-CHAVE: Fosforeno; Estruturas periódicas; Filtros eletromagnéticos; Infraver-
29 melho, Independência de polarização.

Abstract

1

2 The anisotropic properties of phosphorene can be exploited for the development of opto-
3 electronic devices for a wide range of applications. This work presents device modeling
4 consisting of periodic planar structures based on phosphorene in the infrared range. By
5 modeling these structures, we performed studies related to verifying levels of transmittance
6 and resonances. We analyzed the effectiveness of phosphorene resonator geometries and
7 also the control of resonances through electronic doping of the material. The first proposed
8 structure consists of a filter, whose unit cell has a phosphorene layer, in the form of a
9 disk, on a SiO_2 dielectric substrate, with operation dependent on the polarization of the
10 wave. The second structure has a unit cell that consists of two phosphorene sheets, also in
11 disk form, coupled in a sandwich configuration to a SiO_2 dielectric substrate, with filter
12 operation. The third structure consists of two square phosphorene sheets with different
13 dimensions, also coupled to a SiO_2 dielectric substrate, with the function of a dual-band
14 filter. The fourth structure is a filter whose unit cell consists of two identical square
15 phosphorene sheets, in a sandwich configuration with a thin h-BN dielectric sheet. In this
16 filter, the lower square sheet was rotated by 90° with respect to the upper one. Such a
17 structure provides a transmission curve with a dipolar resonance frequency, regardless
18 of the polarization of the incident wave. The numerical results are in good agreement
19 with the analytical results obtained by the Temporal Coupled Mode Theory (TCMT). In
20 addition to polarization independence, this device has a low dependence on the angle of
21 incidence of the wave. This fourth structure can be used as a filter, switch, modulator, and
22 sensor. We verified that these four proposed structures, being based on phosphorene, can
23 be dynamically adjusted in frequency ranges greater than those made based on graphene.
24 All results were obtained through electromagnetic simulations using the finite element
25 method.

26 KEYWORDS: Phosphorene; Periodic structure; Electromagnetic filters; Infrared; Polariza-
27 tion independence.

Lista de ilustrações

Figura 2.1 – Espectro eletromagnético com comparativo entre os valores dos <i>gaps</i> de energia para semicondutores 2D dicalcogenetos de transição (TDMC), fosforeno e grafeno.	27
Figura 2.2 – (a) Imagem do cristal de um bloco (<i>bulk</i>) de BP. (b) Vista lateral em perspectiva multicamadas de fosforeno. (c) Vista superior e lateral multicamadas de fosforeno. 'a' e 'b' representam os parâmetros de rede. As linhas pontilhadas delimitam a célula unitária do fosforeno. (d) Representação do arranjo estrutural dos átomos de fósforo ilustrando os ângulos de ligação θ_1 e θ_2 entre os átomos e o comprimento das ligações covalentes R_1 e R_2 entre átomos de diferentes planos e de mesmo plano da rede cristalina. As cores diferentes dos átomos representam os átomos de fósforo localizados em planos diferentes.	28
Figura 2.3 – Esquematização de métodos para a síntese de materiais 2D. (a) Clivagem micromecânica e (b) deposição química de vapor (CVD).	29
Figura 2.4 – Vantagens e desvantagens dos métodos de síntese mais utilizados para a obtenção do fosforeno.	29
Figura 2.5 – Curvas da parte real da condutividade do fosforeno nas direções armchair (σ_{xx}) e zig-zag (σ_{yy}).	31
Figura 2.6 – Curvas da parte imaginária da condutividade do fosforeno nas direções armchair (σ_{xx}) e zig-zag (σ_{yy}).	31
Figura 2.7 – Variação da condutividade com a dopagem eletrônica.	32
Figura 3.1 – (a) Modelo esquemático da estrutura cristalina do fosforeno. (b) Estrutura periódica tridimensional da banda dupla controlável do filtro. (c) Vista superior da célula unitária e parâmetros estruturais $L = 220$ nm, $R = 80$ nm. Adaptado de [40]	34
Figura 3.2 – (a) Visualização geral do modelo esquemático da célula unitária com dois discos ressonadores, mostrando os seus parâmetros geométricos. (b) Vista lateral da célula unitária. Adaptado de [41]	35
Figura 3.3 – Modelo esquemático da estrutura com dois diferentes ressonadores quadrados de fosforeno. (a) Modelo tridimensional da célula unitária da estrutura mostrando a direção do vetor de onda. (b) Vista lateral da célula unitária mostrando os parâmetros geométricos da estrutura. . . .	36
Figura 3.4 – (a) Rede cristalina do fosforeno; (b) Estrutura periódica do dispositivo; (c) Visão superior da célula unitária; (d) Visão da face de baixo da célula unitária com o quadrado de fosforeno rotacionado em 90° . Adaptado de [42]	37

Figura 3.5 – Condutividade anisotrópica de uma camada de fosforeno com densidade de portadores de carga $n = 2 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$, as linhas sólidas denotam a parte real (Re) de σ_{xx} e σ_{yy} , as linhas tracejadas se referem à parte imaginária (Im).	39
Figura 3.6 – Fluxograma das etapas do processamento no COMSOL <i>Multiphysics</i> e <i>Ansys HFSS</i>	41
Figura 4.1 – Curvas de transmissão para a onda polarizada ao longo da direção ZZ para $\phi = 0^\circ$, e AC para $\phi = 90^\circ$. Adaptado de [40]	42
Figura 4.2 – Curva de transmissão para a onda polarizada para o ângulo $\phi = 45^\circ$. Adaptado de [40]	43
Figura 4.3 – Distribuição da componente E_z do campo elétrico no disco de fosforeno. 4.3(a) e 4.3(d) para $\phi = 0^\circ$ e $\phi = 90^\circ$, respectivamente. 4.3(b) e 4.3(c) para $\phi = 45^\circ$. Adaptado de [40]	44
Figura 4.4 – Variação da transmitância e da frequência de ressonância para valores de densidade de portadores de carga n iguais a $n = 1,8 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$, $n = 2 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ e $n = 2,2 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$. Adaptado de [40]	45
Figura 4.5 – Curva de transmissão somente para o disco ressonador superior de fosforeno ($R = 25 \text{ nm}$) no substrato dielétrico. Adaptado de [41]	46
Figura 4.6 – Curva de transmissão somente para o disco ressonador de fosforeno no substrato dielétrico para $R = 35 \text{ nm}$. Adaptado de [41]	46
Figura 4.7 – Coeficiente de transmissão para os dois discos de fosforeno acoplados em sanduíche com o dieletrico. Adaptado de [41]	47
Figura 4.8 – Coeficiente de transmissão para estrutura com dois discos de fosforeno acoplados em sanduíche com o dieletrico de SiO_2 com n variável. Adaptado de [41]	48
Figura 4.9 – Variação dos níveis de transmitância, somente para o quadrado superior Q_1 , com o lado $l = l_1$ variável.	49
Figura 4.10–Variação dos níveis de transmitância, somente para o quadrado inferior Q_2 , com o lado $l = l_2$ variável.	49
Figura 4.11–Variação do fator Q com as dimensões do ressonador quadrado de fosforeno superior Q_1 com lado $l = l_1$	50
Figura 4.12–Desenho esquemático da variação da geometria de um ressonador quadrado até atingir a forma de um disco. (a) Ressonador na forma quadrada (forma inicial com $a = 0$). (b) Ressonador com os "cantos"abertos para $a \neq 0$ e (c) Ressonador na forma de um disco com $r = R$ e $a = C = 2\pi R$, com $\alpha = 2\pi \text{ rad}$ ($r/R = 1$).	50
Figura 4.13–Variação do nível de transmitância com a geometria do quadrado superior Q_1 de lado $l = l_1$, em função da frequência.	51

Figura 4.14–Variação do fator Q com a geometria do quadrado superior Q_1 com lado $l = l_1$	51
Figura 4.15–Variação do nível de transmitância com a geometria do quadrado inferior Q_2 com lado $l = l_2$, em função da frequência.	52
Figura 4.16–Variação do fator Q com geometria do quadrado inferior Q_2 com lado $l = l_2$	52
Figura 4.17–Níveis de transmitância devido aos ressonadores quadrados de fosforeno Q_1 e Q_2 . Em azul, transmitância devido somente ao ressonador Q_1 isolado. Em preto, transmitância devido ao ressonador Q_2 isolado. Em vermelho, transmitância devido ao acoplamento dos ressonadores Q_1 e Q_2	53
Figura 4.18–Distribuição da componente do campo elétrico e da corrente elétrica na superfície. (a)-(b) para os os ressonadores separados, (c)-(d) Para os ressonadores acoplados.	54
Figura 4.19–Espectros de transmitância e reflectância para a estrutura com uma folha quadrada de fosforeno posicionada sobre o dielétrico para os ângulos de polarização ϕ iguais a 0° , 45° e 90° . Modificado de [42]	55
Figura 4.20–(a)-(d) Distribuição da componente E_z do campo elétrico e a corrente na superfície quadrada de fosforeno para os ângulos de polarização 0° , 45° e 90° . A camada de fosforeno é posicionada sobre a folha dielétrica de h-BN. Modificado de [42]	56
Figura 4.21–Vista lateral da distribuição da componente E_z do campo elétrico na superfície do quadrado de fosforeno com o substrato dielétrico de h-BN. Modificado de [42]	57
Figura 4.22–Espectros de transmitância e reflectância para a polarização em $\phi = 0^\circ$, $\phi = 45^\circ$ e $\phi = 90^\circ$ para o caso de duas camadas de fosforeno com o substrato dielétrico entre ambas. Modificado de [42]	58
Figura 4.23–(a) Espectros de transmitância e reflectância para $\phi = 0^\circ$, $\phi = 45^\circ$ e $\phi = 90^\circ$, e TCMT analítico representados por pontos verdes; (b) Uma visão da evolução da transmitância para diferentes valores de ϕ , para duas camadas de fosforeno com um substrato dielétrico de h-BN entre ambos, com o quadrado de baixo rotacionado em 90° . Modificado de [42]	59
Figura 4.24–(a)-(f) Distribuição da componente do campo elétrico e da corrente elétrica na superfície, com a configuração de duas camadas de fosforeno com o substrato dielétrico entre ambas para o ângulo de polarização variando em 0° , 45° e 90° . Modificado de [42]	61
Figura 4.25–Vista lateral da distribuição da componente E_z do campo elétrico mostrando os dipolos na superfície das duas camadas de fosforeno com o dielétrico entre eles. Modificado de [42]	63

Figura 4.26–(a) Espectros de transmitância e refletância para ângulos de incidência θ iguais a 0° , 20° , 40° e 60° para ϕ fixado em 0° , (b) Evolução da transmitância com o ângulo de incidência θ para ϕ fixado em 0° . Modificado de [42]	64
Figura 4.27–Espectros de transmitância e refletância para ângulos de incidência θ iguais a 0° , 20° , 40° e 60° para ϕ fixado em 45° . Modificado de [42]	65
Figura 4.28–Fator Q versus ângulo de incidência θ . Modificado de [42]	65
Figura 4.29–Dependência da frequência da transmitância e refletância para h igual a 1 nm, 1,5 nm e 2 nm. Modificado de [42]	66
Figura 4.30–Dependência da frequência da transmitância e refletância para diferentes densidades de portadores de carga do fosforeno. Modificado de [42]	67

Lista de abreviaturas e siglas

SPP	Superfície Plasmônica de Polaritons (Surface Plasmonic Polaritons)
LSP	Superfície Plasmônica Localizada (Localized Surface Plasmons)
BP	Fósforo Negro (Black Phosphorus)
AC	Direção Amchair da estrutura cristalina do fosforeno
ZZ	Direção zig-zag da estrutura cristalina do fosforeno
IR	Infravermelho (Infrared)
THz	Terahertz
bandgap	Intervalo de Banda
CVD	Deposição Química de Vapor (Chemical Vapor Deposition)
2D	Materiais bidimensionais
3D	Materiais tridimensionais
SiO_2	Dióxido de Silício (Sílica)
eV	Elétron-Volt
RF	Rádio Frequência
MEF	Método de Elementos Finitos
HFSS	Simulador de Estruturas de Alta Frequência (High Frequency Structure Simulator)
h-BN	Nitreto de Boro Hexagonal

Lista de símbolos

ϵ_2	Constante dielétrica do semi-espaço não absorvente
n_e	Densidade volumétrica de portadores de carga de semicondutores
n	Densidade superficial de portadores de carga do Fosforeno
n_{ref}	Índice de refração de um material
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
D	Vetor Densidade de fluxo elétrico
E	Vetor campo elétrico
B	Vetor Densidade de fluxo magnético
H	Vetor campo magnético
ρ	Densidade de carga
ρ_s	Densidade superficial de carga
J	Vetor Densidade de corrente
J_{2D}	Vetor Densidade superficial de corrente
σ	Condutividade elétrica de um meio
σ_{jj}	Tensor Condutividade do fosforeno
D_{1,2}	Componente normal da densidade de fluxo elétrico
H_{1,2}	Componente tangencial da intensidade de campo magnético
B_{1,2}	Componente normal da densidade de fluxo magnético
\hat{n}	Vetor normal ao plano de incidência
k	Vetor de onda

k_x	Componente x do vetor de onda
k_y	Componente y do vetor de onda
D	Peso de Drude
σ_{xx}	Condutividade do fosforeno na direção armchair
σ_{yy}	Condutividade do fosforeno na direção zig-zag
η	Taxa de relaxamento do fosforeno
m_0	massa de repouso do elétron
m_x	massa efetiva dos portadores de carga do fosforeno na direção x
m_y	massa efetiva dos portadores de carga do fosforeno na direção y
Δ	energia de bandgap para o fosforeno
γ, η_c, ν_c	Parâmetros de banda para o fosforeno
a	Escala de comprimento do fosforeno (parâmetro de rede)
b	Escala de largura do fosforeno (parâmetro de rede)
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
R_1	Raio do disco superior de fosforeno
R_2	Raio do disco inferior de fosforeno
h	Espessura do dielétrico (substrato para fosforeno)

Sumário

1	INTRODUÇÃO	20
2	ASPECTOS TEÓRICOS	22
2.1	Eletrodinâmica Clássica	22
2.2	Equações de Maxwell	22
2.3	Condições de contorno	25
2.4	Fosforeno	26
2.4.1	Estrutura Cristalina	26
2.4.2	Métodos de Síntese	28
2.4.3	Condutividade do fosforeno	29
2.4.4	Análise da condutividade do fosforeno com a variação da dopagem eletrônica	31
3	METODOLOGIA	33
3.1	Modelagem Numérica do fosforeno nos softwares Ansys HFSS e Comsol Multiphysics	33
3.1.1	Filtro de banda dupla ajustável baseado em fosforeno	34
3.1.2	Filtro de banda dupla com dois discos ressonadores baseados em fosforeno	35
3.1.3	Filtro de banda dupla com dois ressonadores quadrados baseados em fosforeno com dimensões diferentes	35
3.1.4	Filtro de infravermelho de dupla camada de fosforeno planar ajustável, independente da polarização e com baixa dependência do ângulo de incidência.	36
3.2	Tensor condutividade	39
3.2.1	Fator Q	41
4	RESULTADOS NUMÉRICOS	42
4.1	Filtro de banda dupla ajustável baseado em fosforeno	42
4.1.1	Módulo do campo elétrico E_z	43
4.1.2	Variação da dopagem eletrônica	44
4.2	Filtro de banda dupla com dois discos ressonadores baseados em fosforeno	45
4.2.1	Controle por campo elétrico externo	47
4.3	Filtro de banda dupla com dois ressonadores quadrados baseados em fosforeno com dimensões diferentes	48
4.4	Filtro de infravermelho com duas folhas de fosforeno planar ajustável, independente da polarização e com baixa dependência do ângulo de incidência.	55

4.4.1	Uma folha de fosforeno posicionada sobre o substrato de h-BN	55
4.5	Duas folhas quadradas de fosforeno em sanduíche com uma folha de h-BN	58
4.6	Duas folhas quadradas de fosforeno em sanduíche com uma camada de h-BN e com o quadrado inferior rotacionado em 90°	58
4.6.1	Duas folhas quadradas de fosforeno com o quadrado inferior rotacionado em 90°: efeito do ângulo de incidência	63
4.6.2	Controle por campo elétrico externo	66
4.6.3	Novidades da estrutura	67
5	CONCLUSÃO	69
	REFERÊNCIAS	70
	ANEXO A – 1	76
A.1	PRODUTO DA TESE	76
A.1.1	Trabalhos publicados em anais de eventos:	76
A.1.2	Artigo publicado em periódico internacional:	78

1 INTRODUÇÃO

Atualmente, o grafeno, sendo um material com a espessura de um único átomo de carbono [1], [2], está entre os materiais bidimensionais mais estudados. Na literatura encontramos muitos trabalhos sobre dispositivos nanofotônicos de grafeno [3]. A partir de extensas investigações das propriedades do grafeno, bem como suas diversas aplicações, deu-se início à busca de obtenção de outros materiais bidimensionais. Um exemplo são as pesquisas relacionadas ao fósforo negro (*Black Phosphorus* – BP) [4].

Em 2014, um grupo de pesquisadores obteve, com sucesso, monocamadas de BP (o fosforeno) usando técnicas de clivagem micromecânica e deposição química de vapor [5]. A estrutura do fosforeno possui propriedades muito interessantes como a sua alta mobilidade eletrônica, intervalo de banda (*bandgap*) ajustável (0,3 eV para o *bulk* até 2 eV para uma monocamada) e devido à sua anisotropia optoeletrônica [6, 7]. O arranjo cristalino do fosforeno exibe anisotropia devido à estrutura enrugada, que resulta da posição dos átomos de fósforo em sua geometria hexagonal [8].

Superfícies plasmônicas podem ser excitadas no fosforeno e isso demonstra seu potencial em diversas aplicações [9, 10]. O uso de fosforeno no desenvolvimento de dispositivos optoeletrônicos ganhou atenção significativa devido à sua vantagem de aplicabilidade em uma ampla faixa de frequências, incluindo THz e infravermelho [11], [12]. Outra vantagem é a capacidade de ajuste de suas propriedades físicas como, por exemplo, a condutividade. Isso pode ser feito aplicando-se um campo elétrico externo provocando uma dopagem eletrônica de sua estrutura. Esse processo é semelhante ao que é feito no caso do grafeno [13]. Isso permite controlar a interação do fosforeno com ondas eletromagnéticas.

Na literatura, existem vários estudos sobre a modelagem de nanodispositivos optoeletrônicos baseados em fosforeno, utilizando suas propriedades ópticas relacionadas à transmissão e absorção ópticas [14]. Por exemplo, um filtro eletromagnético com ressonadores em forma de disco feitos de fosforeno foi sugerido em [15], absorvedores discutidos em [16]. Já existem pesquisas focadas no desenvolvimento de biossensores plasmônicos contendo heteroestruturas de fosforeno, como discutido em [17], bem como utilizando outros materiais, como discutido em [18–21]. Outro exemplo de aplicação do fosforeno é dado em [22], onde uma estrutura periódica de pares de grafeno-fosforeno elípticos é usada para obter alta absorção plasmônica anisotrópica.

Uma vantagem do fosforeno é que o mesmo pode ser usado em frequências mais altas. No entanto, ao contrário do grafeno, a condutividade do fosforeno é um tensor possuindo anisotropia. Em algumas aplicações, é desejável se ter propriedades isotrópicas em uma estrutura. Em [23], um absorvedor independente de polarização foi projetado

1 usando fosforeno.

2 Neste trabalho, propomos modelagem de quatro estruturas periódicas planares
3 baseadas em fosforeno as quais podem ser usadas. A primeira estrutura proposta possui
4 uma célula unitária que consiste em uma camada de fosforeno, em forma de disco, sobre
5 um substrato dielétrico de SiO_2 , com permissividade dielétrica relativa $\epsilon_r=2,09$. Essa
6 estrutura possui funcionalidade de um filtro dependente da polarização. A segunda estrutura
7 modelada possui uma célula unitária que consiste em duas folhas de fosforeno, também em
8 forma de disco, acopladas em sanduíche, com um substrato dielétrico de SiO_2 com função
9 de filtro com banda dupla, mas com grande diferença entre os coeficientes de transmissão
10 nessas bandas. A terceira estrutura modelada possui célula unitária que consiste em duas
11 folhas quadradas de fosforeno, com dimensões diferentes, também acopladas em sanduíche
12 com um substrato dielétrico de SiO_2 . E por fim, propomos um filtro cuja célula unitária
13 consiste em duas folhas quadradas idênticas de fosforeno, com uma fina folha dielétrica
14 de nitreto de boro hexagonal (h-BN) entre elas e cuja permissividade dielétrica relativa
15 é dada por um tensor. A folha quadrada inferior foi rotacionada 90° em relação à folha
16 superior. Esse dispositivo é um filtro eletromagnético de banda única cujas respostas são
17 independentes da polarização, e com baixa dependência do ângulo de incidência da onda.
18 Esse filtro pode operar nas regiões de THz e IR. Os resultados numéricos foram obtidos
19 por simulações de onda completa usando os solucionadores comerciais eletromagnéticos de
20 elementos finitos COMSOL Multiphysics[®] comercial e o *Ansys* HFSS.

21 Essa tese foi organizada da seguinte forma: Na Seção 2, fizemos uma abordagem
22 teórica em eletrodinâmica clássica, abordamos os métodos de síntese e as propriedades
23 optoeletrônicas do fosforeno, noções básicas de plasmônica e filtros eletromagnéticos. Em
24 seguida, temos na Seção 3, uma descrição da metodologia empregada para a modelagem
25 das estruturas periódicas propostas. Na Seção 4, temos a discussão dos resultados. E por
26 fim, na Seção 5, as conclusões do trabalho.

2 ASPECTOS TEÓRICOS

2.1 Eletrodinâmica Clássica

A teoria da eletrodinâmica clássica abrange fenômenos elétricos, magnéticos, a interação entre seus respectivos campos, bem como a descrição das ondas eletromagnéticas. Com as conclusões de Maxwell a respeito da natureza da luz como propagação de onda eletromagnética, temos a teoria eletromagnética de campos e ondas. Também verifica-se que a óptica também é um campo do eletromagnetismo. A eletrodinâmica clássica é o limite da eletrodinâmica quântica (onde são levados em conta fenômenos na escala atômica). Mesmo nas escalas macroscópicas e mesoscópicas (onde temos um grande número de fótons) e com pequena transferência de *momentum* e de potência, o formalismo clássico geralmente é suficiente na descrição de diversos fenômenos eletromagnéticos nessas escalas [24, 25].

2.2 Equações de Maxwell

Na Eletrodinâmica Clássica, e por meio das equações de Maxwell, a luz é descrita como uma onda eletromagnética. Essa onda apresenta-se na forma de campos elétrico e magnético. No presente trabalho objetivamos modelar nanodispositivos bidimensionais optoeletrônicos, onde temos interações entre luz e matéria. Desse modo, torna-se imprescindível a aplicação dessas equações de Maxwell (aplicadas no sistema internacional de unidades - SI). Essas equações são descritas abaixo. [24–26].

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

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

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

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

onde \mathbf{E} é o vetor campo elétrico, \mathbf{H} é o vetor campo magnético. A relação $\mathbf{E} \equiv \mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ denota o campo elétrico, $\mathbf{D} \equiv \mathbf{D}(\mathbf{r}, t) = \epsilon \mathbf{E}$ o deslocamento elétrico, $\mathbf{H} \equiv \mathbf{H}(\mathbf{r}, t)$ o campo

1 magnético e $\mathbf{B} \equiv \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = \mu_0 \mathbf{H}$ o vetor indução magnética, \mathbf{J} densidade de corrente
 2 elétrica e por fim o escalar ρ densidade de carga elétrica. Se considerarmos um material
 3 2D no plano- xy , podemos escrever as densidades da seguinte maneira:

$$\rho = \rho_{2D} \delta(z), \quad (2.5)$$

$$\mathbf{J} = \mathbf{J}_{2D} \delta(z), \quad (2.6)$$

4 Desta forma, temos \mathbf{J}_{2D} representando a densidade de corrente superficial, sendo
 5 ρ_{2D} a densidade superficial de carga. Para escrevermos a densidade de corrente superficial
 6 para o fosforeno nas direções x e y , por exemplo, dependemos da frequência e de sua
 7 condutividade ótica σ (a qual é descrita na forma tensorial para o fosforeno), com isso
 8 temos a seguinte relação $\mathbf{J}_{2D} = \sigma \mathbf{E}_{(r,t)}$, onde $\mathbf{E}_{(t)}$ indica a componente tangencial do
 9 campo elétrico presente no plano- xy [26].

10 As relações constitutivas trazem as propriedades físicas dos materiais. Desse modo,
 11 as relações entre \mathbf{E} e \mathbf{D} e também entre \mathbf{B} e \mathbf{H} [27], são respectivamente:

$$\mathbf{D} = \epsilon \mathbf{E}, \quad (2.7)$$

$$\mathbf{B} = \mu \mathbf{H}, \quad (2.8)$$

12 onde ϵ e μ são a permissividade elétrica e permeabilidade magnética do meio material [27].
 13 Outra importante relação constitutiva, para a condução eletrônica em materiais, é a lei de
 14 Ohm generalizada,

$$\mathbf{J} = \sigma \mathbf{E}, \quad (2.9)$$

15 onde σ é a condutividade do material.

16 Observa-se que as relações lineares expressas pelas Equações (2.7) e (2.9) devem
 17 ser entendidas como sendo:

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}, t) = \epsilon_0 \int dr' dt' \epsilon(r - r', t - t') \mathbf{E}_{(\mathbf{r}', t')}, \quad (2.10)$$

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}, t) = \int dr' dt' \sigma(r - r', t - t') \mathbf{E}_{(\mathbf{r}', t')}. \quad (2.11)$$

1 As Equações (2.12) e (2.13) mostram, de maneira simples, que o valor de \mathbf{D} e de \mathbf{J} em
 2 uma determinada posição \mathbf{r} e em um instante t , dependem do valor do campo elétrico \mathbf{E}
 3 em todas as posições \mathbf{r}' e num instante $t' < t$ (o que garante o princípio da causalidade)
 4 através das funções de resposta $\epsilon(r - r', t - t')$ e $\sigma(r - r', t - t')$, respectivamente. Por
 5 conseguinte, isso explica tanto a dispersão temporal quanto os efeitos não locais, o que
 6 nos leva à conclusão de que a resposta linear depende da frequência e do *momentum*. No
 7 domínio espacial de Fourier, as Equações acima nos levam às seguintes relações [24–28]:

$$\mathbf{D}(\mathbf{q}, \omega) = \epsilon_0 \epsilon(\mathbf{q}, \omega) \mathbf{E}(\mathbf{q}, \omega), \quad (2.12)$$

$$\mathbf{J}(\mathbf{q}, \omega) = \sigma(\mathbf{q}, \omega) \mathbf{E}(\mathbf{q}, \omega), \quad (2.13)$$

8 onde q é a carga elétrica.

9 A transformada de Fourier para o campo elétrico \mathbf{E} , é dada por:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) = \int \mathbf{E}(\mathbf{q}, \omega) e^{i(\mathbf{q}\mathbf{r} - \omega t)} dt d\mathbf{q}, \quad (2.14)$$

10 De forma análoga, se obtém a relação de mesma natureza para o campo magnético.
 11 Na ausência de cargas e correntes livres (como no espaço livre ou em um meio dielétrico),
 12 as equações de Maxwell são escritas como:

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = 0, \quad (2.15)$$

$$\nabla \times \mathbf{B} = \frac{\epsilon}{c^2} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}, \quad (2.16)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \quad (2.17)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0, \quad (2.18)$$

13 No domínio da frequência, as Equações 2.18 e 2.19, podem ser expressas na forma:

$$\nabla \times \mathbf{B} = -\frac{i(\epsilon\omega)}{c^2} \mathbf{E}, \quad (2.19)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = i\omega \mathbf{B}. \quad (2.20)$$

1 Note que há uma dependência, de forma harmônica, do tempo, em $e^{-i(\omega t)}$ o que
2 permite uma decomposição dos campos por meio de uma expansão da Equação 2.16.

3 2.3 Condições de contorno

4 Até aqui, foram considerados campos eletromagnéticos em um meio homogêneo.
5 No entanto, sempre que um sistema físico envolve diferentes materiais (ou meios), é
6 necessário introduzirmos as condições de contorno apropriadas para cada interface entre
7 esses materiais. Estas condições são obtidas aplicando-se, às equações de Maxwell, o
8 teorema da divergência e o teorema de Stokes, o que resulta nas equações abaixo para
9 os campos elétrico e magnético, e também para o deslocamento elétrico. Assim, para os
10 meios 1 e 2, e para materiais bidimensionais no plano temos [24–28]:

$$(\mathbf{D}_2 - \mathbf{D}_1) \cdot \mathbf{n} = \rho_{2\mathbf{D}}, \quad (2.21)$$

$$(\mathbf{B}_2 - \mathbf{B}_1) \cdot \mathbf{n} = 0, \quad (2.22)$$

$$\mathbf{n} \times (\mathbf{E}_2 - \mathbf{E}_1) = 0, \quad (2.23)$$

$$\mathbf{n} \times (\mathbf{H}_2 - \mathbf{H}_1) = \mathbf{J}_{2\mathbf{D}}, \quad (2.24)$$

11 Temos que \mathbf{n} é o vetor unitário normal à interface (apontando do meio 1 para o meio
12 2), ao passo que $\mathbf{J}_{2\mathbf{D}}$ e $\rho_{2\mathbf{D}}$ são, respectivamente, a densidade superficial de corrente e a
13 densidade superficial de carga na interface desses materiais.

14 Outro aspecto importante é a relação entre índice de refração n_{ref} [27] e a permis-
15 sividade e permeabilidade relativas do material $\epsilon_r = \frac{\epsilon}{\epsilon_0}$ e $\mu_r = \frac{\mu}{\mu_0}$, que é dada por:

$$n_{ref} = \sqrt{\epsilon_r \mu_r}, \quad (2.25)$$

1 Para meios não-magnéticos, temos que $\mu_r \cong 1$. Assim, temos que:

$$n_{ref} = \sqrt{\epsilon_r}, \quad (2.26)$$

2 Visto que analisamos os efeitos decorridos da mudança de meio durante a incidência
3 da onda eletromagnética em nossos trabalhos com nanodispositivos, essa relação entre
4 o índice de refração e a permissividade elétrica relativa é muito relevante, pois a onda
5 eletromagnética propaga-se de um meio para outro, como ocorre na transmissão dessa
6 onda, no caso deste trabalho, por meio da estrutura de fosforeno - dielétrico [27].

7 2.4 Fosforeno

8 2.4.1 Estrutura Cristalina

9 Em 2014 uma camada de fosforeno foi obtida a partir da exfoliação micromecânica
10 de um bloco (*bulk*) de fósforo negro (*black phosphorus* - BP), que é o alótropo mais estável
11 do fósforo branco. Esse material possui distintas propriedades como intervalo de banda
12 (*bandgap*) controlável, mobilidade de carga ultra-alta, elevada taxa de absorção óptica e
13 anisotropia optoeletrônica [6].

14 Os cristais de BP aparecem pretos e escamosos, assim como o grafite, como mostrado
15 na Figura 2.1(a). No BP, similarmente ao grafite, os átomos de fósforo são fortemente ligados
16 covalentemente, formando camadas bidimensionais de átomos verticalmente empilhadas
17 umas sobre as outras que interagem fracamente através da força de Van der Waals [29].
18 O fato dessa interação, entre camadas, possuir uma natureza fraca, quando comparada
19 às ligações covalentes entre os átomos, possibilita a obtenção de camadas de fosforeno
20 (Figura 2.1(b)). Isso também proporciona um intervalo de banda (*bandgap*) de energia
21 controlável a partir do número de camadas desse material (0,3 eV para o bloco (*bulk*) até
22 2 eV para uma monocamada) [6]. O fosforeno possui uma alta mobilidade eletrônica, da
23 ordem de $1000 \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$, que é comparável à do grafeno, mas com anisotropia em sua
24 estrutura de banda [30].

25 O fosforeno é um material semicondutor que possui um *bandgap* que completa a
26 "lacuna" de *gaps* entre o grafeno e outros semicondutores como os materiais dicalcogenetos
27 de metais de transição (TMDC), como por exemplo o dissulfeto de molibdênio (MoS_2) e
28 o dissulfeto de tungstênio (WS_2) (ver Figura 2.1) [30], [31], [32].

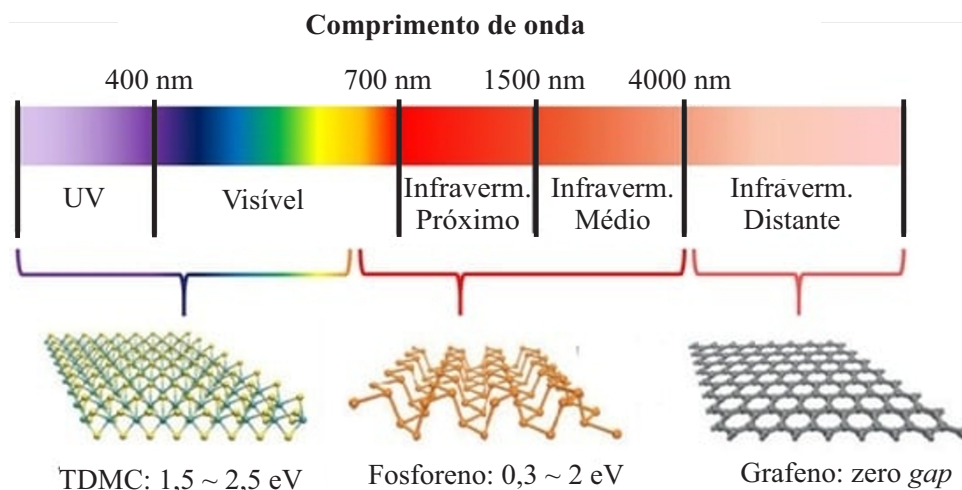


Figura 2.1 – Espectro eletromagnético com comparativo entre os valores dos *gaps* de energia para semicondutores 2D dicalcogenetos de transição (TDMC), fosforeno e grafeno.

Adaptado de [32].

1 Uma camada de fosforeno é obtida através de técnicas similar às utilizadas
 2 na produção do grafeno [33]. A Figura 2.2(a) mostra o aspecto escamoso de um *bulk* de
 3 fósforo negro. As camadas de fosforeno encontram-se empilhadas (Figura 2.2(b)) com a
 4 força intermolecular de Van der Waals e distantes entre si de 5,3 Å. É pelo fato dessa força
 5 ser mais fraca do que a força covalente (intramolecular), que torna-se mais fácil separar
 6 camadas de fosforeno do que separar átomos de fósforo. No grafeno os átomos de carbono
 7 (C) ligam-se a quatro átomos vizinhos por meio de orbitais hibridizados sp^3 . Já no fosforeno,
 8 os átomos de fósforo (P) possuem 5 elétrons na camada de valência com configuração
 9 eletrônica $3s^23p^3$. Cada átomo de fósforo liga-se a outros três átomos vizinhos (Figura
 10 2.2(c)) fazendo com que esses átomos de fósforo sejam arranjados formando um estrutura
 11 hexagonal [8, 34]. O ângulo entre os átomos de fósforo de mesmo plano é designado como
 12 θ_2 , enquanto o ângulo entre os átomos de planos diferentes é representado como θ_1 . Os
 13 comprimentos de ligação entre os átomos de fósforo situados no mesmo plano são definidos
 14 como R_2 e aqueles situados em planos diferentes como R_1 (Figura 2.2(d)). Essa ligação
 15 entre átomos de planos diferentes, causa um enrugamento da rede cristalina do fosforeno.
 16 Os átomos de planos diferentes estão mais distantes entre si do que aqueles situados no
 17 mesmo plano. Por esse mesmo motivo, os parâmetros de rede a e b são diferentes (Figura
 18 2.2(c)). Temos que $a = 4,58$ Å e $b = 3,32$ Å. Desse modo, temos $\theta_1 = 96^\circ$ e $R_1 = 2,244$ Å
 19 (para átomos em planos diferentes) e $\theta_2 = 103,51^\circ$ e $R_2 = 2,224$ Å (para átomos de mesmo
 20 plano) [34]. Baseadas na similaridade com o grafeno, as direções ao longo do plano são
 21 denominadas *armchair* (AC) e *zigzag* (ZZ) (Figura 2.2(c)).

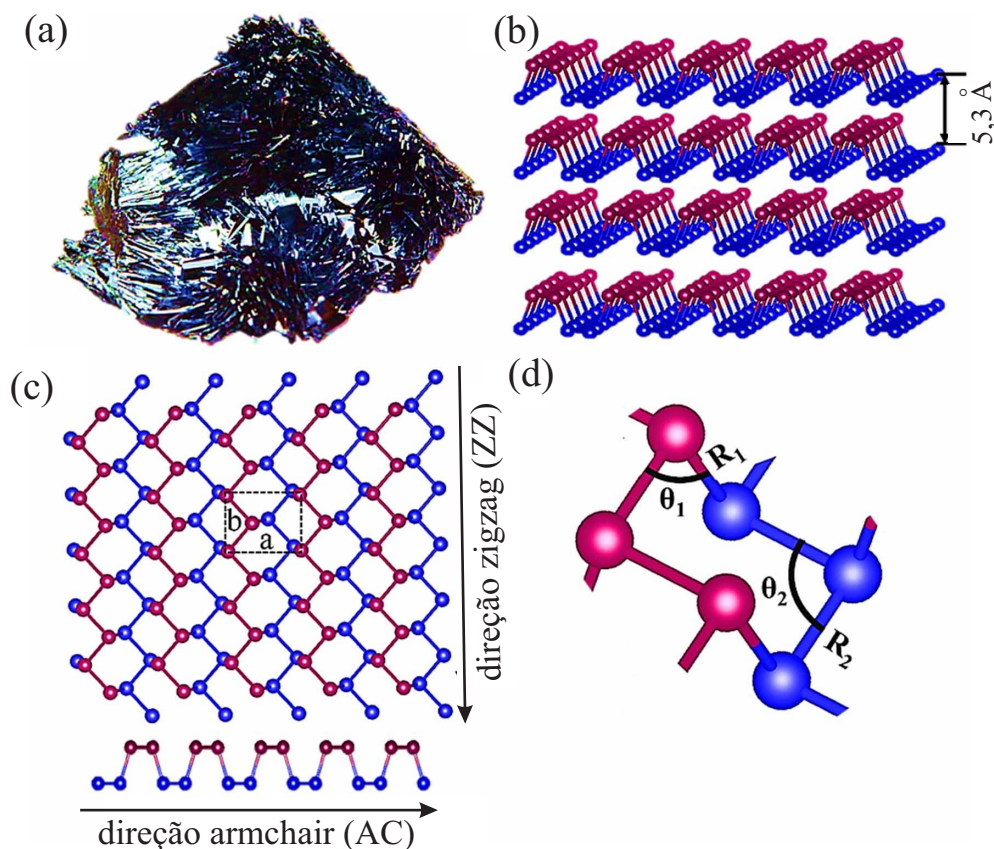


Figura 2.2 – (a) Imagem do cristal de um bloco (*bulk*) de BP. (b) Vista lateral em perspectiva multicamadas de fosforeno. (c) Vista superior e lateral multicamadas de fosforeno. 'a' e 'b' representam os parâmetros de rede. As linhas pontilhadas delimitam a célula unitária do fosforeno. (d) Representação do arranjo estrutural dos átomos de fósforo ilustrando os ângulos de ligação θ_1 e θ_2 entre os átomos e o comprimento das ligações covalentes R_1 e R_2 entre átomos de diferentes planos e de mesmo plano da rede cristalina. As cores diferentes dos átomos representam os átomos de fósforo localizados em planos diferentes.

Modificado de [34].

1 2.4.2 Métodos de Síntese

2 As amostras de materiais 2D são obtidas através de duas técnicas diferentes:
 3 Clivagem micromecânica e deposição química de vapor (CVD, sigla em inglês para chemical
 4 vapor deposition), como mostra a Fig. 2.3. A clivagem micromecânica, também conhecida
 5 como exfoliação mecânica, consiste na esfoliação de amostras até obter-se poucas camadas e
 6 até mesmo monocamadas do material. A CVD utiliza a decomposição de precursores sólidos,
 7 líquidos ou gasosos sob um atmosfera controlada para crescer materiais 2D [5]. Técnicas
 8 recentes de exfoliação permitiram o isolamento seletivo e a obtenção de amostras com
 9 forma, espessura e orientação controladas. No entanto, essas técnicas possuem vantagens e
 10 desvantagens, como mostra a Figura 2.4.

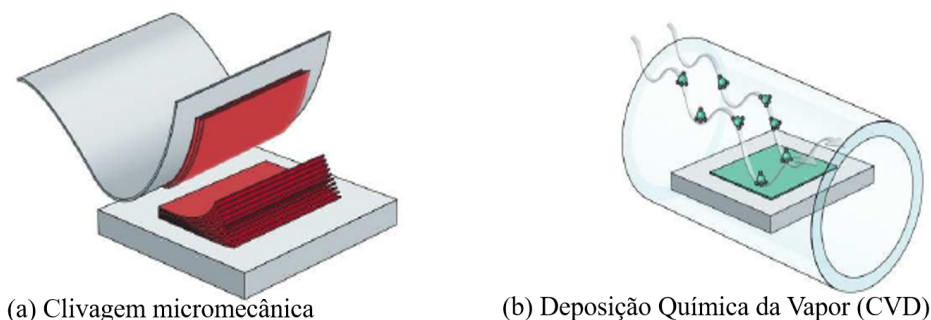


Figura 2.3 – Esquematização de métodos para a síntese de materiais 2D. (a) Clivagem micromecânica e (b) deposição química de vapor (CVD).

Fonte: Adaptado de [5].

1 A Figura 4 mostra as vantagens e desvantagens desses dois métodos de síntese.

MÉTODOS DE SÍNTESE	VANTAGEM	DESvantAGEM
Clivagem Micromecânica	produção de amostras cristalinas ideais para dispositivos eletrônicos e optoeletrônicos em escala micrométrica.	Não é escalável para produção industrial.
CVD	Produção de amostras maiores e de boa qualidade.	Não é escalável para produção industrial.

Figura 2.4 – Vantagens e desvantagens dos métodos de síntese mais utilizados para a obtenção do fosforeno.

Fonte: Adaptado de [35].

2 2.4.3 Condutividade do fosforeno

3 Assim como o grafeno, o fosforeno também exibe efeitos plasmônicos quando
 4 excitado pela incidência de uma onda eletromagnética, resultando em uma superfície
 5 plasmônica de polaritons (SPPs). A condutividade elétrica do fosforeno é representada
 6 pelo tensor σ_{jj} e possui anisotropia. Também possui dependência da frequência da onda
 7 incidente, e pode ser modelada pelo modelo semiclássico de Drude como mostra a Eq. (2.27)
 8 [36]. O comportamento da anisotropia da condutividade é mostrado nas Figuras 2.5 e 2.6. Na
 9 literatura encontramos trabalhos publicados recentemente sobre modelagem de dispositivos
 10 baseados em fosforeno onde cálculos numéricos são frequentemente efetuados através de
 11 softwares simuladores comerciais, tais como *Ansys HFSS* e *COMSOL Multiphysics*. Tais
 12 cálculos requerem uma quantidade considerável de recursos computacionais pelos mesmos
 13 motivos dos dispositivos baseados em grafeno. Dessa forma, temos

$$\sigma_{jj} = \frac{iD_{jj}}{\pi(\omega + \frac{i\eta}{\hbar})}, D_j = \frac{e^2\pi n}{m_j}, \quad (2.27)$$

14 onde: $i = \sqrt{-1}$, $j = x, y$ (representa as posições ao longo das direções armchair (x) e zig-zag
 15 (y), respectivamente). \hbar é a constante de Planck reduzida, η é a taxa de relaxamento, D_j

1 é o peso de Drude (constante a qual possui as propriedades eletrônicas do material), n
 2 é a densidade de portadores de carga no fosforeno, e m_j é a massa efetiva nas direções
 3 *armchair* e *zig – zag*, respectivamente. Essas massas efetivas m_x e m_y podem ser descritas
 4 por

$$m_x = \frac{\hbar}{\frac{2\gamma^2}{\Delta} + \eta_c}, m_y = \frac{\hbar^2}{2\nu_c}, \quad (2.28)$$

5 A alta mobilidade de carga também é uma excelente propriedade do BP a qual está
 6 relacionada à sua massa efetiva, ou seja, a mobilidade de carga é uma função da massa do
 7 portador, uma vez que o material também apresenta anisotropia nas massas efetivas dos
 8 portadores de cargas tanto na direção *armchair* (AC), como na direção *zig – zag* (ZZ).
 9 Fazendo-se os cálculos de m_x e m_y (Eq. (2.28)), temos que $m_x \cong 0,15m_0$ e $m_y \cong 0,7m_0$,
 10 respectivamente. A massa efetiva de portadores de carga ao longo da direção *zig – zag* é
 11 muito maior, o que proporciona uma menor mobilidade de carga nessa direção [37].

12 Os outros parâmetros relacionados com a camada de fosforeno são determinados
 13 por: Δ que é a energia do intervalo de banda (*bandgap*), $\eta_c = \frac{\hbar^2}{0.4m_0}$, $\nu_c = \frac{\hbar^2}{1.4m_0}$ (m_0 é a
 14 massa de repouso do elétron) e $\gamma = \frac{4a}{\pi}$, onde $a = 0.223$ nm é a escala de comprimento
 15 do fosforeno. Os parâmetros de banda são altamente sensíveis ao número das camadas
 16 de fosforeno, e pequenas mudanças podem afetar obviamente a anisotropia das massas
 17 efetivas.

18 A anisotropia da massa efetiva, nas direções *armchair* e *zig – zag*, faz com que
 19 haja maior mobilidade de carga na direção onde há menor valor dessa massa efetiva (m_x).
 20 Sendo assim, como a massa efetiva dos portadores é menor na direção *armchair* m_x temos,
 21 consequentemente, maior mobilidade de portadores e maior condutividade nessa direção.
 22 As curvas de condutividade, mostradas nas Figuras 2.5 e 2.6, constataam essas variações
 23 nas direções *armchair* e *zig-zag*. Essas figuras mostram as curvas de condutividade σ_{xx} e
 24 σ_{yy} do fosforeno para uma densidade de portadores de carga $n = 2 \times 10^{14}$ cm⁻².

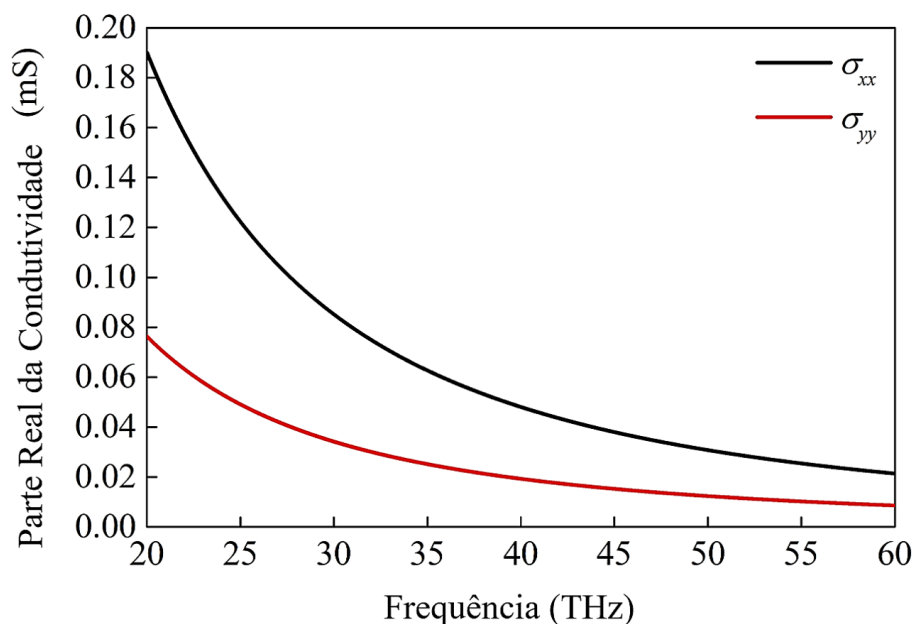


Figura 2.5 – Curvas da parte real da condutividade do fosforeno nas direções armchair (σ_{xx}) e zig-zag (σ_{yy}).

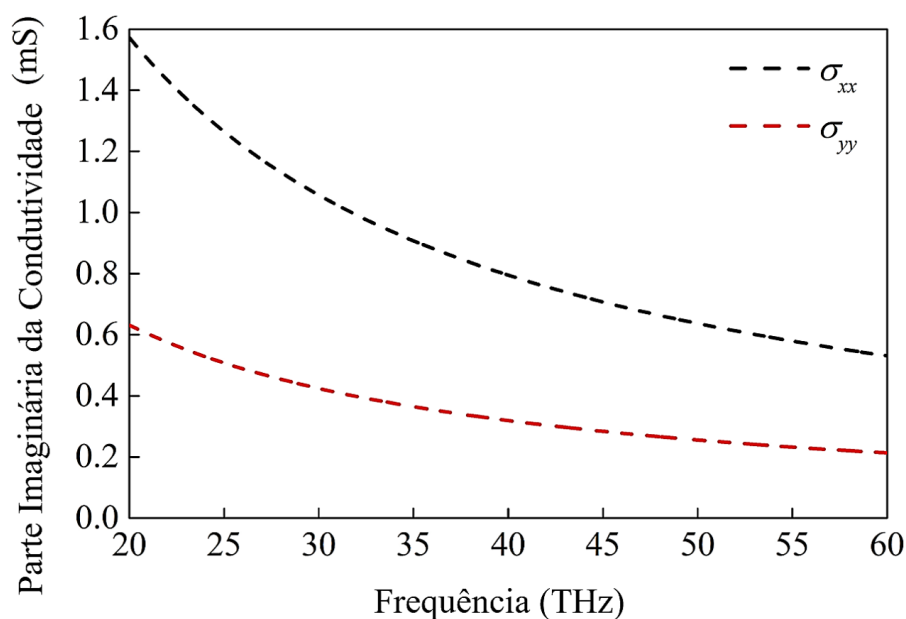


Figura 2.6 – Curvas da parte imaginária da condutividade do fosforeno nas direções armchair (σ_{xx}) e zig-zag (σ_{yy}).

1 2.4.4 Análise da condutividade do fosforeno com a variação da dopagem 2 eletrônica

3 Nesta seção analisamos o comportamento da condutividade do fosforeno com a
4 variação dopagem eletrônica. Essa dopagem ocorre pela ação de um campo elétrico externo,
5 ocasionando um aumento da densidade de portadores de carga n na superfície do material.
6 A Figura 2.7 mostra a influência da dopagem eletrônica na variação da condutividade na

- 1 superfície do fosforeno. Note que a condutividade aumenta com a densidade de portadores
- 2 de carga n .

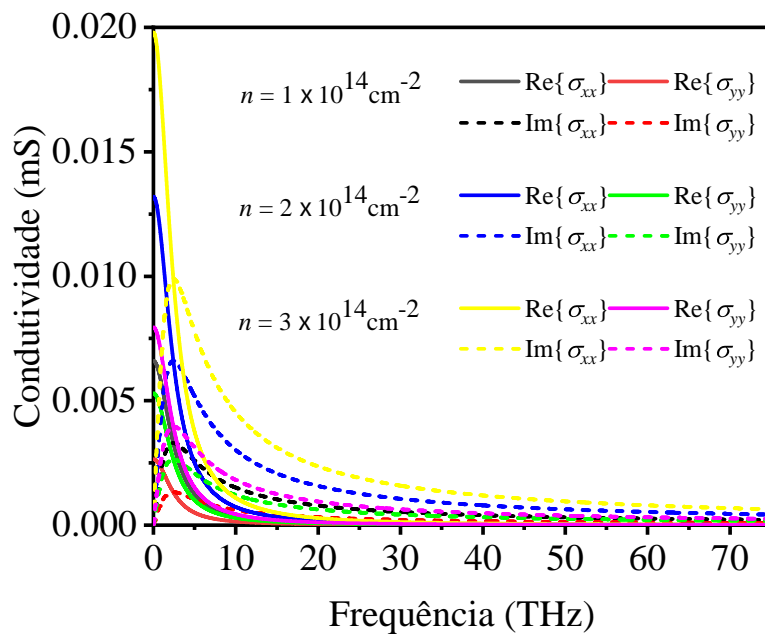


Figura 2.7 – Variação da condutividade com a dopagem eletrônica.

3 METODOLOGIA

3.1 Modelagem Numérica do fosforeno nos *softwares Ansys HFSS e Comsol Multiphysics*

Neste capítulo, serão apresentadas modelagem de quatro estruturas periódicas planares sendo duas com ressonadores em forma de disco e duas com ressonadores quadrados, ambas baseados em fosforeno. A primeira e a segunda estruturas, resultaram em publicação em anais de eventos (referências 40 e 41). Já a quarta estrutura, resultou em um artigo o qual foi publicado em periódico internacional (referência 42). Para as três primeiras, utilizamos um substrato dielétrico de SiO_2 e para a última utilizamos um substrato de h-BN (nitreto de boro hexagonal). Em todas as estruturas modeladas, a excitação ocorre da porta 1 (que está na parte superior) para a porta 2 (encontra-se na parte inferior).

Primeiramente modelamos um dispositivo com funcionalidade de um filtro eletromagnético, na região de terahertz (THz), com apenas um disco ressonador sobre um substrato dielétrico de SiO_2 e cuja frequência de ressonância pode ser controlada pela variação do ângulo de polarização e também pelo valor da densidade de portares de carga n . Esse estudo foi realizado com uma modelagem numérica utilizando o software comercial COMSOL *Multiphysics* [38], cujas soluções são baseadas no método de elementos finitos (MEF).

A segunda estrutura foi feita com uma modelagem numérica de uma estrutura que consiste em dois ressonadores de fosforeno, em forma de discos, posicionados um na parte superior e outro na parte inferior do dielétrico de SiO_2 . Foram analisados as frequências de ressonância e os níveis de transmitância. Estudamos, ainda, os efeitos devido à variação do raio R dos ressonadores e também devido à variação da densidade de portadores de carga n . Essa modelagem foi realizada utilizando-se o software comercial *Ansys HFSS* (High Frequency Structure Simulator) o qual também calcula suas soluções por meio do método de elementos finitos [39].

A terceira estrutura modelada consiste em um dispositivo eletromagnético com funcionalidade de filtro de banda dupla. A célula unitária da estrutura periódica consiste em dois ressonadores quadrados baseados em fosforeno e com dimensões diferentes. Ambos os ressonadores foram acoplados, em saunduíche, a um substrato dielétrico de SiO_2 . A estrutura foi modelada utilizando o *Ansys HFSS*.

A quarta estrutura modelada consiste em um filtro planar de infravermelho independente do ângulo de polarização e com baixa dependência do ângulo de incidência,

operando em banda única. Possui dois ressonadores quadrados de fosforeno, de mesma dimensão, acoplados a um substrato dielétrico de h-BN. Essa estrutura foi modelada utilizando-se o COMSOL *Multiphysics*

3.1.1 Filtro de banda dupla ajustável baseado em fosforeno

O modelo esquemático da estrutura cristalina de fosforeno é mostrado na Figura 3.1(a), onde as direções *armchair* (AC) e *zig-zag* (ZZ) são indicadas como direção do eixo x e do eixo y, respectivamente. A estrutura periódica do filtro é mostrada na Figura 3.1(b). A Figura 3.1(c) mostra a célula unitária da estrutura periódica composta por uma camada de fosforeno em forma de disco. Para essa modelagem o valor da densidade de portadores de carga foi $n = 2 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$. A permissividade relativa do dielétrico é 2,09 e sua espessura é $h = 10 \text{ nm}$. O período da célula unitária é $L = 220 \text{ nm}$ e o raio do disco é $R = 80 \text{ nm}$ [40].

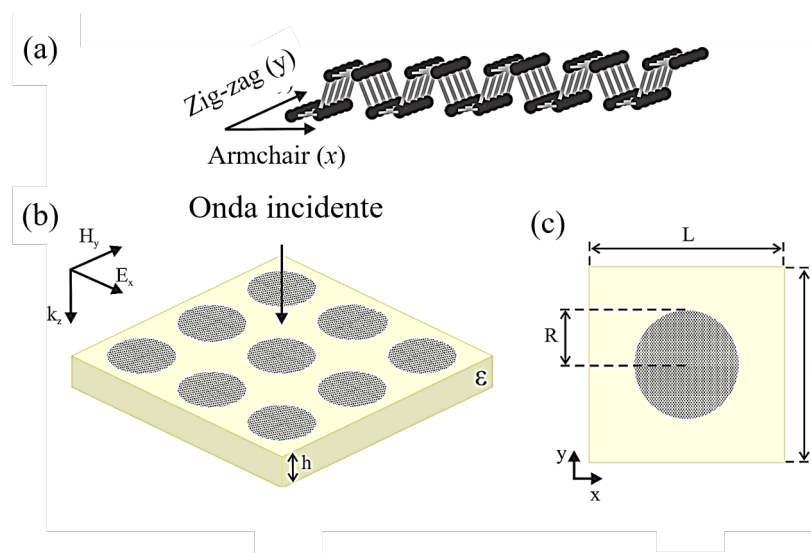


Figura 3.1 – (a) Modelo esquemático da estrutura cristalina do fosforeno. (b) Estrutura periódica tridimensional da banda dupla controlável do filtro. (c) Vista superior da célula unitária e parâmetros estruturais $L = 220 \text{ nm}$, $R = 80 \text{ nm}$. Adaptado de [40]

Seguinte à modelagem da geometria mostrada na Figura 3.1(b), foram inseridos todos os parâmetros físicos e definição dos materiais com suas respectivas propriedades físicas, assim como a definição de cada subdomínio e as condições de contorno do problema. As portas 1 e 2 são periódicas, com condições de periodicidade de Floquet e, por fim, a inserção da malha de elementos finitos (no menu *Mesh*) com refinamento do tipo '*fine*' para o tamanho dos elementos, para discretização do modelo.

É importante ressaltar que quanto mais refinada a malha de elementos finitos, maior resolução e precisão nas soluções dos cálculos numéricos. Em contra partida, a demanda de recurso computacional é, também, maior. No entanto, em modelagens cujo nível de

1 complexidade não é elevado, é possível obter-se boa precisão nos cálculos numéricos com
 2 uma malha de refinamento mediano. O refinamento da malha depende das dimensões
 3 da estrutura e também das dimensões do material bidimensional, além da frequência de
 4 análise. Excitamos a componente E_y do campo elétrico através das portas com condições
 5 periódicas de Floquet utilizadas nas simulações.

6 3.1.2 Filtro de banda dupla com dois discos ressonadores baseados em fosfo- 7 reno

8 A visualização geral do modelo esquemático da célula unitária da estrutura baseada
 9 em dois discos ressonadores de fosforeno é mostrado na Figura 3.2 (a), onde são indicados
 10 os parâmetros geométricos. A Figura 3.2 (b) mostra a disposição lateral da célula unitária
 11 da estrutura periódica. A permissividade relativa do dielétrico é $\epsilon_r = 2,09$, e sua espessura
 12 é $h = 10$ nm. O raio dos discos são respectivamente $R_1 = 25$ nm e $R_2 = 35$ nm. O período
 13 da célula unitária é $L = 100$ nm. A densidade de portadores de carga foi $n = 3 \times 10^{14}$
 14 cm^{-2} .

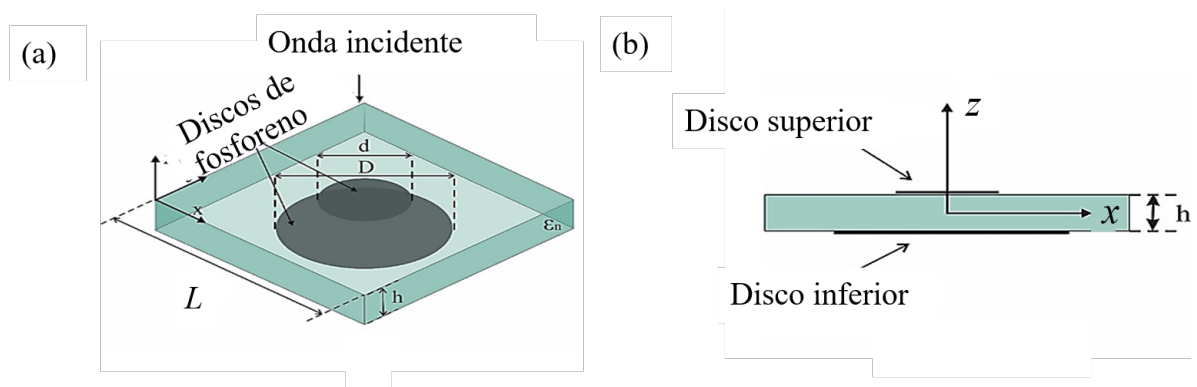


Figura 3.2 – (a) Visualização geral do modelo esquemático da célula unitária com dois discos ressonadores, mostrando os seus parâmetros geométricos. (b) Vista lateral da célula unitária. Adaptado de [41]

15 3.1.3 Filtro de banda dupla com dois ressonadores quadrados baseados em 16 fosforeno com dimensões diferentes

17 Nessa seção apresentamos uma modelagem de uma estrutura periódica cuja célula
 18 unitária consiste em dois ressonadores quadrados de fosforeno, acoplados em sanduíche
 19 com uma substrato dielétrico de SiO_2 . A Figura 3.3 mostra o modelo esquemático da
 20 estrutura modelada. O período da estrutura é $L = 220$ nm. Os ressonadores quadrados
 21 superior e inferior possuem lado $l = l_1 = 120$ nm e $l = l_2 = 200$ nm, respectivamente.
 22 A densidade de portadores de carga utilizada foi $n = 3 \times 10^{14}$ cm^{-2} . A permissividade
 23 dielétrica relativa e a espessura do substrato dielétrico de SiO_2 são $\epsilon_r = 2,09$ e $h = 30$ nm,
 24 respectivamente.

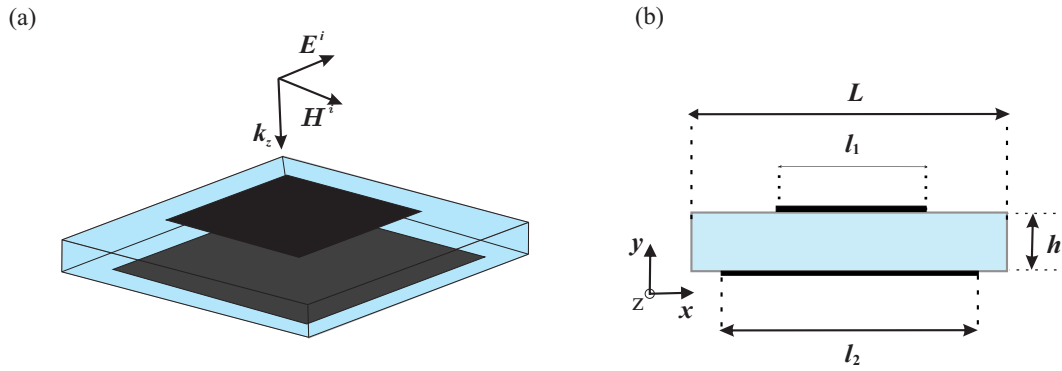


Figura 3.3 – Modelo esquemático da estrutura com dois diferentes ressonadores quadrados de fosforeno. (a) Modelo tridimensional da célula unitária da estrutura mostrando a direção do vetor de onda. (b) Vista lateral da célula unitária mostrando os parâmetros geométricos da estrutura.

1 3.1.4 Filtro de infravermelho de dupla camada de fosforeno planar ajustável,
 2 independente da polarização e com baixa dependência do ângulo de
 3 incidência.

4 Nesta seção modelamos uma estrutura periódica com dois ressonadores quadrados,
 5 de mesmas dimensões, baseados em fosforeno. A estrutura é excitada por uma onda plana
 6 incidente (ver Figura 3.4), com a frequência angular ω [42]. A onda é descrita pelo campo
 7 elétrico \mathbf{E}^i e pelo vetor de onda no espaço livre \mathbf{k}_z ($k_z = \omega/c$, onde c é a velocidade da
 8 luz).

9 A Figura 3.4(c) e a Figura 3.4(d) mostram a vista de cima e a vista de baixo da
 10 célula unitária, respectivamente. O período da célula unitária do arranjo periódico é $L =$
 11 200 nm e o lado do ressonador quadrado de fosforeno é $l = 160$ nm [42].

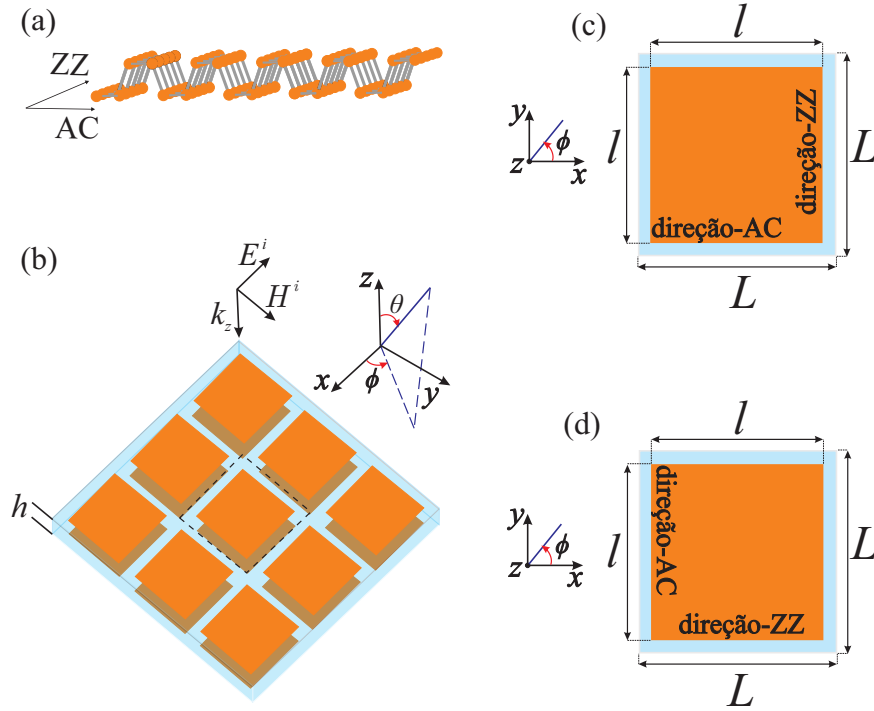


Figura 3.4 – (a) Rede cristalina do fosforeno; (b) Estrutura periódica do dispositivo; (c) Visão superior da célula unitária; (d) Visão da face de baixo da célula unitária com o quadrado de fosforeno rotacionado em 90° . Adaptado de [42]

1 A Figura 3.4(c) mostra a vista superior e a Figura 3.4(d) mostra a vista inferior
 2 da célula unitária da estrutura onde o quadrado foi rotacionado em 90° com o intuito de
 3 obter um comportamento isotrópico da estrutura.

4 A folha dielétrica de cinco camadas do nitreto de boro hexagonal (h-BN) separa
 5 eletricamente as duas camadas de fosforeno. Esse espaçador dielétrico tem uma espessura
 6 $h = 1,5$ nm e sua permissividade é dada pelo seguinte tensor:

$$[\epsilon_r] = \begin{bmatrix} \epsilon_{\parallel} & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon_{\parallel} & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon_{\perp} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4.96 & 0 & 0 \\ 0 & 4.96 & 0 \\ 0 & 0 & 2.98 \end{bmatrix}, \quad (3.1)$$

7 onde ϵ_{\parallel} e ϵ_{\perp} são, respectivamente, componentes de permissividade no plano e fora do
 8 plano [43]. A estrutura pode ser alcançável com tecnologias existentes, o substrato e
 9 os espaçadores dielétricos podem ser fabricados usando litografia de feixe de elétrons, o
 10 fosforeno pode ser obtido por exfoliação mecânica ou métodos químicos [4, 5, 8, 12, 44, 45].
 11 O filtro foi simulado usando o COMSOL multiphysics, onde a espessura do fosforeno pode
 12 ser definida como 1 nm [10].

13 Uma camada de fosforeno tem condutividade anisotrópica σ_{ii} que é descrita pelo
 14 modelo semiclássico de Drude [13]:

$$\sigma_{ii}(\omega) = \frac{jD_i}{\pi(\omega + j\eta/\hbar)}, \quad (3.2)$$

1 onde ω é a frequência, \hbar é a constante de Planck reduzida. Nessa modelagem utilizamos n
 2 $= 2 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ é a densidade de portadores de carga e o valor escolhido $\eta = 10 \text{ meV}$ é a
 3 taxa de relaxamento. O peso de Drude i pode ser calculado por:

$$D_i = \pi e^2 \frac{n}{m_i}. \quad (3.3)$$

4 A massa efetiva m_i do elétron ao longo do eixo x e do eixo y é descrito como:

$$m_x = \frac{\hbar^2}{2\gamma^2/\Delta + \eta_c}, \quad (3.4)$$

5

$$m_y = \frac{\hbar^2}{2\nu_c}, \quad (3.5)$$

6 onde $\gamma = 4a/\pi \text{ eV m}$, $\Delta = 2 \text{ eV}$, $\eta_c = \hbar^2/0.4m_0$, $\nu_c = \hbar^2/1.4m_0$, $m_0 = 9.10938 \times 10^{-31}$
 7 Kg, $a = 0.223 \text{ nm}$.

8 As curvas mostradas na Figura 3.5 representam a parte real e a parte imaginária
 9 da condutividade do fosforeno nas direções AC (σ_{xx}) e ZZ (σ_{yy}). É possível observar que,
 10 em frequências superiores a 50 THz, a condutividade possui uma pequena dependência da
 11 frequência.

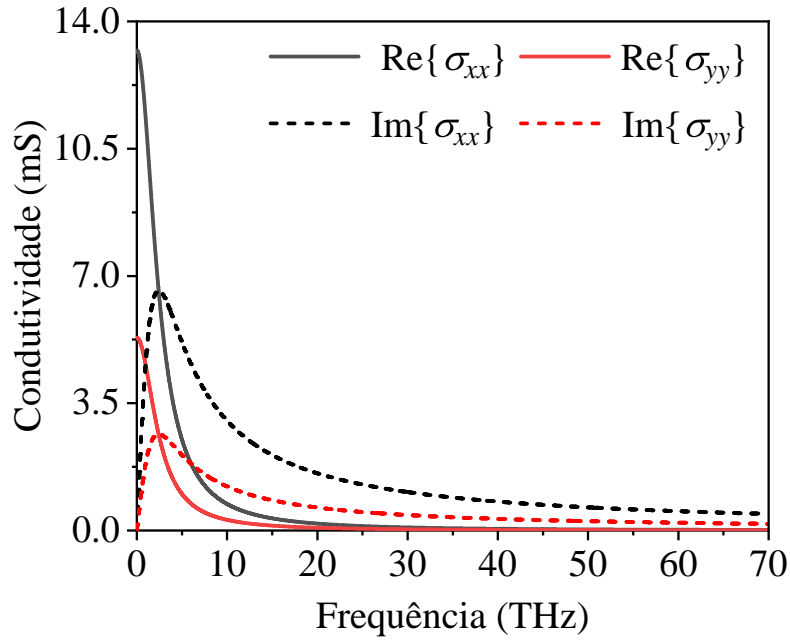


Figura 3.5 – Condutividade anisotrópica de uma camada de fosforeno com densidade de portadores de carga $n = 2 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$, as linhas sólidas denotam a parte real (Re) de σ_{xx} e σ_{yy} , as linhas tracejadas se referem à parte imaginária (Im).

1 3.2 Tensor condutividade

2 A condutividade de uma folha de fosforeno é definida por:

$$[\sigma] = \begin{bmatrix} \sigma_{xx} & 0 \\ 0 & \sigma_{yy} \end{bmatrix}, \quad (3.6)$$

3 onde $\text{Re}\{\sigma_{xx}\} > \text{Re}\{\sigma_{yy}\}$.

4 Para a frequência de 50 THz ($\lambda = 6 \text{ }\mu\text{m}$), a espessura elétrica para o dielétrico
5 h-BN é muito pequena e igual a $h/\lambda_d = 0.43 \times 10^{-3}$, onde $\lambda_d = \lambda/\sqrt{\epsilon_{\perp}}$. Portanto, é possível
6 considerar as duas camadas de fosforeno separadas pela folha dielétrica de h-BN como um
7 sistema composto por dois ressonadores quadrados de fosforeno altamente acoplados.

8 Supomos que o tensor de condutividade equivalente, que será utilizado na análise
9 seguinte, é definido pela soma do tensor de condutividade da camada superior e da
10 camada inferior de fosforeno. Portanto, para orientações iguais dos eixos AC e ZZ nos dois
11 ressonadores, chegamos ao tensor:

$$[\sigma_{\parallel}] = \begin{bmatrix} 2\sigma_{xx} & 0 \\ 0 & 2\sigma_{yy} \end{bmatrix}, \quad (3.7)$$

1 e para o caso do ressonador quadrado de fosforeno de baixo rotacionado em 90° em relação
 2 ao de cima, temos:

$$\begin{aligned}
 [\sigma_\perp] &= \begin{bmatrix} \sigma_{xx} & 0 \\ 0 & \sigma_{yy} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \sigma_{yy} & 0 \\ 0 & \sigma_{xx} \end{bmatrix} \\
 &= \begin{bmatrix} (\sigma_{xx} + \sigma_{yy}) & 0 \\ 0 & (\sigma_{yy} + \sigma_{xx}) \end{bmatrix}.
 \end{aligned} \tag{3.8}$$

3 Esse último tensor descreve o meio isotrópico.

4 A frequência de ressonância de um ressonador de fosforeno depende da parte real
 5 de sua condutividade. Com $\text{Re}\{\sigma_{xx}\} > \text{Re}\{\sigma_{yy}\}$, chega-se a $2\text{Re}\{\sigma_{xx}\} > \text{Re}\{\sigma_{xx} + \sigma_{yy}\} >$
 6 $2\text{Re}\{\sigma_{yy}\}$, ou seja, a frequência de ressonância do ressonador rotacionado está entre as
 7 ressonâncias do ressonador de duas camadas com orientação igual dos eixos ZZ e AC [42].

8 Após a elaboração da geometria das estruturas acima, foram inseridos todos
 9 os parâmetros físicos, assim como a definição de cada subdomínio e as condições de
 10 contorno do problema. As condições de contorno (*Boundaries*) usadas neste modelo foram:
 11 “*ImpedanceBoundary*” para os dois discos de fosforeno, “*Master*” e “*Slave*” para as faces
 12 laterais e para a face superior e inferior foram usados portas “*FloquetPort*”.

13 Para a modelagem numérica no COMSOL *Multiphysics*, utilizamos o módulo
 14 RF, o qual é muito utilizado na solução de problemas envolvendo a propagação de ondas
 15 eletromagnéticas. O projeto do modelo geométrico foi construído basicamente nas seguintes
 16 etapas:

- 17 1) Construção geométrica dos dispositivos;
- 18 2) Escolha dos parâmetros físicos dos dispositivos, assim como das condições de contorno
- 19 do problema;
- 20 3) Criação da malha de elementos finitos e;
- 21 4) Processamento do resultado
- 22 5) Análise dos resultados e otimização.

23 A Figura 3.6 mostra um fluxograma para a modelagem das estruturas.

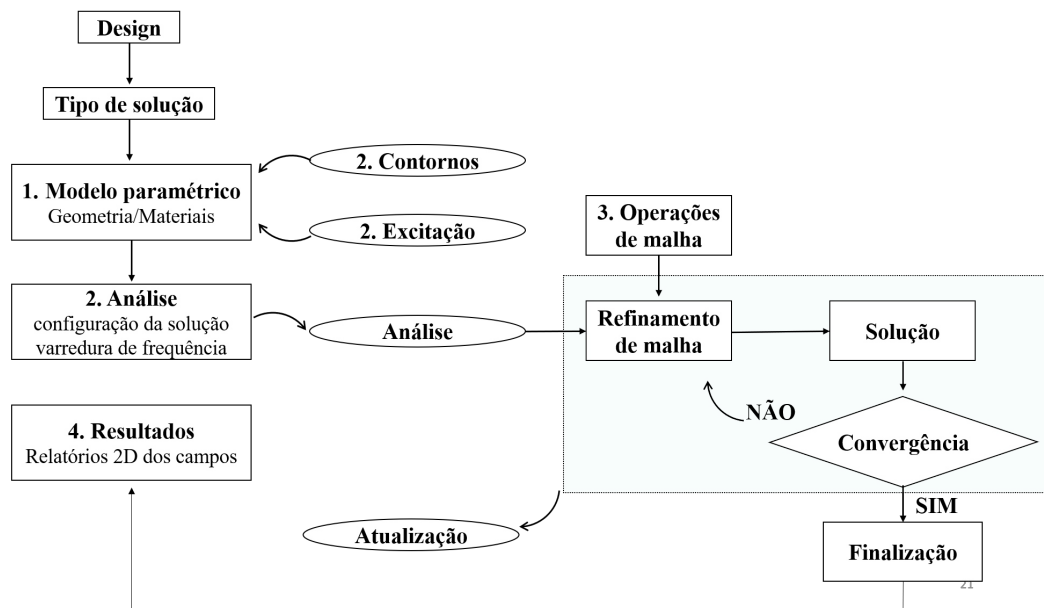


Figura 3.6 – Fluxograma das etapas do processamento no COMSOL *Multiphysics* e *Ansys HFSS*.

Adaptado de [39].

1 3.2.1 Fator Q

2 O fator Q , ou fator de qualidade, é um parâmetro que mede a qualidade de um
3 sinal. Esse parâmetro determina a nitidez com que um sistema responde a uma faixa de
4 frequências [46].

5 O fator Q é calculado de acordo com a equação 3.9

$$Q = \frac{\omega_0}{\Delta\omega}, \quad (3.9)$$

onde ω_0 é a frequência central de ressonância e $\Delta\omega = (\omega_2 - \omega_1)$ representa a largura de banda na metade do mínimo de transmissão.

4 RESULTADOS NUMÉRICOS

4.1 Filtro de banda dupla ajustável baseado em fosforeno

Nesta seção, serão apresentados os principais resultados obtidos para o Filtro de banda dupla ajustável com um disco ressonador de fosforeno (ver Figura 3.1), através do Método de Elementos Finitos (MEF) utilizando o *software* comercial *COMSOL Multiphysics*. Os espectros de transmitância da estrutura proposta foram simulados numericamente para o caso de incidência normal da onda eletromagnética. Para essa simulação, a densidade de portadores de carga foi $n = 2 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$. Na Figura 4.1 são apresentados os resultados para a onda polarizada ao longo da direção ZZ ($\phi = 0^\circ$) da estrutura, com um nível de transmitância de 0,51 na frequência de ressonância de 30,54 THz (linha preta). Para a polarização ao longo da direção AC ($\phi = 90^\circ$), a frequência de ressonância aumenta para 51,74 THz e o nível de transmitância diminui para 0,26 (linha azul). Assim, devido à anisotropia do fosforeno, os espectros de transmitância, para as direções AC e ZZ, as polarizações apresentam respostas diferentes [40].

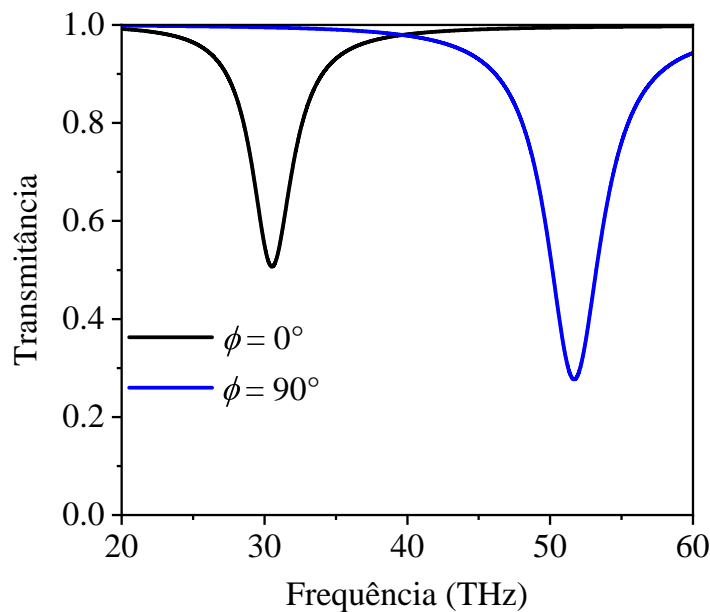


Figura 4.1 – Curvas de transmissão para a onda polarizada ao longo da direção ZZ para $\phi = 0^\circ$, e AC para $\phi = 90^\circ$. Adaptado de [40]

Para mudança do ângulo de polarização para $\phi = 45^\circ$ (veja a Figura 4.2), os espectros exibem dois mínimos com frequências de ressonância de 31,81 THz e 50,04 THz, respectivamente. Os níveis de transmitância são, respectivamente, 0,69 e 0,46 (linha vermelha).

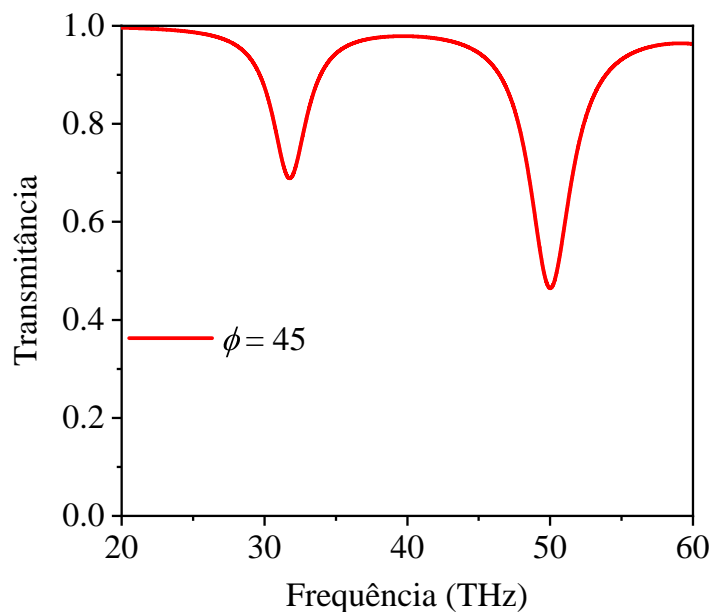


Figura 4.2 – Curva de transmissão para a onda polarizada para o ângulo $\phi = 45^\circ$. Adaptado de [40]

1 O surgimento de dois modos de ressonância ocorre devido ao fato de que na
 2 polarização de $\phi = 45^\circ$, tem-se a influência de anisotropia tanto na direção AC quanto na
 3 direção ZZ da estrutura. As características desses dois modos são bem detalhadas pela
 4 distribuição da componente E_z do campo elétrico, na superfície do fosforeno, descritas
 5 na Figura 4.3. Assim, a excitação dos modos ressonantes no plano do disco de fosforeno
 6 também dependem do ângulo de polarização, portanto, este efeito pode ser utilizado em
 7 aplicações práticas.

8 4.1.1 Módulo do campo elétrico E_z

9 As Figuras 4.3(a) e 4.3(d) mostram os dipolos elétricos na superfície do disco de
 10 fosforeno para os ângulos de polarização de $\phi = 0^\circ$ e 90° , que são excitados nas direções
 11 ZZ (30,54 THz) e AC (51,74 THz), respectivamente. Com o ângulo de polarização $\phi = 45^\circ$,
 12 o dipolo elétrico é excitado na frequência de ressonância 31,81 THz na Figura 4.3(b), e na
 13 frequência de ressonância 50,04 THz (Figura 4.3(c)) com os dipolos elétricos levemente
 14 rotacionados devido à anisotropia do fosforeno [40].

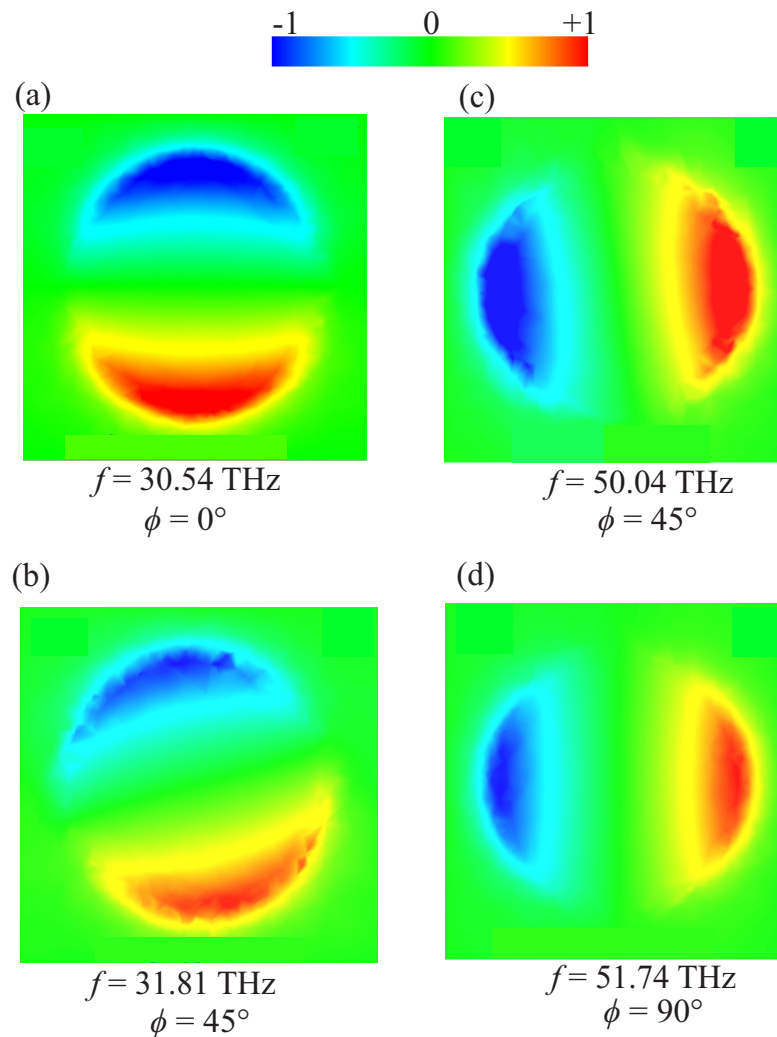


Figura 4.3 – Distribuição da componente E_z do campo elétrico no disco de fosforeno. 4.3(a) e 4.3(d) para $\phi = 0^\circ$ e $\phi = 90^\circ$, respectivamente. 4.3(b) e 4.3(c) para $\phi = 45^\circ$. Adaptado de [40]

1 4.1.2 Variação da dopagem eletrônica

2 A influência da dopagem eletrônica para valores de $n = 1,8 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$, $n = 2$
3 $\times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ e $n = 2,2 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$, para a variação da frequência de ressonância na
4 resposta do filtro de banda dupla fosforeno é mostrada na Figura 4.4. Essa variação, assim
5 como no grafeno, pode ser obtida aplicando-se um tensão elétrica externa sobre o disco
6 de fosforeno [13]. Pode-se verificar a dependência da frequência de ressonância e também
7 dos níveis de transmitância com a dopagem eletrônica, possibilitando algumas aplicações
8 práticas [40].

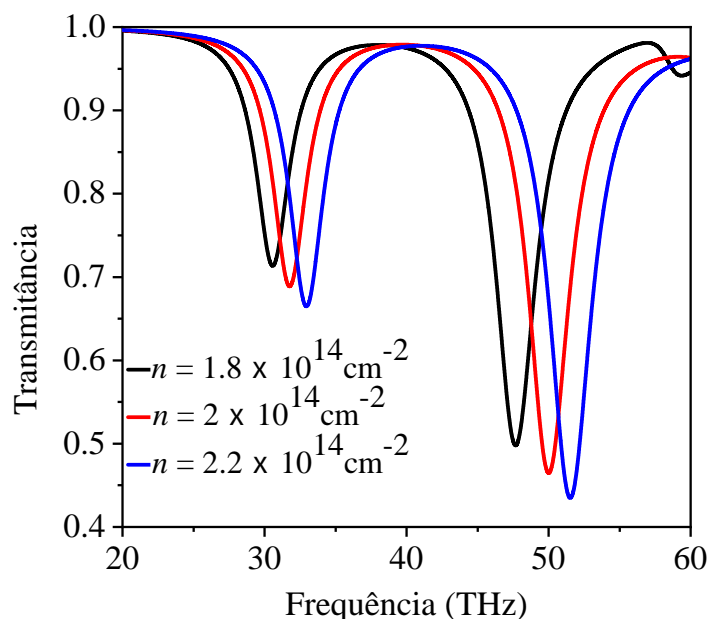


Figura 4.4 – Variação da transmissão e da frequência de ressonância para valores de densidade de portadores de carga n iguais a $n = 1,8 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$, $n = 2 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ e $n = 2,2 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$. Adaptado de [40]

1 4.2 Filtro de banda dupla com dois discos ressonadores baseados 2 em fosforeno

3 Nesta seção, serão apresentados resultados obtidos para a modelagem numérica de
4 uma estrutura periódica com dois discos ressonadores de fosforeno, sendo um na parte
5 superior e outro posicionado na parte inferior do dielétrico [41] (ver Figura 3.2). Para essas
6 análises excitamos, na estrutura, a componente E_y do campo elétrico e fixamos o ângulo
7 de polarização em $\phi = 0^\circ$ e o ângulo de incidência em $\theta = 0^\circ$. A densidade de portadores
8 de carga aplicada foi $n = 3 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$. A modelagem numérica foi realizada através do
9 Método de Elementos Finitos (MEF) utilizando o *software* comercial *Ansys HFSS*.

10 Os espectros de transmissão da estrutura proposta foram obtidos numericamente
11 para o caso de incidência normal da onda eletromagnética, com excitação da componente
12 E_y do campo elétrico da onda incidente.

13 Primeiramente, obtivemos as curvas de transmissão para cada disco ressonador
14 (superior e inferior) separadamente, e em seguida, acoplados ao substrato dielétrico.
15 As Figuras 4.5 e 4.6 mostram, respectivamente, as ressonâncias devido a cada disco
16 separadamente posicionado no substrato dielétrico. Já a Figura 4.7 mostra as frequências
17 de ressonância devido ao acoplamento entre os dois discos no substrato dielétrico [41].

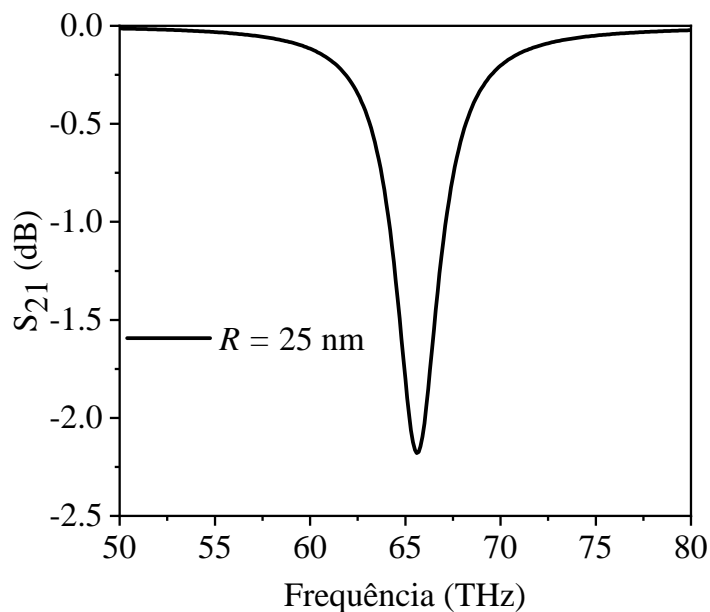


Figura 4.5 – Curva de transmissão somente para o disco ressonador superior de fosforeno ($R = 25$ nm) no substrato dielétrico. Adaptado de [41]

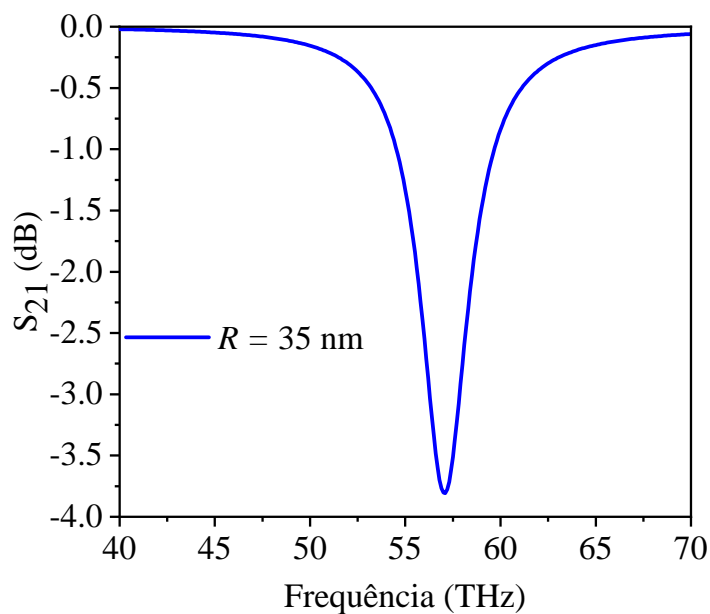


Figura 4.6 – Curva de transmissão somente para o disco ressonador de fosforeno no substrato dielétrico para $R = 35$ nm. Adaptado de [41]

1 A análise com os ressonadores isolados mostra que o ressonador de maior raio faz
2 com que a frequência de ressonância seja deslocada para um valor menor do que aquele
3 devido ao ressonador de menor raio. Isso nos permite obter dois modos de ressonância,
4 quando acoplamos ambos os ressonadores, proporcionando uma funcionalidade de banda
5 dupla. A Figura 4.7 mostra as curvas de transmissão para os dois discos de fosforeno
6 acoplados em sanduíche com o dielétrico de SiO_2 .

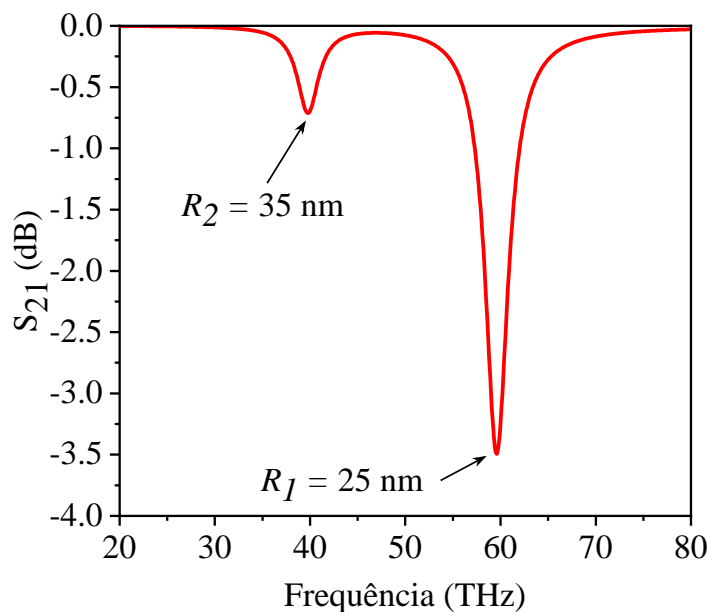


Figura 4.7 – Coeficiente de transmissão para os dois discos de fosforeno acoplados em sanduíche com o dielétrico. Adaptado de [41]

1 Note que temos uma funcionalidade banda dupla nas frequências de 38,04 THz
2 (com R_2) e de 59,08 THz (com R_1). Note que nessas frequências de ressonância os níveis
3 de transmissão são bastante distintos.

4 4.2.1 Controle por campo elétrico externo

5 A Figura 4.8 mostra a variação dos níveis de transmissão para valores de n iguais
6 a $n = 2 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$, $n = 3 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ e $n = 4 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$.

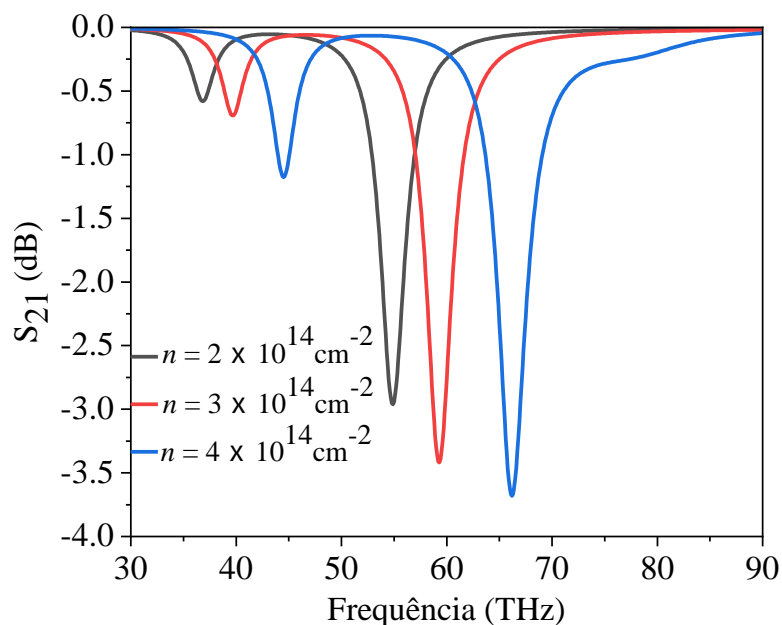


Figura 4.8 – Coeficiente de transmissão para estrutura com dois discos de fosforeno acoplados em sanduíche com o dielétrico de SiO_2 com n variável. Adaptado de [41]

1 Esses resultados mostram que os níveis de transmissão e as frequências de resso-
 2 nância possuem uma dependência em relação à dopagem eletrônica aplicada na estrutura.

3 4.3 Filtro de banda dupla com dois ressonadores quadrados basea- 4 dos em fosforeno com dimensões diferentes

5 Nessa seção apresentamos uma modelagem de uma estrutura com dois ressonadores
 6 quadrados de fosforeno Q_1 e Q_2 , acoplados em sanduíche com um substrato dielétrico de
 7 SiO_2 de permissividade dielétrica relativa $\epsilon_r = 2,09$ (ver Figura 3.3).

8 Primeiramente obtivemos resultados para variação da dimensão do ressonador
 9 quadrado superior Q_1 (com lado $l = l_1$), e também para o ressonador quadrado inferior
 10 Q_2 (com lado $l = l_2$), ambos separadamente no substrato dielétrico. O objetivo inicial foi
 11 verificar quais parâmetros são ideais para obtenção de um melhor fator de qualidade Q nas
 12 ressonâncias. As Figuras 4.9 e 4.10 mostram, respectivamente, os níveis de transmitância
 13 para o ressonador quadrado superior Q_1 com lado l_1 variável e para o ressonador quadrado
 14 inferior Q_2 com lado l_2 também variável.

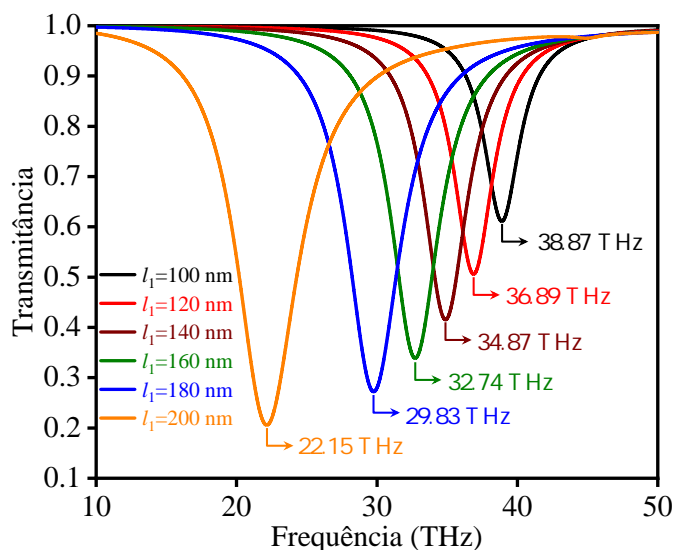


Figura 4.9 – Variação dos níveis de transmitância, somente para o quadrado superior Q_1 , com o lado $l = l_1$ variável.

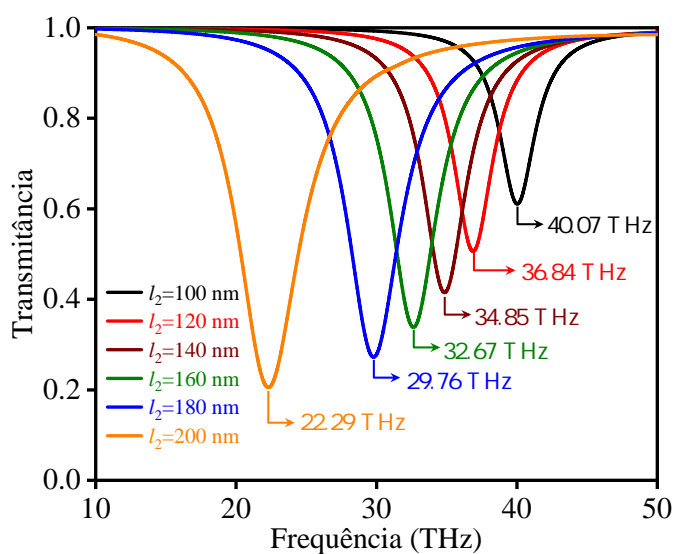


Figura 4.10 – Variação dos níveis de transmitância, somente para o quadrado inferior Q_2 , com o lado $l = l_2$ variável.

1 Como os resultados das Figuras 4.9 e 4.10 são semelhantes, calculamos o fator Q
 2 apenas para o ressonador quadrado superior Q_1 com $l = l_1$. Essa similaridade de resultados
 3 (Figuras 4.9 e 4.10) nos leva a concluir que as ressonâncias tanto na parte superior quanto
 4 na parte inferior da estrutura possuem valores próximos. A Figura 4.11 mostra a variação
 5 do fator Q com a dimensão do ressonador quadrado Q_1 com lado $l = l_1$.

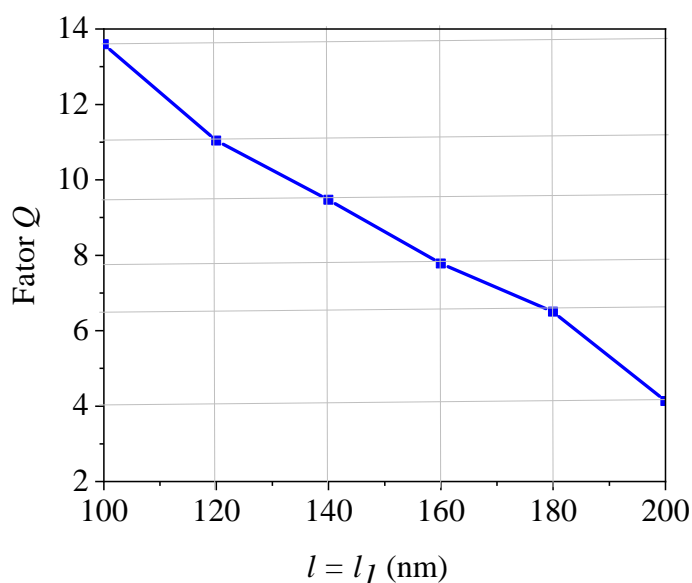


Figura 4.11 – Variação do fator Q com as dimensões do ressonador quadrado de fosforeno superior Q_1 com lado $l = l_1$.

1 Através da análise do fator Q verificamos que o mesmo decresce com o aumento
2 das dimensões do ressonador.

3 Analisamos, também, a variação dos níveis de transmitância com a variação da
4 geometria dos ressonadores de fosforeno. A Figura 4.12 mostra a variação da geometria do
5 ressonador quadrado com a influência da abertura dos "cantos" dos ressonadores quadrados,
6 gradativamente, até atingir a forma de um disco ($r/R = 1$). Quando temos um ressonador
7 na forma de um disco, temos que $r = R$; $a = C = 2\pi R$; e $\alpha = 2\pi rad$ ($r/R = 1$).

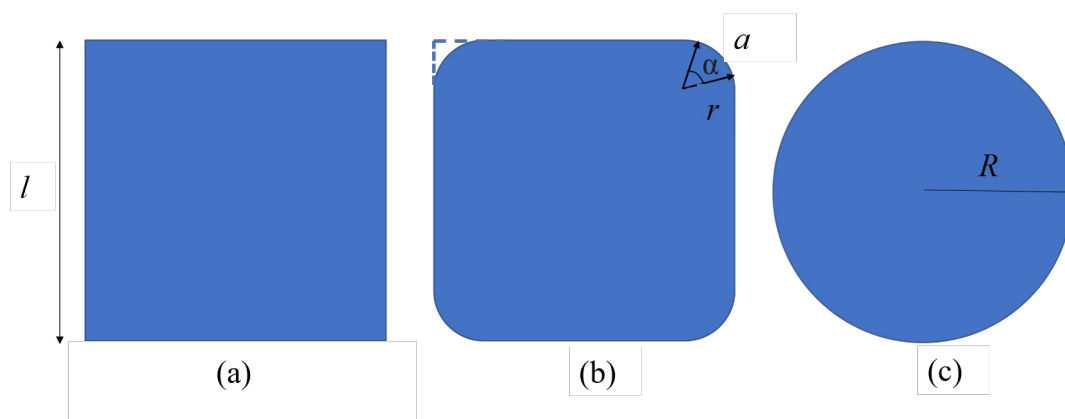


Figura 4.12 – Desenho esquemático da variação da geometria de um ressonador quadrado até atingir a forma de um disco. (a) Ressonador na forma quadrada (forma inicial com $a = 0$). (b) Ressonador com os "cantos" abertos para $a \neq 0$ e (c) Ressonador na forma de um disco com $r = R$ e $a = C = 2\pi R$, com $\alpha = 2\pi rad$ ($r/R = 1$).

1 Aumentamos o comprimento a do arco delimitado pela abertura do ângulo α
 2 atingindo a quantidade $a = \alpha r$, sendo α em radianos. O comprimento a aumenta tal que
 3 $r = R$ e $a = C = 2\pi R$, quando a geometria do ressonador torna-se um disco, descrito por
 4 uma circunferência com $\alpha = 2\pi$ rad ($r/R = 1$).

5 As Figuras 4.13 e 4.14 mostram, respectivamente, os níveis de transmitância e o
 6 fator Q para o ressonador superior Q_1 com lado $l = l_1$.

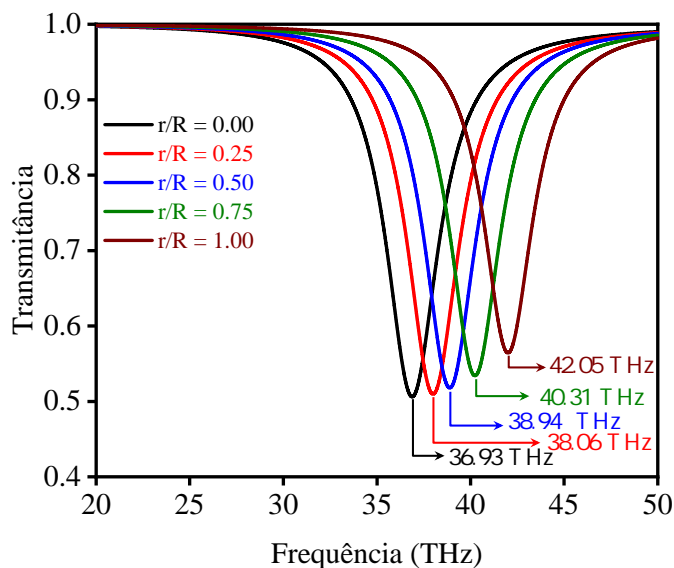


Figura 4.13 – Variação do nível de transmitância com a geometria do quadrado superior Q_1 de lado $l = l_1$, em função da frequência.

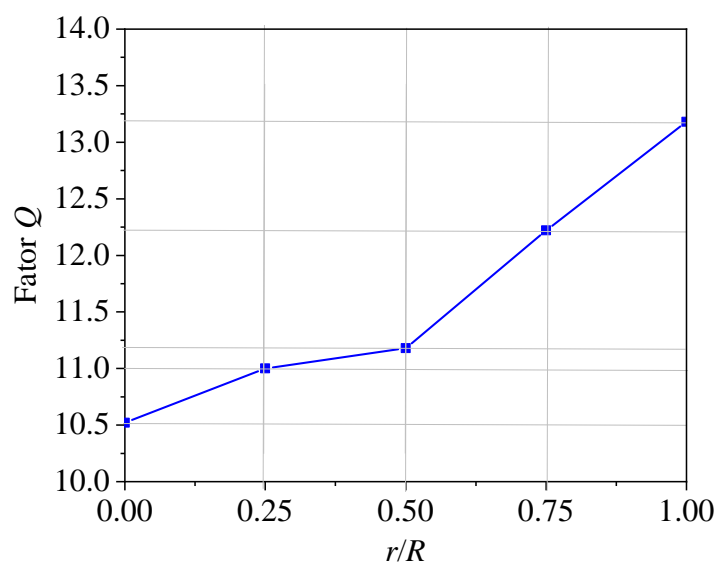


Figura 4.14 – Variação do fator Q com a geometria do quadrado superior Q_1 com lado $l = l_1$.

1 As Figuras 4.15 e 4.16 mostram, respectivamente, a variação dos níveis de transmi-
 2 tância para variação da geometria do quadrado inferior Q_2 , com lado $l = l_2$, e também a
 3 variação do fator Q correspondente.

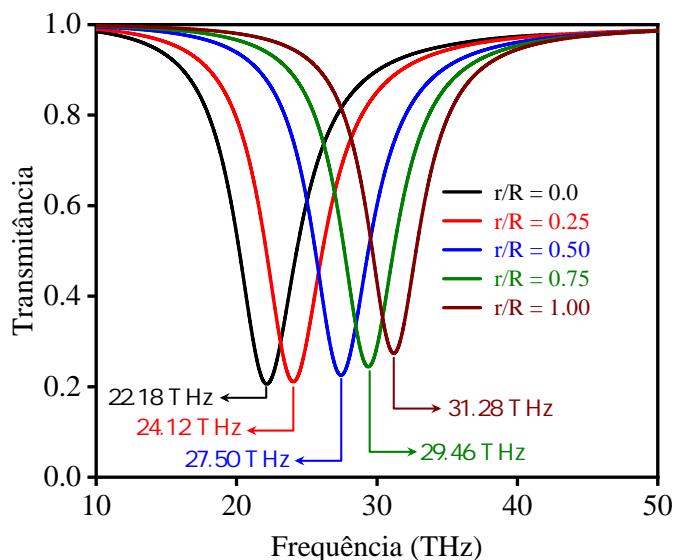


Figura 4.15 – Variação do nível de transmitância com a geometria do quadrado inferior Q_2 com lado $l = l_2$, em função da frequência.

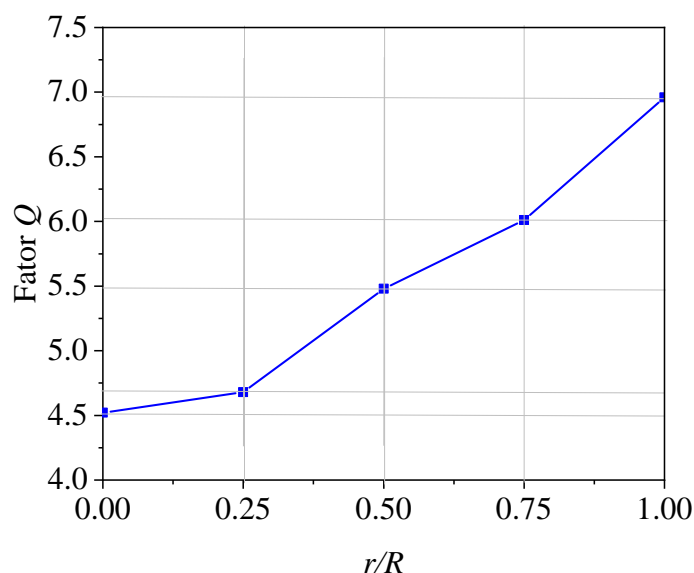


Figura 4.16 – Variação do fator Q com geometria do quadrado inferior Q_2 com lado $l = l_2$.

4 Os resultados das Figura 4.13 e 4.15, mostram que a frequência de ressonância
 5 sofre um deslocamento para uma faixa maior quando analisamos um ressonador com
 6 geometria em forma de um disco. Por outro lado, com a geometria quadrada temos um
 7 nível de transmitância menor (maior filtragem da onda). Comparando as Figuras 4.14 e

1 4.16, verificamos que o fator Q é maior quando temos uma geometria em forma de disco.
 2 Constatamos, ainda, que o fator Q , devido ao ressonador superior Q_1 , é maior que o fator
 3 Q devido ao ressonador inferior Q_2 .

4 O efeito de acoplamento entre dois ressonadores quadrados de fosforeno Q_1 e Q_2 ,
 5 também foi investigado. Para o ressonador superior Q_1 da estrutura escolhemos $l_1 = 120$
 6 nm e para o ressonador inferior Q_2 optamos por $l_2 = 200$ nm. A Figura 4.17 mostra os
 7 níveis de transmitância e as frequências de ressonância devido a esse acoplamento. A
 8 curva em azul mostra o nível de transmitância devido somente ao ressonador quadrado Q_1 ,
 9 isolado. Já a curva em preto mostra o nível de transmitância devido somente ao ressonador
 10 Q_2 , também isolado. E a curva em vermelho mostra os níveis de transmitância devido ao
 11 acoplamento entre os ressonadores quadrados Q_1 e Q_2 .

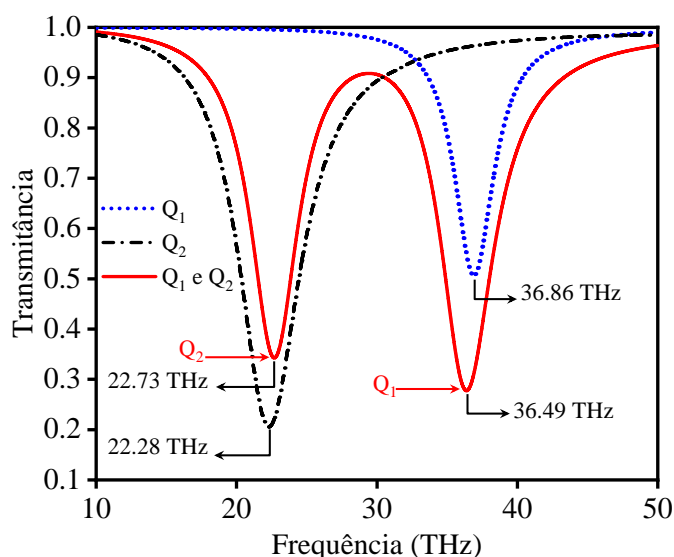


Figura 4.17 – Níveis de transmitância devido aos ressonadores quadrados de fosforeno Q_1 e Q_2 . Em azul, transmitância devido somente ao ressonador Q_1 isolado. Em preto, transmitância devido ao ressonador Q_2 isolado. Em vermelho, transmitância devido ao acoplamento dos ressonadores Q_1 e Q_2 .

12 Temos, assim, dois modos de ressonância devido ao efeito do acoplamento entre
 13 esses dois ressonadores. A análise da influência isolada dos ressonadores é imprescindível
 14 para verificação da operacionalidade da estrutura.

15 Os resultados mostrados nas Figuras 4.9, 4.10, 4.11, 14.13, 14.14, 14.15 e 14.16 nos
 16 permitiram optar pela geometria quadrada para os ressonadores. Isso deve-se ao fato dessa
 17 geometria apresentar uma boa resposta em relação à diferença nas faixas de frequência
 18 de ressonância e também uma boa filtragem da onda, o que é satisfatório para o filtro de
 19 banda dupla proposto.

20 A Figura 4.18 mostra a distribuição da componente E_z do campo elétrico e da
 21 corrente elétrica na superfície dos ressonadores quadrados de fosforeno.

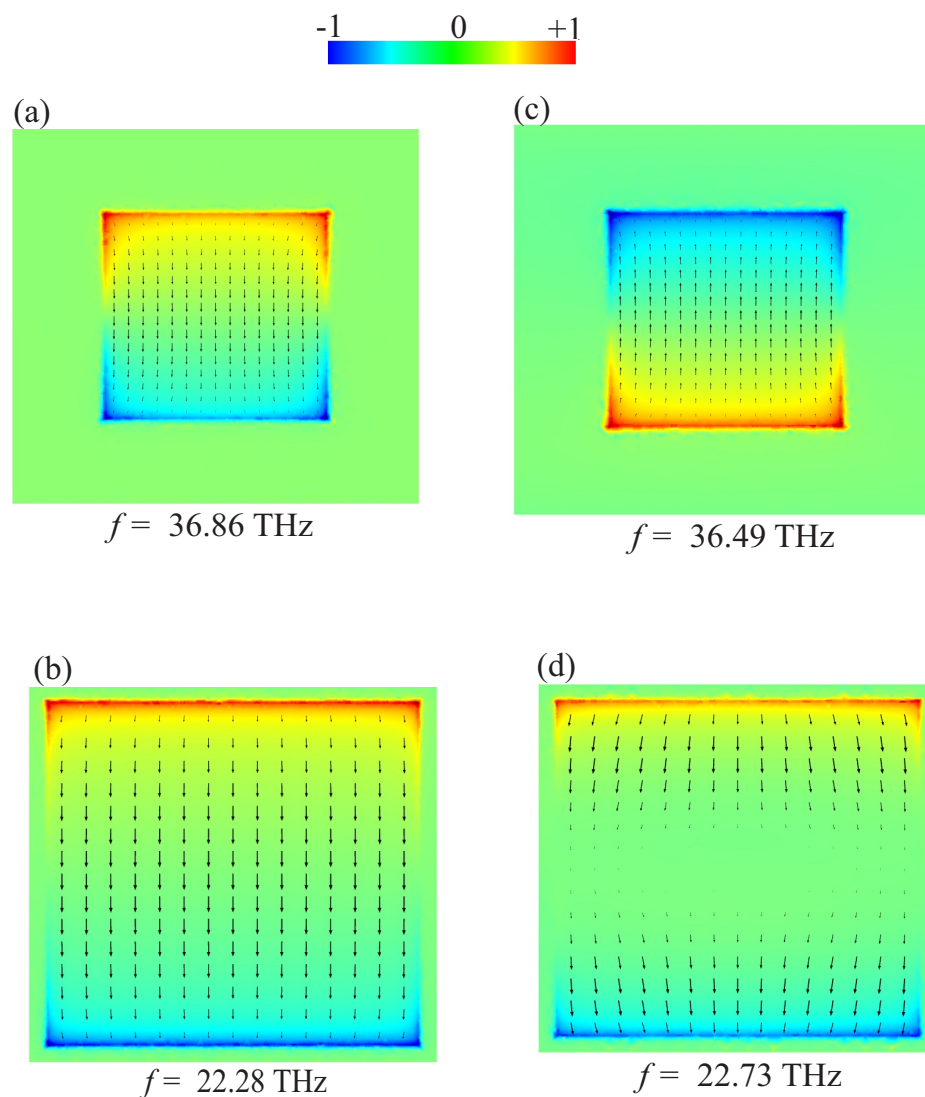


Figura 4.18 – Distribuição da componente do campo elétrico e da corrente elétrica na superfície. (a)-(b) para os os ressonadores separados, (c)-(d) Para os ressonadores acoplados.

1 Os modos dipolares e a direção da corrente elétrica, apresentados na Figura 4.18,
2 mostram-se bem definidos na superfície do fosforeno.

3 Verificamos que os níveis de transmitância, bem como as faixas de frequências de
4 ressonância dessa estrutura são razoáveis no que diz respeito ao nível de isolamento e às
5 frequências de operacionalidade, o que pode ser uma boa proposta de um filtro de banda
6 dupla.

1 **4.4 Filtro de infravermelho com duas folhas de fosforeno planar**
 2 **ajustável, independente da polarização e com baixa dependência**
 3 **do ângulo de incidência.**

4 **4.4.1 Uma folha de fosforeno posicionada sobre o substrato de h-BN**

5 Os espectros de transmitância (curvas sólidas) e reflectância (curvas tracejadas)
 6 foram calculados numericamente para ângulos de polarização $\phi = 0^\circ$ (eixo x), 90° (eixo y)
 7 e 45° (ver Figura 3.3). O ângulo θ é fixado em 0° (incidência normal).

8 A transmitância $T(\omega)$ e a reflectância $R(\omega)$ são calculadas por $T(\omega) = |t(\omega)|^2$ e
 9 $R(\omega) = |r(\omega)|^2$, e $t(\omega)$ e $r(\omega)$ são definidas por $t(\omega) = E^t/E^i$ e $r(\omega) = E^r/E^i$, onde E^t ,
 10 E^r e E^i são os campos elétricos transmitido, refletido e incidente, respectivamente. A
 11 absorbância A é definida por $A = 1 - R - T$.

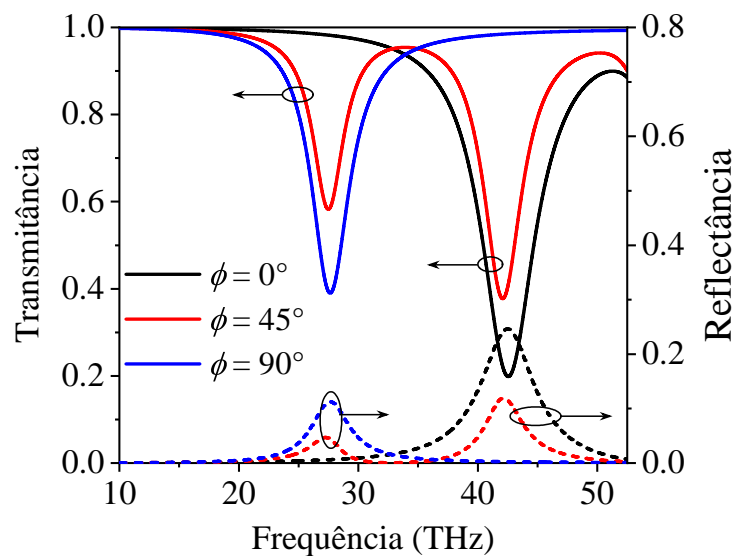


Figura 4.19 – Espectros de transmitância e reflectância para a estrutura com uma folha quadrada de fosforeno posicionada sobre o dielétrico para os ângulos de polarização ϕ iguais a 0° , 45° e 90° . Modificado de [42]

12 Os resultados mostrados na Figura 4.19 indicam que os níveis de transmitância
 13 e a frequências de ressonância dependem fortemente da polarização e da onda incidente.
 14 Em particular, para o ângulo de 45° , existem dois mínimos nas frequências 27,65 THz e
 15 42,14 THz. Isso ocorre devido à influência da anisotropia condutividade do fosforeno nas
 16 direções AC (σ_{xx}) e ZZ (σ_{yy}). Nos quadrados de fosforeno, são excitados modos dipolares
 17 orientados por borda de SPPs.

A Figura 4.20 mostra a distribuição da componente E_z do campo elétrico e a corrente elétrica na superfície do ressonador quadrado de fosforeno para o ângulo de polarização ϕ igual a 0° (ver Figura 4.20(a)), 45° (ver Figuras 4.20(b)-(c)) e 90° (ver

Figura 4.20(d)). Quando a estrutura é excitada em 45° , observa-se o surgimento de dois dipolos na superfície do fosforeno, mas para as polarizações 0° e 90° , existe somente um mínimo de ressonância.

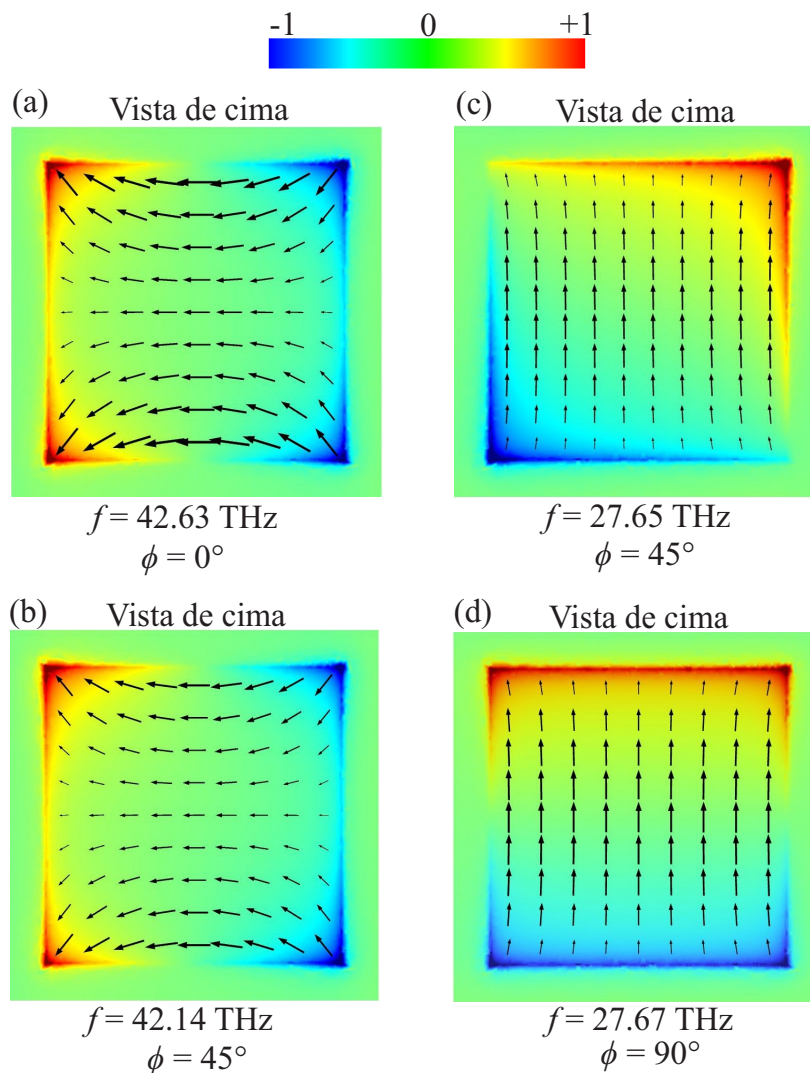


Figura 4.20 – (a)-(d) Distribuição da componente E_z do campo elétrico e a corrente na superfície quadrada de fosforeno para os ângulos de polarização 0° , 45° e 90° . A camada de fosforeno é posicionada sobre a folha dielétrica de h-BN. Modificado de [42]

A Figura 4.21 mostra a distribuição lateral da componente E_z de campo elétrico na estrutura. Pode-se notar uma concentração típica de cargas nas bordas definida por E_z .

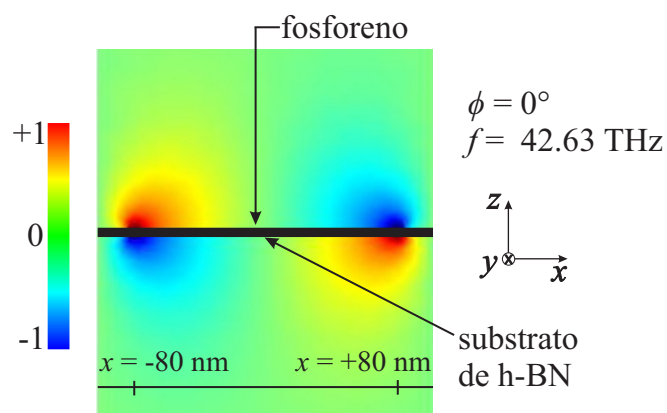


Figura 4.21 – Vista lateral da distribuição da componente E_z do campo elétrico na superfície do quadrado de fosforeno com o substrato dielétrico de h-BN. Modificado de [42]

4.5 Duas folhas quadradas de fosforeno em sanduíche com uma folha de h-BN

Agora, adicionamos uma folha quadrada de fosforeno na face inferior da folha de h-BN com a mesma orientação de seus eixos AC e ZZ como na camada superior. A Figura 4.22 mostra as curvas de transmitância e reflectância para essa estrutura.

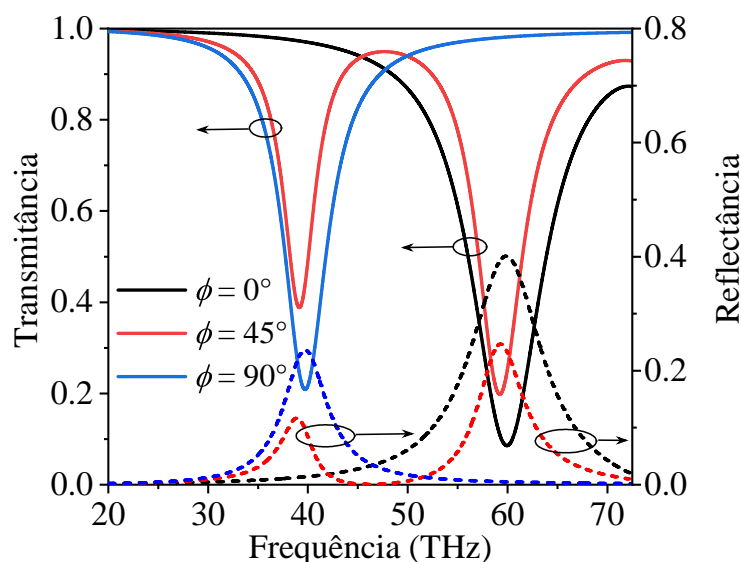


Figura 4.22 – Espectros de transmitância e reflectância para a polarização em $\phi = 0^\circ$, $\phi = 45^\circ$ e $\phi = 90^\circ$ para o caso de duas camadas de fosforeno com o substrato dielétrico entre ambas. Modificado de [42]

Observe que, em comparação com a Figura 4.19, os mínimos de ressonância foram deslocados para frequências mais altas devido à maior condutividade da camada dupla de fosforeno, e eles correspondem a níveis mais altos de absorbância.

4.6 Duas folhas quadradas de fosforeno em sanduíche com uma camada de h-BN e com o quadrado inferior rotacionado em 90°

Agora, modelamos um sistema de duas folhas quadradas de fosforeno com uma folha dielétrica de h-BN de espessura $h = 1,5$ nm entre ambas, onde a folha inferior é rotacionada por 90° em relação à superior (veja Figura 3.4(c) e Figura 3.4(d)). Essa rotação e a pequena distância entre os quadrados levam a características de estrutura semelhantes às de uma folha com um material isotrópico bidimensional.

Sabemos que o arranjo com a célula unitária quadrada com simetria de rotação é descrita pelo grupo de simetria C_{4v} , é independente da polarização [47]. A Figura 4.23(a) mostra as curvas de transmitância e reflectância numéricas e também com resultado

analítico calculado com a teoria dos modos acoplados (TCMT), representados por pontos verdes, para os três ângulos de polarização com a frequência de ressonância $\omega_0 = 52.92$ THz. Esse resultado mostra que, nesta configuração de três camadas, o filtro é caracterizado pela independência do ângulo de polarização. O nível de transmitância é $T(\omega) = 0,1$. Além disso, mostramos o diagrama do nível de transmitância desta estrutura sem alteração da frequência de operação com variação de ϕ na Figura 4.23(b).

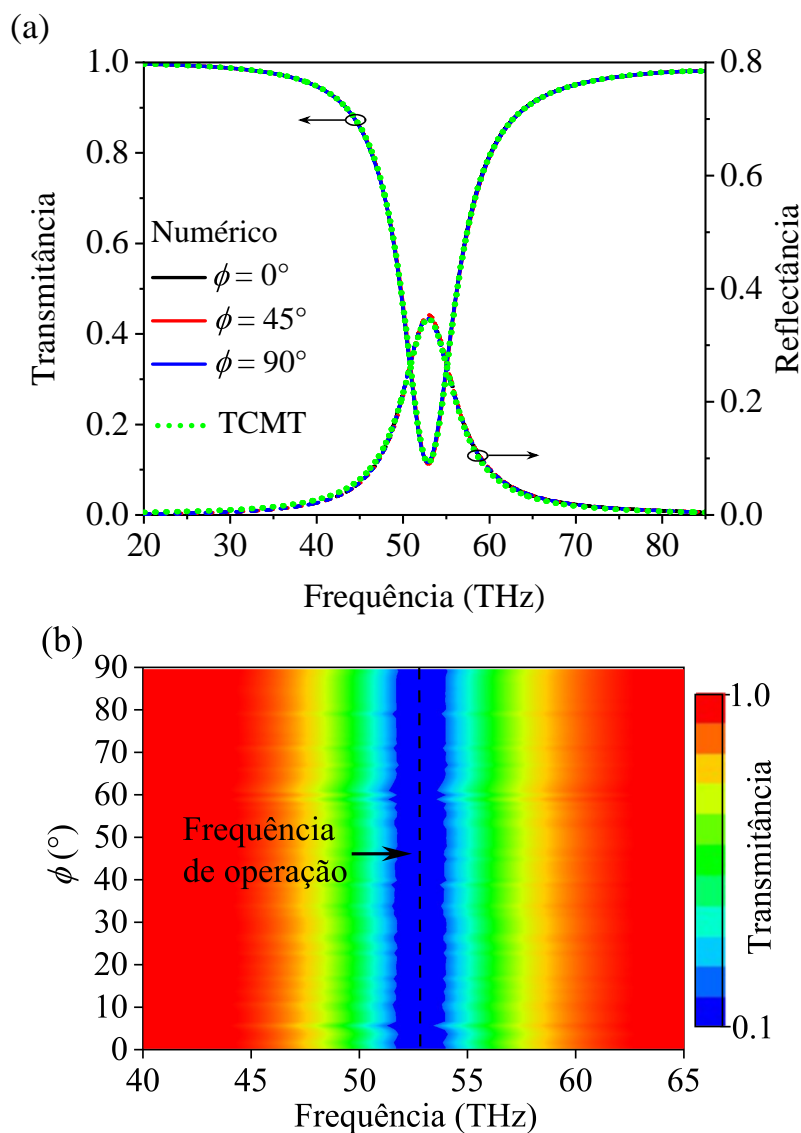


Figura 4.23 – (a) Espectros de transmitância e reflectância para $\phi = 0^\circ$, $\phi = 45^\circ$ e $\phi = 90^\circ$, e TCMT analítico representados por pontos verdes; (b) Uma visão da evolução da transmitância para diferentes valores de ϕ , para duas camadas de fosforeno com um substrato dielétrico de h-BN entre ambos, com o quadrado de baixo rotacionado em 90° . Modificado de [42]

A Figura 4.24 mostra a componente E_z do campo elétrico e da corrente nas camadas de fosforeno superior e inferior. Observe que a estrutura das correntes elétricas, nas duas folhas de fosforeno, é praticamente a mesma. Assim, a pequena distância de acoplamento de $h = 1,5$ nm e a rotação do quadrado inferior em relação ao superior levam à isotropia do arranjo.

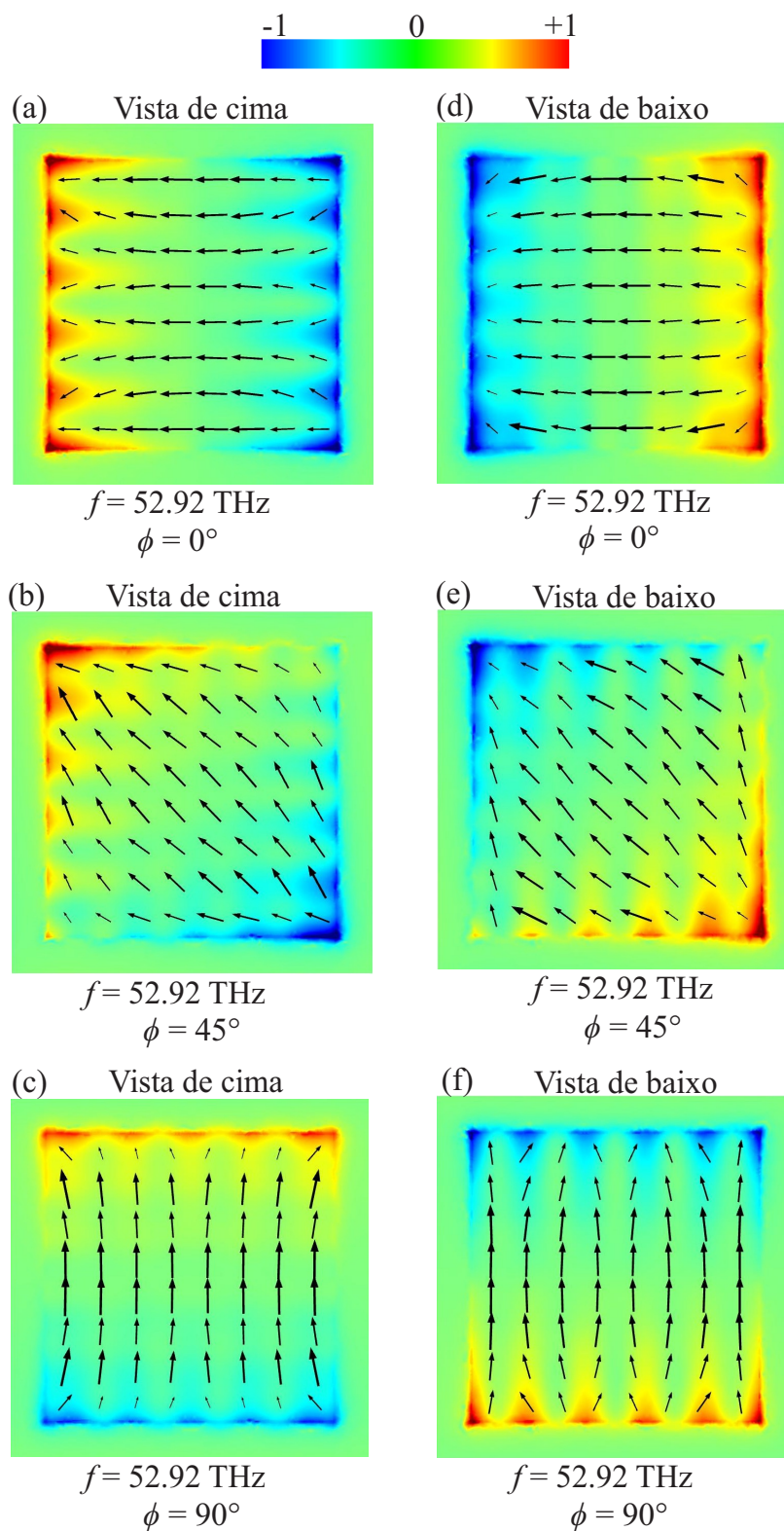


Figura 4.24 – (a)-(f) Distribuição da componente do campo elétrico e da corrente elétrica na superfície, com a configuração de duas camadas de fosforeno com o substrato dielétrico entre ambas para o ângulo de polarização variando em 0° , 45° e 90° . Modificado de [42]

Para reforçar ainda mais a afirmação acima, utilizamos a teoria de modos acoplados temporal para descrever as características do arranjo (veja Figura 3.4(b)). O modelo

TCMT do ressonador pode ser expresso de acordo com [48, 49]

$$\frac{dA_p}{dt} = j\omega_p A_p - \frac{A_p}{\tau_{i,p}} - \frac{A_p}{\tau_{w,p}} + j\mu_p S_{in}, \quad (4.1)$$

onde p é o número de modos ressonantes do ressonador em uma célula unitária e a frequência de ressonância do modo é ω_p . O ressonador está acoplado com a onda incidente S_{in} e a onda saída S_{out} , a energia armazenada é A_p , $\tau_{i,p}$ e $\tau_{w,p}$ são as taxas de decaimento devido à perda intrínseca e à perda de acoplamento do μ_p é o acoplamento entre os modos e a onda incidente.

Portanto, os coeficientes de transmissão e reflexão do sistema são dados por:

$$t(\omega) = 1 - \frac{\mu_p^2}{(j\omega - j\omega_p + 1/\tau_{i,p} + 1/\tau_{w,p})}, \quad (4.2)$$

onde

$$r(\omega) = 1 - t(\omega). \quad (4.3)$$

Pode ser observado na Figura 4.23(a) que os resultados numéricos estão em bom acordo com os fornecidos pela abordagem baseada em TCMT. A aproximação entre esses resultados indica que o modelo TCMT pode descrever com precisão os fenômenos físicos na estrutura, fornecendo uma boa representação das propriedades ópticas do sistema.

A Figura 4.25 apresenta uma vista lateral da distribuição da componente E_z do campo elétrico mostrando os dipolos na superfície do fosforeno. Comparando a Figura 4.21 e a Figura 4.25, é possível ver que a estrutura do campo nos ressonadores de uma camada e de dupla camada é semelhante.

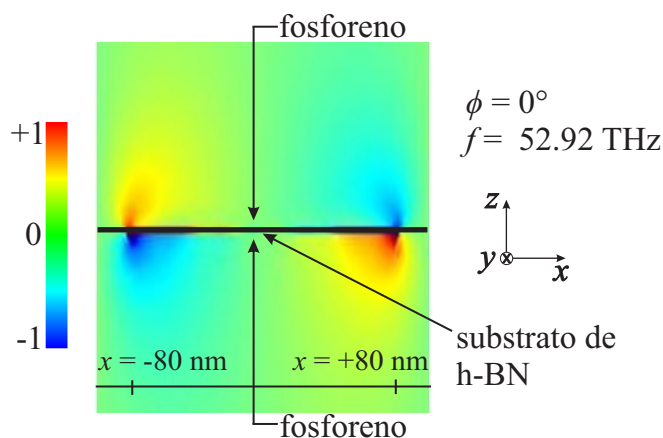


Figura 4.25 – Vista lateral da distribuição da componente E_z do campo elétrico mostrando os dipolos na superfície das duas camadas de fosforeno com o dielétrico entre eles. Modificado de [42]

4.6.1 Duas folhas quadradas de fosforeno com o quadrado inferior rotacionado em 90° : efeito do ângulo de incidência

O ângulo de incidência da onda pode causar uma mudança nas características do filtro. A Figura 4.26(a) mostra os níveis de transmitância e de reflectância para o ângulo de incidência θ igual a 0° , 20° , 40° e 60° e ϕ fixado em 0° . No diagrama da evolução dos níveis de transmitância mostrados na Figura 4.26(b), observa-se que, mesmo com uma ampla variação do ângulo de incidência para um ângulo de polarização de $\phi = 0^\circ$, a frequência de operação do filtro passa-banda não muda. Se o ângulo de incidência θ variar de 0° a 60° , a transmitância aumenta de $T(\omega) = 0,1$ para $T(\omega) = 0,28$. Além disso, a largura de banda do filtro diminui com o aumento do ângulo de incidência θ , indicando que o filtro se torna mais seletivo. Portanto, enquanto a frequência de operação do filtro de fosforeno permanece constante, tanto a transmitância quanto a largura de banda são sensíveis às variações do ângulo de incidência.

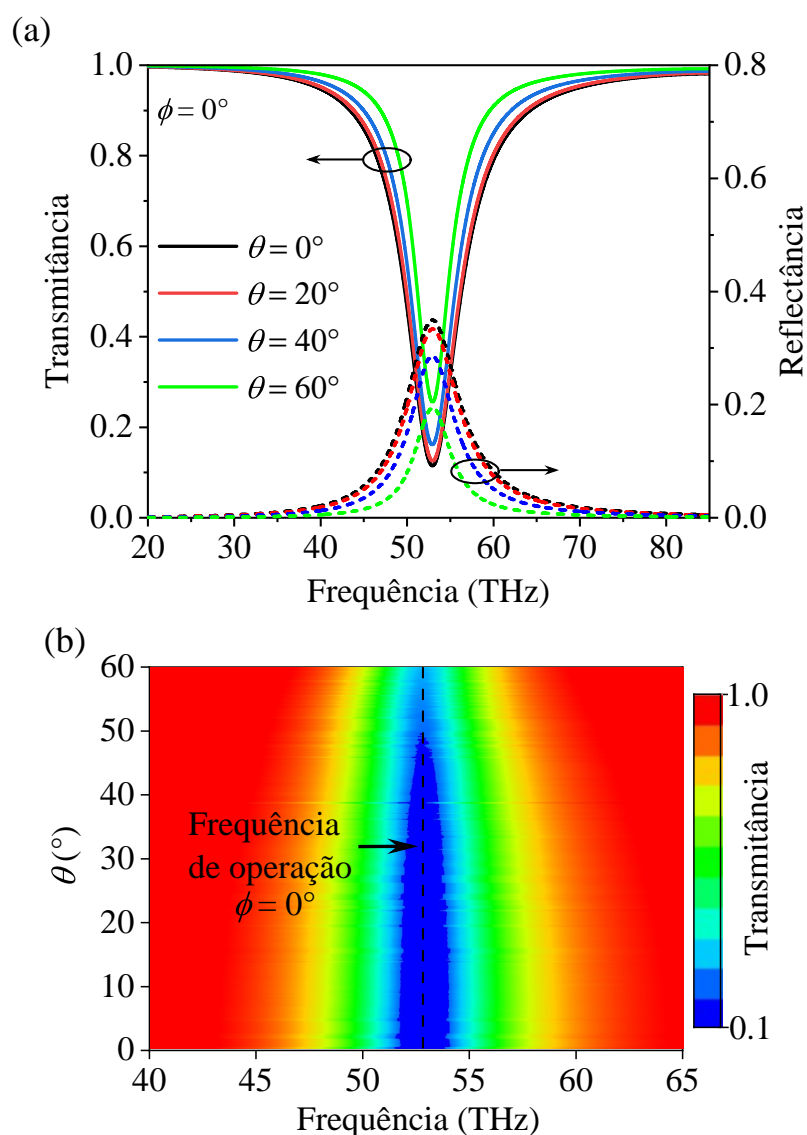


Figura 4.26 – (a) Espectros de transmitância e refletância para ângulos de incidência θ iguais a 0° , 20° , 40° e 60° para ϕ fixado em 0° , (b) Evolução da transmitância com o ângulo de incidência θ para ϕ fixado em 0° . Modificado de [42]

Na Figura 4.27 apresentamos a mesma variação de θ , mas desta vez para ϕ fixado em 45° .

Comparando os resultados das Figura 4.26 e Figura 4.27, podemos verificar que a frequência de ressonância não muda. A variação do ângulo θ de 0° a 40° causa apenas pequenas mudanças no nível de transmitância e na largura de banda.

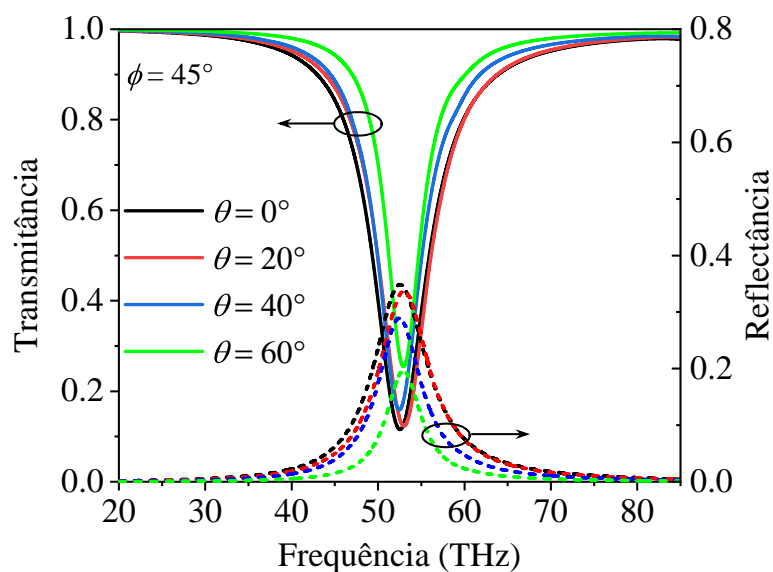


Figura 4.27 – Espectros de transmitância e reflectância para ângulos de incidência θ iguais a 0° , 20° , 40° e 60° para ϕ fixado em 45° . Modificado de [42]

Na Figura 4.28 mostramos a dependência do fator Q em relação a θ .

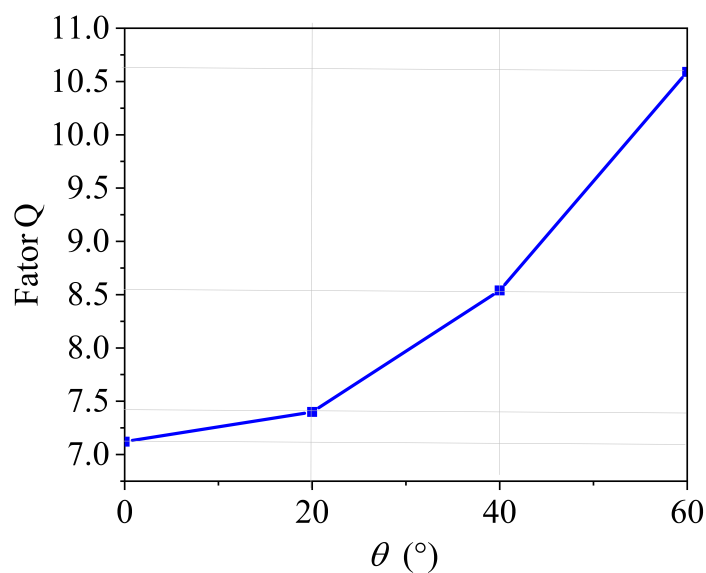


Figura 4.28 – Fator Q versus ângulo de incidência θ . Modificado de [42]

A Figura 4.29 apresenta curvas de transmitância e de reflectância para o parâmetro h igual a 1 nm, 1,5 nm e 2 nm, mostrando variações muito pequenas nos níveis de transmitância, largura de banda e frequência de ressonância, resultando em um fator Q invariante.

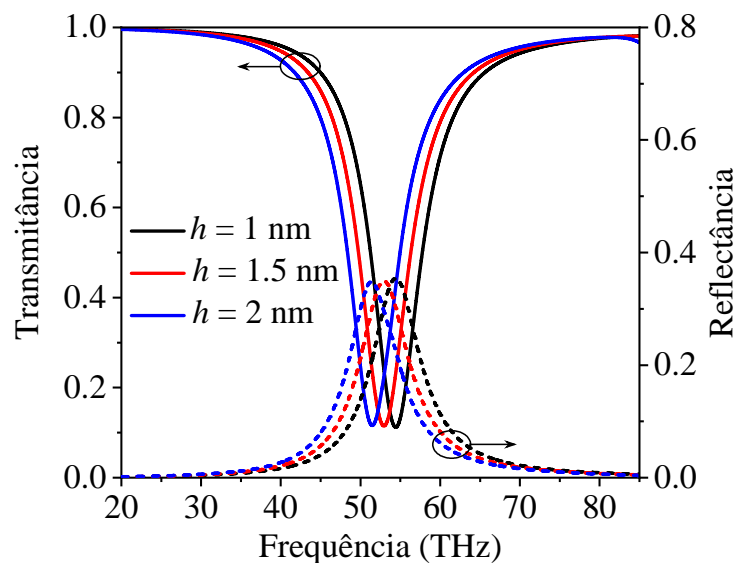


Figura 4.29 – Dependência da frequência da transmitância e refletância para h igual a 1 nm, 1,5 nm e 2 nm. Modificado de [42]

4.6.2 Controle por campo elétrico externo

A Figura 4.30 demonstra a dependência da transmitância e refletância do arranjo em relação à densidade de portadores de carga n do fosforeno. Quando esse parâmetro aumenta, a frequência de ressonância se desloca para valores mais altos porque a densidade de portadores de carga depende da energia de Fermi do fosforeno, que, por sua vez, depende do campo elétrico aplicado normalmente à superfície do fosforeno [13]. Portanto, assim como nos componentes de grafeno, aqui há a possibilidade de ajustar dinamicamente a frequência de ressonância do filtro. Existem várias maneiras de fazer esse controle dinâmico da estrutura sem interferir nos resultados obtidos, como na tecnologia de grafeno [50, 51]. Observe também que uma densidade de portadores de carga mais alta leva a um aumento das perdas de inserção do fosforeno e, conseqüentemente, a um nível mais baixo de transmitância e um nível mais alto de refletância do arranjo.

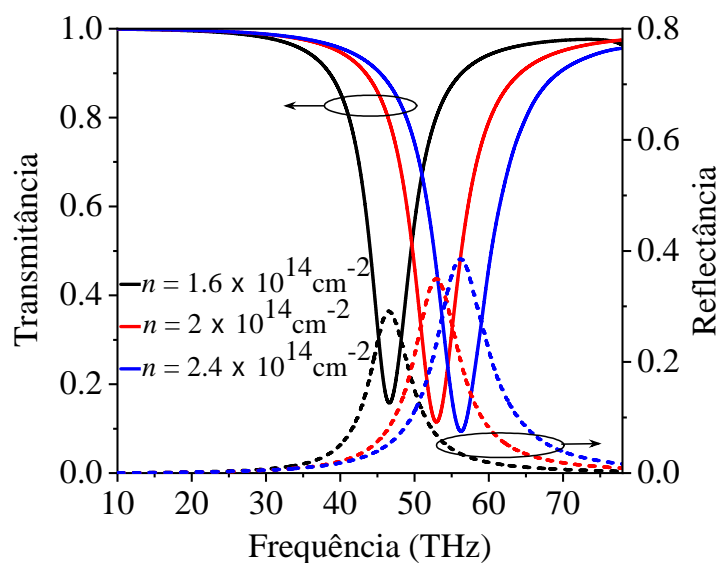


Figura 4.30 – Dependência da frequência da transmitância e refletância para diferentes densidades de portadores de carga do fosforeno. Modificado de [42]

4.6.3 Novidades da estrutura

Os filtros apresentados na Tabela 4.5 variaram em materiais, desempenho e capacidade de ajuste. O dispositivo sugerido baseado em fosforeno no substrato dielétrico de h-BN oferece algumas vantagens em comparação com os componentes de grafeno [52–54]. Além disso, o filtro de fosforeno proposto em nosso trabalho exibe uma transmitância de 0,1, que é muito baixa. Isso o distingue do filtro onde se tem fosforeno em um substrato de SiO₂ [15], que tem uma característica de banda dupla e uma transmitância muito maior. Outra vantagem do filtro de fosforeno sugerido é que sua transmitância é independente de polarização, tornando-o mais robusto e versátil sob várias condições de operação. Em contraste, materiais como fosforeno sobre SiO₂ [15] apresentam desempenho dependente de polarização. Uma característica importante do filtro de fosforeno em h-BN (este trabalho) é sua capacidade de ajuste, que varia de 46 a 57 THz, permitindo o ajuste fino da ressonância operacional em um intervalo de frequência elevada.

Tabela 4.5

Os Materiais, frequência de operação, desempenho e capacidade de ajuste de filtros THz.

Materiais	Frequência de operação	Performance	Capacidade de ajuste
Grafeno (PMMA)	(Banda quádrupla) 1,746; 2,487; 4,197 e 5,451 THz	(Transmitância) 22,3 dB	1,25 a 5,85 THz
Grafeno Pet	(Multi-bandas) 0,6 a 2,8 THz	(Transmissão) $\approx 0,95$	eletricamente
Grafeno e Metal	(Passabanda) 1,98 a 3,95 THz	(Transmitância) > 90%	2 a 66%
Fosforeno e SiO ₂	(Banda dupla) 32,81 e 50,04 THz	(Transmitância) 0,51 e 0,28 (dependente de polarização)	31 a 33; e 48 a 52 THz
Fosforeno e h-BN (este trabalho)	Banda única 52,92 THz	(Transmitância) 0,1 (independente de polarização)	46 a 57 THz

Adaptado de [42].

O filtro de fosforeno em h-BN (este trabalho) é notável por sua operação em alta frequência (52,92 THz), baixa transmitância (eficiência de filtragem de sinal) e independência de polarização. Essas características o tornam ideal para aplicações avançadas, como filtros e sistemas de comunicação de alta frequência, oferecendo vantagens claras sobre outros materiais em desempenho e versatilidade.

1 5 Conclusão

2 Com os resultados obtidos com a estrutura da Seção 4.1 é possível verificar que a
3 mesma pode desempenhar uma operacionalidade de um filtro de banda dupla dependente
4 da polarização e também com as ressonâncias contráveis pela dopagem eletrônica, operando
5 nas regiões THz ou IR (infravermelho). A frequência de operação central do filtro de banda
6 dupla pode ser sintonizado variando a dopagem de elétrons por um campo elétrico externo,
7 possibilitando um controle dinâmico da frequência de operação.

8 A partir das curvas de transmissão obtidas com a modelagem de dois discos
9 ressonadores mostradas na Seção 4.2, verificamos que esses resultados são importantes
10 no que diz respeito ao estudo das ressonâncias e também dos níveis de transmitância.
11 O controle das frequências de ressonância pode ser obtido pela variação da dopagem
12 eletrônica na superfície do fosforeno.

13 A estrutura da Seção 4.3 apresentou bons resultados no que diz respeito à análise do
14 fator Q com a variação da geometria dos ressonadores acoplados ao substrato dielétrico. Os
15 resultados proporcionaram a escolha de um critério para escolha da geometria e também
16 das dimensões dos ressonadores. Com as análises do arranjo periódico com dois ressonadores
17 quadrados de fosforeno com tamanhos diferentes, verificamos que os níveis de transmitância
18 e os modos de ressonância fornecem informações importantes de operacionalidade no que
19 diz respeito à filtragem e às bandas de frequência. Com base que se tem na literatura,
20 esses resultados mostraram boa funcionalidade para operar como um filtro de banda dupla
21 ajustável pela dopagem eletrônica do fosforeno na estrutura.

22 Modelamos e analisamos uma estrutura periódica com duas camadas quadradas
23 de fosforeno em uma célula unitária separadas por uma fina folha dielétrica de h-BN
24 (Seção 4.4). O objetivo com essa estrutura foi criar um filtro eletromagnético de banda
25 única, independente do ângulo de polarização e com baixa dependência do ângulo de
26 incidência. Na estrutura modelada, o dispositivo opera com a frequência de ressonância ω_0
27 = 52,92 THz e possui um nível de transmitância $T = 0.1$ o que pode ser considerada uma
28 ótima filtragem. O fator de qualidade da ressonância é $Q = 7.12$. Os resultados numéricos
29 estão em bom acordo com os resultados analíticos obtidos por meio da teoria de modos
30 acoplados temporal (TCMT). A estrutura sugerida pode ser usada como filtro, interruptor,
31 modulador e sensor dinamicamente ajustável para THz e infravermelho.

Referências

- [1] 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.
- [2] F. Xia, H. Wang, D. Xiao, M. Dubey, and A. Ramasubramaniam, “Two-dimensional material nanophotonics,” *Nature Photonics*, vol. 8, no. 12, pp. 899–907, 2014. Citado na página 20.
- [3] C. Zeng, H. Lu, D. Mao, Y. Du, H. Hua, W. Zhao, J. Zhao, *et al.*, “Graphene-empowered dynamic metasurfaces and metadevices,” *Opto-Electron. Adv*, vol. 5, no. 4, p. 200098, 2022. Citado na página 20.
- [4] X. Ling, H. Wang, S. Huang, F. Xia, and M. S. Dresselhaus, “The renaissance of black phosphorus,” *Proceedings of the National Academy of Sciences*, vol. 112, no. 15, pp. 4523–4530, 2015. Citado 2 vezes nas páginas 20 e 37.
- [5] H. Liu, Y. Du, Y. Deng, and D. Y. Peide, “Semiconducting black phosphorus: synthesis, transport properties and electronic applications,” *Chemical Society Reviews*, vol. 44, no. 9, pp. 2732–2743, 2015. Citado 4 vezes nas páginas 20, 28, 29 e 37.
- [6] A. Rodin, A. Carvalho, and A. C. Neto, “Strain-induced gap modification in black phosphorus,” *Physical review letters*, vol. 112, no. 17, p. 176801, 2014. Citado 2 vezes nas páginas 20 e 26.
- [7] Z. Liu, H. Wang, H. Cao, D. Xie, C. Li, H. Yang, W. Yao, and A. K. Cheetham, “Ultratough hydrogen-bond-bridged phosphorene films,” *Advanced Materials*, vol. 34, no. 39, p. 2203332, 2022. Citado na página 20.
- [8] X. Wang and S. Lan, “Optical properties of black phosphorus,” *Advances in Optics and photonics*, vol. 8, no. 4, pp. 618–655, 2016. Citado 3 vezes nas páginas 20, 27 e 37.
- [9] T. Low, R. Roldán, H. Wang, F. Xia, P. Avouris, L. M. Moreno, and F. Guinea, “Plasmons and screening in monolayer and multilayer black phosphorus,” *Physical review letters*, vol. 113, no. 10, p. 106802, 2014. Citado na página 20.
- [10] Z. Liu and K. Aydin, “Localized surface plasmons in nanostructured monolayer black phosphorus,” *Nano letters*, vol. 16, no. 6, pp. 3457–3462, 2016. Citado 2 vezes nas páginas 20 e 37.

- [11] P. K. Venuthurumilli, P. D. Ye, and X. Xu, “Plasmonic resonance enhanced polarization-sensitive photodetection by black phosphorus in near infrared,” *ACS nano*, vol. 12, no. 5, pp. 4861–4867, 2018. Citado na página 20.
- [12] R. K. Mishra, J. Sarkar, I. Chianella, S. Goel, and H. Y. Nezhad, “Black phosphorus: The rise of phosphorene in 2D materials applications,” *Next Materials*, vol. 4, p. 100217, 2024. Citado 2 vezes nas páginas 20 e 37.
- [13] B. Deng, V. Tran, Y. Xie, H. Jiang, C. Li, Q. Guo, X. Wang, H. Tian, S. J. Koester, H. Wang, *et al.*, “Efficient electrical control of thin-film black phosphorus bandgap,” *Nature communications*, vol. 8, no. 1, pp. 1–7, 2017. Citado 4 vezes nas páginas 20, 37, 44 e 66.
- [14] A. Islam, A. van den Akker, and P. X.-L. Feng, “Polarization sensitive black phosphorus nanomechanical resonators,” *Optical Materials Express*, vol. 9, no. 2, pp. 526–535, 2019. Citado na página 20.
- [15] C. Oliveira, V. Dmitriev, G. Melo, and W. Castro, “Tunable dual-band filter based on monolayer black phosphorus,” *Microwave and Optical Technology Letters*, vol. 64, no. 7, pp. 1170–1175, 2022. Citado 2 vezes nas páginas 20 e 67.
- [16] H. Li, X. Zhang, X. Xiao, and Y. Xu, “Tunable anisotropic absorption based on black phosphorous multilayer structures,” *Optik*, vol. 232, p. 166579, 2021. Citado na página 20.
- [17] D. Kundu, S. Roy, R. Mustak, M. M. Eid, A. N. Z. Rashed, N. Mondol, A. I. Ferdous, M. A. Hossain, and M. B. Hossain, “Feasibility of halide perovskite material-based hybrid surface plasmon resonance biosensor for formalin detection: a numerical investigation,” *Plasmonics*, pp. 1–17, 2024. Citado na página 20.
- [18] D. Kundu, M. Enzamam-Ul-Haque, A. I. Ferdous, K. S. Noor, M. S. Islam, S. Hossain, M. M. Eid, A. N. Z. Rashed, and S. H. Ahammad, “Propagation characteristics based three dimensional refractive index configurations in photonic crystal fibers for terahertz range petroleum sensing,” *Brazilian Journal of Physics*, vol. 54, no. 5, p. 150, 2024. Citado na página 20.
- [19] A. I. Ferdous, M. N. R. Naim, K. S. Noor, D. Kundu, and A. N. Z. Rashed, “Innovative refractive index sensor utilizing terahertz spectrum for early cancer detection: a photonic crystal fiber approach,” *Cell Biochemistry and Biophysics*, pp. 1–17, 2024. Citado na página 20.
- [20] A. Upadhyay, S. Singh, B. Chaudhary, R. Kumar, P. P. Singh, M. Daher, P. Bhardwaj, M. M. Eid, and A. N. Z. Rashed, “Biosensor performance signature enhancement

- with silver-mxene-graphene for brain tumor diagnosis through the employment of surface plasmon resonance,” *Plasmonics*, pp. 1–12, 2024. Citado na página 20.
- [21] S. A. Rafi, W. Emon, A. A. Rafsan, R. R. Mahmud, M. F. Nayan, M. M. Eid, and A. N. Z. Rashed, “Optical based surface plasmon resonance sensor for the detection of the various kind of cancerous cell,” *Cell Biochemistry and Biophysics*, pp. 1–27, 2024. Citado na página 20.
- [22] Y. Cai, S. Li, Y. Zhou, X. Wang, K.-D. Xu, R. Guo, and W. T. Joines, “Tunable and anisotropic dual-band metamaterial absorber using elliptical graphene-black phosphorus pairs,” *Nanoscale Research Letters*, vol. 14, pp. 1–7, 2019. Citado na página 20.
- [23] J. Wang, Y. Jiang, and Z. Hu, “Dual-band and polarization-independent infrared absorber based on two-dimensional black phosphorus metamaterials,” *Optics Express*, vol. 25, no. 18, pp. 22149–22157, 2017. Citado na página 20.
- [24] J. D. Jackson, “Classical electrodynamics,” 1999. Citado 3 vezes nas páginas 22, 24 e 25.
- [25] J. M. F. Bassalo, *Eletrodinâmica clássica*. Editora Livraria da Física, 2007. Citado 3 vezes nas páginas 22, 24 e 25.
- [26] P. A. D. Gonçalves and N. M. Peres, *An introduction to graphene plasmonics*. World Scientific, 2016. Citado 4 vezes nas páginas 22, 23, 24 e 25.
- [27] J. D. Kraus, “Eletromagnetismo,” 1978. Citado 4 vezes nas páginas 23, 24, 25 e 26.
- [28] C. T. A. Johnk, “Engineering electromagnetic fields and waves,” *New York*, p. 667, 1975. Citado 2 vezes nas páginas 24 e 25.
- [29] S. Appalakondaiah, G. Vaitheeswaran, S. Lebegue, N. E. Christensen, and A. Svane, “Effect of van der waals interactions on the structural and elastic properties of black phosphorus,” *Physical Review B*, vol. 86, no. 3, p. 035105, 2012. Citado na página 26.
- [30] E. Cappelluti, R. Roldán, J. Silva-Guillén, P. Ordejón, and F. Guinea, “Tight-binding model and direct-gap/indirect-gap transition in single-layer and multilayer mos 2,” *Physical Review B*, vol. 88, no. 7, p. 075409, 2013. Citado na página 26.
- [31] A. Castellanos-Gomez, “Black phosphorus: narrow gap, wide applications,” *The journal of physical chemistry letters*, vol. 6, no. 21, pp. 4280–4291, 2015. Citado na página 26.
- [32] T. H. Lee, S. Y. Kim, and H. W. Jang, “Black phosphorus: Critical review and potential for water splitting photocatalyst,” *Nanomaterials*, vol. 6, no. 11, p. 194, 2016. Citado 2 vezes nas páginas 26 e 27.

- [33] C. R. Espinoza, D. Ryndyk, A. Dianat, R. Gutierrez, and G. Cuniberti, “First principles study of field effect device through van der waals and lateral heterostructures of graphene, phosphorene and graphane,” *Nano Materials Science*, 2021. Citado na página 27.
- [34] V. Chaudhary, P. Neugebauer, O. Mounkachi, S. Lahbabi, and A. El Fatimy, “Phosphorene—an emerging two-dimensional material: recent advances in synthesis, functionalization, and applications,” *2D Materials*, vol. 9, no. 3, p. 032001, 2022. Citado 2 vezes nas páginas 27 e 28.
- [35] J. B. Smith, D. Hagaman, and H.-F. Ji, “Growth of 2d black phosphorus film from chemical vapor deposition,” *Nanotechnology*, vol. 27, no. 21, p. 215602, 2016. Citado na página 29.
- [36] H. Yuan, X. Liu, F. Afshinmanesh, W. Li, G. Xu, J. Sun, B. Lian, A. G. Curto, G. Ye, Y. Hikita, *et al.*, “Polarization-sensitive broadband photodetector using a black phosphorus vertical p–n junction,” *Nature nanotechnology*, vol. 10, no. 8, pp. 707–713, 2015. Citado na página 29.
- [37] C. Liu, H. Li, H. Xu, M. Zhao, C. Xiong, B. Zhang, and K. Wu, “Slow light effect based on tunable plasmon-induced transparency of monolayer black phosphorus,” *Journal of Physics D: Applied Physics*, vol. 52, no. 40, p. 405203, 2019. Citado na página 30.
- [38] M. Vajdi, F. S. Moghanlou, F. Sharifianjazi, M. S. Asl, and M. Shokouhimehr, “A review on the comsol multiphysics studies of heat transfer in advanced ceramics,” *Journal of Composites and Compounds*, vol. 2, no. 2, pp. 35–43, 2020. Citado na página 33.
- [39] A. Inc, *Ansys Maxwell 3D-User’s Guide*. Ansys. Inc. Electromagnet Products, 2010. Citado 2 vezes nas páginas 33 e 41.
- [40] G. Duarte, A. Silva, C. Oliveira, V. Dmitriev, G. Melo, and W. Castro, “Controllable dual-band filter based on black phosphorus,” in *2021 SBMO/IEEE MTT-S International Microwave and Optoelectronics Conference (IMOC)*, pp. 1–3, IEEE, 2021. Citado 7 vezes nas páginas 11, 12, 34, 42, 43, 44 e 45.
- [41] G. Duarte, J. Cruz, C. Oliveira, G. Melo, W. O. Castro, and V. Dmitriev, “Electromagnetic phosphorene filter based on plasmonic induced transparency effect,” in *III Congresso de Tecnologias e Desenvolvimento na Amazônia*, pp. 572–573, Anais do III Congresso de Tecnologias e Desenvolvimento na Amazônia, 2019. Citado 7 vezes nas páginas 11, 12, 35, 45, 46, 47 e 48.

- [42] V. Dmitriev, C. Oliveira, and G. Duarte, “Planar infrared double-layer black phosphorus tunable filter independent of polarization and with low angle of incidence dependence,” *Photonics and Nanostructures-Fundamentals and Applications*, p. 101356, 2025. Citado 18 vezes nas páginas 11, 13, 14, 36, 37, 40, 55, 56, 57, 58, 59, 61, 63, 64, 65, 66, 67 e 68.
- [43] A. Laturia, M. L. Van de Put, and W. G. Vandenberghe, “Dielectric properties of hexagonal boron nitride and transition metal dichalcogenides: from monolayer to bulk,” *npj 2D Materials and Applications*, vol. 2, no. 1, p. 6, 2018. Citado na página 37.
- [44] X. Zhang and W. Zhang, “Synthesis of black phosphorus and its applications,” *Materials Today Physics*, p. 101396, 2024. Citado na página 37.
- [45] L. Qi, T. Xu, Z. Xing, S. Chen, Z. Zhang, T. Liu, and Z. Cheng, “Mid-infrared optoelectronic waveguide devices with 2d materials,” *Advanced Physics Research*, p. 2400079, 2024. Citado na página 37.
- [46] Y.-D. Li and Y.-G. Chen, “Q-factor and wavelength adjustable ultra-perfect absorption under critical coupling through epsilon-near-zero-based absorbers,” *Scientific Reports*, vol. 14, no. 1, p. 18728, 2024. Citado na página 41.
- [47] V. A. Barybin, A. A.; Dmitriev, *Modern Electrodynamics and Coupled-Mode Theory: Application to Guided-Wave Optics*. Rinton Press Princeton, New Jersey, 2002. Citado na página 58.
- [48] J. D. Joannopoulos, P. R. Villeneuve, and S. Fan, “Photonic crystals,” *Solid State Communications*, vol. 102, no. 2-3, pp. 165–173, 1997. Citado na página 62.
- [49] B. E. Little, S. T. Chu, H. A. Haus, J. Foresi, and J.-P. Laine, “Microring resonator channel dropping filters,” *Journal of Lightwave Technology*, vol. 15, no. 6, pp. 998–1005, 1997. Citado na página 62.
- [50] Z. Liu, E. Gao, Z. Zhang, H. Li, H. Xu, X. Zhang, X. Luo, and F. Zhou, “Dual-mode on-to-off modulation of plasmon-induced transparency and coupling effect in patterned graphene-based terahertz metasurface,” *Nanoscale Research Letters*, vol. 15, pp. 1–9, 2020. Citado na página 66.
- [51] M. Biabanifard, S. Asgari, S. Biabanifard, and M. S. Abrishamian, “Analytical design of tunable multi-band terahertz absorber composed of graphene disks,” *Optik*, vol. 182, pp. 433–442, 2019. Citado na página 66.
- [52] D. Sarker, P. P. Nakti, and A. Zubair, “Graphene metamaterials-based plasmon-induced terahertz modulator for high-performance multiband filtering and slow light

-
- applications,” *Optics Express*, vol. 32, no. 6, pp. 9442–9455, 2024. Citado na página 67.
- [53] P.-J. Wu, W.-C. Tsai, and C.-S. Yang, “Electrically tunable graphene-based multi-band terahertz metamaterial filters,” *Optics Express*, vol. 31, no. 1, pp. 469–478, 2022. Citado na página 67.
- [54] W. Huang, X. Luo, Y. Lu, F. Hu, and G. Li, “Ultra-broadband terahertz bandpass filter with dynamically tunable attenuation based on a graphene–metal hybrid metasurface,” *Applied Optics*, vol. 60, no. 22, pp. 6366–6370, 2021. Citado na página 67.

ANEXO A – 1

A.1 PRODUTO DA TESE

A.1.1 Trabalhos publicados em anais de eventos:

Anais do III Congresso de Tecnologias e Desenvolvimento na Amazônia

ISSN 2674-6204

Electrical engineering

ELECTROMAGNETIC PHOSPHORENE FILTER BASED ON PLASMONIC INDUCED TRANSPARENCY EFFECT

**Gildenilson Mendes Duarte¹; Jórdan Aleixo Martins da Cruz²; Cristiano Braga de
Oliveira³; Geraldo Souza de Melo⁴; Wagner Ormanes Palheta Castro⁵.
Victor Dmitriev⁶**

⁽¹⁾ Função ou ocupação (Student); Instituição (Federal University of Pará); Belém, Pará; Endereço eletrônico (gildenilsonmd@gmail.com); ⁽²⁾ Função ou ocupação (Student); Instituição (Federal University of Pará); ⁽³⁾ Função ou ocupação (Student); Instituição (Federal University of Pará); ⁽⁴⁾ Função ou ocupação (Student); Instituição (Federal University of Pará); ⁽⁵⁾ Função ou ocupação (Professor); Instituição (Rural Federal University of Amazon); ⁽⁶⁾ Função ou ocupação (Professor); Instituição (Federal University of Pará).

KEYWORDS: Filter; Electromagnetic; Phosphorene; Plasmonic Induced Transparency.

Conferences > 2021 SBMO/IEEE MTT-S Internat... 

Controllable Dual-Band Filter Based on Black Phosphorus

Publisher: **IEEE**

[Cite This](#)

[PDF](#)

Gildenilson Duarte ; Amanda Silva ; Cristiano Oliveira ; Victor Dmitriev ; Geraldo Melo ; Wagner Castro **All Authors**

2

Cites in
Papers

63

Full
Text Views



Abstract

Document Sections

I. Introduction

II. Structure Design

III. Theoretical
Analysis



Abstract:

We propose analytical and numerical modelling a controllable electromagnetic dual-band filter based on a periodic structure of Black Phosphorus (BP) discs deposited on silicon dioxide for operating in THz and infrared regions. Due to BP anisotropy, for polarization in the armchair or zigzag directions, we have a single operating band, and for a 45° polarization, a double operating band. The dynamic control of the proposed structure can be performed by varying the electronic doping in the BP, thus changing the operating frequency of the filter. The analytical model based on the Temporal Coupled-Mode Theory is in a good agreement with the numerical simulations by COMSOL Multiphysics.

A.1.2 Artigo publicado em periódico internacional:



Planar infrared double-layer black phosphorus tunable filter independent of polarization and with low angle of incidence dependence

Victor Dmitriev^a, Cristiano Oliveira^{b,*}, Gildenilson Duarte^{a,c}

^a Department of Electrical Engineering, PO Box 8619, Agência UFPA, Belém, Para 66075-900, Brazil

^b Applied Physics Group, Federal Institute of Education, Science and Technology of Roraima, Amajari, Roraima 69343-000, Brazil

^c Federal Rural University of Amazon, Campus Tame-Açu, Tame-Açu, Para 68680-000, Brazil

ARTICLE INFO

Keywords:

Black phosphorus
Surface plasmons
Terahertz
Electromagnetic filter
Independence of polarization

ABSTRACT

The anisotropic properties of monolayer black phosphorus (BP) allow the creation of plasmonic devices with directional-dependent properties. In this work, we propose an electromagnetic component based on BP for the THz and infrared regions, which is independent of polarization. The proposed device presents a periodic structure with a unit cell that consists of two square coupled BP layers with a thin dielectric sheet of h-BN between them. The two squares are rotated by 90° with respect to each other. Such a structure provides a transmittance curve with one dipole resonant frequency regardless of the incident wave polarization. It is also characterized by a low dependence on the angle of incidence. The results are obtained by finite-element electromagnetic simulations and temporal coupled-mode theory. The suggested BP metasurface can be used as a dynamically tunable filter, switch, modulator, and sensor at frequencies much higher than those of the corresponding graphene structures.