

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

ANÁLISE DE RESSONÂNCIAS ELETROMAGNÉTICAS EM ESTRUTURA
PERIÓDICA DE DISCOS DE GRAFENO MAGNETIZADOS NA FAIXA DE
TERAHERTZ

AMANDA EVANGELISTA DA SILVA

DM 02/03

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

2023

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

AMANDA EVANGELISTA DA SILVA

ANÁLISE DE RESSONÂNCIAS ELETROMAGNÉTICAS EM ESTRUTURA
PERIÓDICA DE DISCOS DE GRAFENO MAGNETIZADOS NA FAIXA DE
TERAHERTZ

DM 02/03

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

2023

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

AMANDA EVANGELISTA DA SILVA

ANÁLISE DE RESSONÂNCIAS ELETROMAGNÉTICAS EM ESTRUTURA
PERIÓDICA DE DISCOS DE GRAFENO MAGNETIZADOS NA FAIXA DE
TERAHERTZ

Dissertação submetida à Banca Examinadora
do Programa de Pós-Graduação em Engenharia
Elétrica da UFPA para a obtenção do Grau
de Mestre em Engenharia Elétrica na Área de
Telecomunicações.

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

2023

**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)**

E92a Evangelista da Silva, Amanda.
Análise de Ressonâncias Eletromagnéticas em Estrutura
Periódica de Discos de Grafeno Magnetizados na Faixa de
Terahertz / Amanda Evangelista da Silva. — 2023.
76 f. : il. color.

Orientador(a): Prof. Dr. Victor Alexandrovich Dmitriev
Coorientador(a): Prof. Dr. Cristiano Braga de Oliveira
Dissertação (Mestrado) - Universidade Federal do Pará, , ,
Belém, 2023.

1. Grafeno. 2. Terahertz. 3. SPPs. 4. Ressonâncias
eletromagnéticas. 5. Onda plana. I. Título.

CDD 621.3

AMANDA EVANGELISTA DA SILVA

ANÁLISE DE RESSONÂNCIAS ELETROMAGNÉTICAS EM ESTRUTURA
PERIÓDICA DE DISCOS DE GRAFENO MAGNETIZADOS NA FAIXA DE
TERAHERTZ

Dissertação submetida à Banca Examinadora
do Programa de Pós-Graduação em Engenharia
Elétrica da UFPA para a obtenção do Grau
de Mestre em Engenharia Elétrica na Área de
Telecomunicações.

Trabalho aprovado. UFPA / ITEC / PPGEE
Campus Universitário do Guamá
Belém-Pará-Brasil, 27 de fevereiro de 2023:

Prof. Dr. Victor Alexandrovich Dmitriev
(Orientador – PPGEE/UFPA)

Prof. Dr. Cristiano Braga de Oliveira
(Coorientador – Departamento de Física/IFRR)

Prof. Dr. Karlo Queiroz da Costa
(Avaliador Interno – PPGEE/UFPA)

Prof. Dr. Danilo Teixeira Alves
(Avaliador Externo ao Programa – PPGF/UFPA)

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

2023

*A Deus, primeiramente, pela dádiva da vida.
Aos meus pais, João Afonso Gomes da Silva e Maria Aparecida Evangelista,
pelo amor incondicional e amparo.*

Agradecimentos

Primeiramente agradeço a Deus, pois Ele é a razão primeira e última de minha existência - que guia meus passos e inspira minhas ações para que n'Ele comece e para que n'Ele termine tudo o que faço.

Ao meu pai, João Afonso Gomes da Silva, e minha mãe, Maria Aparecida Evangelista, por abraçarem a missão de pais e nos gerarem, frutos da família, com amor, entrega e sacrifícios ao longo da vida, para ver nossa alegria, crescimento moral, espiritual e intelectual; à minha irmã, Ariane Cristina Evangelista da Silva, pelo apoio durante todo o percurso e abençoada companhia.

Ao orientador Prof. Victor Dmitriev e ao coorientador Prof. Cristiano Braga pela oportunidade da pesquisa pautada em imenso suporte e orientação sem os quais esse trabalho não seria possível de ser executado.

À Comunidade Católica Sementes do Verbo, em especial ao Pe. Tiago Barros, pelo enorme cuidado, acolhimento e acompanhamento nos últimos meses e dos anos que virão; aos irmãos consagrados e seminaristas da Comunidade pelas conversas fecundas, abençoadas e inteligentes.

Ao Pe. Paulo Ricardo pelos ensinamentos espirituais, intelectuais, teológicos e filosóficos essenciais que fizeram iluminar graciosamente - mas não sem muita luta - minha razão, convidar a minha vontade e realinhar toda a minha vida na busca - e abençoado encontro - do que é bom, belo, justo e Verdadeiro. O período de desenvolvimento deste trabalho contém minha *μετάνοια*, expressa na frase de epígrafe.

Aos amigos, Lorena Cácia e Luciano Simões pelo carinho e incentivo; Prof. Van Sérgio e Prof. Danilo Alves, por todo apoio desde os tempos da graduação.

Aos meus padrinhos muito queridos, Newton Barbosa e Luana Barbosa, pelos conselhos tão acertados.

Aos membros da banca avaliadora pela disposição em participar e contribuir positivamente neste trabalho.

A todos os colegas do grupo do Laboratório de Nanoeletrônica e Nanofotônica da UFPA por cada partilha e auxílio direto ou indireto durante o mestrado.

Muito obrigada!

“Sero te amavi, pulchritudo tam antiqua et tam nova, sero te amavi!”
(Sto. Agostinho de Hipona)

Resumo

Desde seu isolamento em 2004, o grafeno tem se mostrado um material promissor, pois permite forte interação de portadores de carga com radiação terahertz (THz). Esta extensa interação com a luz se deve à excitação de polaritons de plasmon de superfície (SPPs) proporcionando assim diversas aplicações nas áreas de fotônica THz. Na presença de um campo magnético externo, a ressonância de cíclotron domina nos espectros THz. Neste trabalho analisamos vários modos de ressonância (dipolo, quadrupolo, hexapolo e os modos com simetria azimutal) que podem existir no disco de grafeno em um arranjo com células unitárias quadradas periódicas. Calculamos as ressonâncias com magnetização por campo magnético externo DC variando até 3T e as comparamos com o caso da mesma estrutura sem magnetização, onde observou-se que a presença do campo magnético resulta no desdobramento de alguns modos ressonantes. As características ressonantes são obtidas numericamente usando o software COMSOL Multiphysics em dois estudos distintos e complementares: o regime de cálculo de autofrequência referente aos modos naturais de ressonância e o de excitação por onda plana (plane wave) com incidência normal. As condições de contorno Floquet nos quatro lados das células unitárias são usadas para simular a estrutura periódica no plano do grafeno. O lado da célula unitária (ou seja, o período da matriz) usado no cálculo numérico é $A = 9\mu\text{m}$, o raio do disco de grafeno é $D = 3\mu\text{m}$. O problema da excitação de alguns modos por incidência de onda plana é discutido do ponto de vista da simetria circular que, para gerar os picos de ressonância neste regime, precisou ser quebrada através de um corte sutil no formato de fenda retangular de tamanho $L_x = 10\text{nm}$ por $L_y = 550\text{nm}$, partindo axialmente da borda. O disco é modelado como elemento bidimensional, e isso fornece uma boa aproximação da espessura atômica de uma única camada desse material. A condutividade é modelada pelo modelo semi-clássico de Drude. A discussão das propriedades do ressonador é cumprida em termos de correntes no grafeno e campos eletromagnéticos fora do grafeno. As aplicações potenciais dos resultados obtidos são rotadores Faraday e Kerr, filtros controláveis e absorvedores para circuitos fotônicos THz.

Palavras-chave: grafeno; terahertz; SPPs; ressonâncias.

Abstract

Since its isolation in 2004, graphene has shown to be a promising material, as it allows strong interaction of charge carriers with terahertz (THz) radiation. This extensive interaction with light is due to the excitation of surface plasmon polaritons (SPPs) thus providing several applications in the areas of THz photonics. In the presence of an external magnetic field, the cyclotron resonance dominates in the THz spectra. In this work we analyze several resonance modes (dipole, quadrupole, hexapole and modes with azimuthal symmetry) that can exist in the graphene disk in an arrangement with periodic square unit cells. We calculated the resonances with magnetization by an external DC magnetic field ranging up to 3T and compared them with the case of the same structure without magnetization where it was observed that the presence of the magnetic field results in the splitting of some resonant modes. The resonant characteristics are numerically obtained using the COMSOL Multiphysics software in two distinct and complementary studies: the eigenfrequency calculation regime referring to the natural modes of resonance and the plane wave excitation with normal incidence. Floquet boundary conditions on the four sides of the unit cells are used to simulate the in-plane periodic structure of graphene. The unit cell side (i.e. the period of the matrix) used in the numerical calculation is $A = 9\mu\text{m}$, the radius of the graphene disk is $D = 3\mu\text{m}$. The problem of excitation of some modes is discussed from the point of view of the circular symmetry that, to generate the resonance peaks in this regime, had to be broken through a subtle cut in the shape of a rectangular slit of size $L_x = 10\text{nm}$ by $L_y = 550\text{nm}$ starting axially from the edge. The disk is modeled as a two-dimensional element, and this provides a good approximation of the atomic thickness of a single layer of this material. Conductivity is modeled by the semi-classical Drude model. The discussion of resonator properties is fulfilled in terms of graphene currents and electromagnetic fields outside graphene. Potential applications of the obtained results are Faraday and Kerr rotators, controllable filters and absorbers for THz photonic circuits.

Keywords: graphene; resonances; SPPs; terahertz.

Lista de ilustrações

Figura 1 – Espectro eletromagnético com ênfase na região THz situada entre o microondas e infravermelho correspondente ao comprimento de onda λ de 1 mm a 100 μm . Adaptada da referência (1).	31
Figura 2 – Estrutura de favo de mel mostrando os átomos de carbono e as ligações na estrutura planar do grafeno (2).	35
Figura 3 – Exemplos históricos do uso e síntese de nanomateriais a partir do carbono.	36
Figura 4 – Distribuição eletrônica do carbono mostrando a hibridização sp^2 . Adaptada da referência (3).	37
Figura 5 – Rede direta do grafeno com seus respectivos vetores na célula primitiva (paralelogramo equilátero tracejado) (2).	38
Figura 6 – Geometria do grafeno no espaço real e no espaço de Fourier e os respectivos vetores primitivos (4).	40
Figura 7 – Rede recíproca do grafeno com os vetores primitivos e pontos Γ , M e K (2).	41
Figura 8 – Representação esquemática dos cones de Dirac localizados nos pontos K do grafeno. Figura retirada da referência (5)	42
Figura 9 – Ilustração esquemática dos processos de transição intrabanda e interbanda. Adaptada da referência (6).	43
Figura 10 – Movimento de um elétron em um campo elétrico e magnético estáticos no grafeno. O elétron é acelerado na direção do campo elétrico e defletido perpendicularmente a este campo. Nesse ínterim, duas componentes de corrente elétrica, paralelas e perpendiculares ao campo elétrico, são geradas. (a) Caso do campo elétrico ao longo do eixo x . (b) Caso do campo elétrico ao longo do eixo y . Retirada da referência (7)	45
Figura 11 – Gráficos de condutividade superficial do grafeno em função da frequência, contendo a parte real ($\text{Re}\{\sigma_{ij}\}$) e imaginária ($\text{Im}\{\sigma_{ij}\}$) para o campo magnético de 0 T a 3 T.	47
Figura 12 – Exemplos de efeitos ópticos de plasmons (8).	48
Figura 13 – Figura esquemática ilustrando os SPPs na interface dielétrico/metal. Adaptada da referência (8).	49
Figura 14 – Figura esquemática ilustrando as SPPs no grafeno (GSSPs). Adaptada da referência (9).	50
Figura 15 – Ilustração gerada pelo software COMSOL contendo a vista superior da estrutura do disco de grafeno. No centro encontra-se o disco 2D de grafeno de raio 3 μm envolto por um cubo de ar de lados 9 μm	54
Figura 16 – Figura ilustrando a porta inicial (porta 1) e de saída (porta 2).	56
Figura 17 – Fluxograma contendo as quatro etapas principais da modelagem no COMSOL.	56

Figura 18 – Ilustração gerada pelo software COMSOL contendo a malha refinada da estrutura. A ênfase foi dada ao grafeno estruturado com elementos tetraédricos ultra finos enquanto os lados do cubo, a exceção das portas, receberam tratamento <i>free triangular</i>	59
Figura 19 – Gráfico de desdobramento no regime sem excitação indicando a divisão de frequências ω_+ e ω_- dos modos observados em função do campo magnético.	65
Figura 20 – Gráfico de transmissão no regime de excitação indicando a divisão de frequências ω_+ e ω_- do modo dipolo em função da frequência.	67
Figura 21 – Gráfico de transmissão para $\mathbf{B} = 0$ T no regime de excitação com a presença da fenda $L_x \times L_y$ no disco de grafeno indicando o aparecimento dos modos quadrupolo e hexapolo com as respectivas frequências de ressonância ω_q e ω_h , além do dipolo.	67
Figura 22 – Espectro de transmissão em função da frequência para o disco com fenda sob (a) $\mathbf{B} = 1$ T, (b) $\mathbf{B} = 2$ T e (c) $\mathbf{B} = 3$ T.	69

Lista de tabelas

Tabela 1	– Parâmetros comuns utilizados na modelagem do disco de grafeno, com e sem fenda, acompanhados da imagem da estrutura formada com estes valores contendo a ilustração da célula unitária que envolve o grafeno. A estrutura contém acima e abaixo uma caixa PML de altura $5\mu\text{m}$	53
Tabela 2	– Parâmetros utilizados especificamente para cada uma das configurações (sem e com defeito)	54
Tabela 3	– Modos presentes no arranjo sem campo magnético ($\mathbf{B} = 0\text{ T}$) e suas respectivas autofrequências complexas.	62
Tabela 4	– Vista da componente E_z do campo elétrico e autofrequências do ressonador circular de grafeno para os campos de 1T, 2T e 3T culminando em modos dipolo, quadrupolo, hexapolo e azimutal. A presença do campo magnético desdobra as frequências de ressonâncias em modos girantes no sentido horário (ω_+) e anti-horário (ω_-).	63
Tabela 5	– Autofrequências de ressonância dos modos com campo $\mathbf{B} \neq 0$. A presença do campo magnético gera um desdobramento das frequências no sentido horário (ω_+) e anti-horário (ω_-).	64
Tabela 6	– Modos respectivos das frequências ω_d , ω_q e ω_h no regime de excitação com corte no disco de grafeno para $\mathbf{B} = 0\text{ T}$	68
Tabela 7	– Modos respectivos das frequências ω_d , ω_q e ω_h no regime de excitação com fenda no disco de grafeno com campo magnético $\mathbf{B} \neq 0$	70

Lista de abreviaturas e siglas

SPPs	Plasmons Polaritons de Superfície (do inglês, <i>Surface Plasmons Polaritons</i>)
GSPPs	Plasmons Polaritons de Superfície de Grafeno (do inglês, <i>Graphene Surface Plasmons Polaritons</i>)
MO	Magneto-Óptico
GHz	Gigahertz
THz	Terahertz
MEF	Método de Elementos Finitos
TE	Modo Elétrico Transversal
TM	Modo Magnético Transversal
CNTs	Nanotubos de carbono (do inglês, <i>Carbon Nanotubes</i>)
EM	Radiação Eletromagnética
PLM	Camada Perfeitamente Combinada (do inglês, <i>Perfect Matched Layer</i>)

Lista de símbolos

Γ	Ponto gama da zona de Brillouin
σ_g	Condutividade óptica total do grafeno
σ_{intra}	Setor intrabanda da condutividade do grafeno
σ_{intra}	Setor interbanda da condutividade do grafeno
$\bar{\sigma}$	Tensor de condutividade anisotrópica do grafeno
σ_0	Condutividade universal do grafeno
ω_c	Frequência de ciclotron
ω	Frequência da radiação incidente
τ	Tempo de relaxação
γ	Taxa de espalhamento
v_F	Velocidade de Fermi
K_B	Constante de Boltzmann
B	Intensidade do campo magnético externo
R_G	Raio do disco de grafeno
L_x	Lado da fenda no disco de grafeno em x
L_y	Lado da fenda no disco de grafeno em y
J_s	Densidade de corrente superficial
k	Vetor de onda

Sumário

1	INTRODUÇÃO	27
1.1	Objetivo geral	29
1.2	Objetivos específicos	29
2	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	31
2.1	Terahertz	31
2.2	Eletrodinâmica clássica	32
2.2.1	Equações de Maxwell	32
2.2.2	Condições de contorno	34
2.3	Grafeno	35
2.3.1	Hibridização do Carbono	36
2.3.2	Rede direta e recíproca	38
2.3.3	Estrutura de banda eletrônica	41
2.3.4	Condutividade óptica do grafeno	43
2.3.5	Modelo de Drude	43
2.3.5.1	Sem campo magnético externo	44
2.3.5.2	Com campo magnético externo	45
2.4	Plasmônica	47
2.4.1	Plasmons Polaritons de Superfície	49
2.4.2	Plasmons polaritons de superfície de grafeno	50
3	CÁLCULOS NUMÉRICOS	53
3.1	Estrutura e parâmetros do ressonador circular de grafeno	53
3.2	Modelagem computacional do arranjo do grafeno usando o software Comsol Multiphysics	54
4	RESULTADOS	61
4.1	Ressonador circular de grafeno	61
4.1.1	Análise de autofrequências	61
4.1.1.1	Sem campo magnético externo	61
4.1.1.2	Com campo magnético externo	63
4.1.2	Análise com onda plana incidente	65
4.1.2.1	Sem fenda no disco de grafeno	66
4.1.2.2	Com fenda no disco de grafeno	67
5	CONCLUSÃO	71

Referências 73

1 Introdução

Tendo atraído bastante atenção no meio científico e acadêmico, o grafeno, como sistema efetivamente bidimensional, é objeto de interesse devido à sua ampla gama de propriedades mecânicas, térmicas e elétricas, particularmente a mobilidade eletrônica excepcionalmente alta. Devido às suas características notáveis, tal material vem acompanhado de aplicações potenciais em distintas áreas como eletrônica de alta velocidade, dispositivos ópticos, materiais híbridos, plasmônica, física do estado sólido e nanotecnologias.

O grafeno foi tema do Prêmio Nobel de Física de 2010 – um material de natureza bidimensional com arranjo periódico hexagonal formado por átomos de carbono. Em especial, com foco nas propriedades ópticas e eletrônicas, a análise da propagação de ondas nesse tipo de arranjo planar e periódico culmina em superfícies cujas propriedades de absorção e reflexão de ondas eletromagnéticas podem ser alteradas para uma dado intervalo de frequência, particularmente na faixa espectral de terahertz (THz).

Tal configuração apresenta alta mobilidade, confinamento eletromagnético, alto efeito Kerr não linear, possibilidade de ajuste dinâmico com campos eletrostáticos e magnetoestáticos, bem como o suporte de ondas plasmônicas, além de exibir propriedades magneto-ópticas com consideráveis ângulos de rotação de polarização, o que torna o grafeno um candidato propício para implementar componentes não recíprocos e na investigação de fenômenos na faixa THz (6, 10).

Sobre este último, combina-se às ressonâncias do próprio grafeno, a ação de campo magnético, que resulta em uma quantidade alta de transmitância em intensidades consideravelmente baixas de campo para frequências na faixa de THz. Padrões de camada única de grafeno, matrizes de fitas, arranjos cruzados e padrões circulares são alguns exemplos de variação na configuração da geometria a fim de se investigar o melhoramento de efeitos ópticos e aprimoramento de propriedades de transmissão, reflexão e absorção, por exemplo (10, 11, 12, 13, 14).

Neste trabalho, investigamos a geometria de um padrão de discos de grafeno a fim de analisar suas ressonâncias dos modos naturais de vibração, bem como a sua excitação com onda plana incidente. Comparamos a estrutura na ausência de campo magnético e, posteriormente, com a inserção de um campo magnético DC externo de 1 T, 2 T e 3 T, verificando sua influência sobre o arranjo. A presença de um campo magnético externo possibilita a rotação dos modos com consequente desdobramento de frequências no sentido horário e anti-horário graças às ressonâncias originadas do movimento ciclotrônico da trajetória do elétron.

Essa rotação é relevante para características não recíprocas em vários dispositivos como isoladores, circuladores, deslocadores de fase e rotadores de Faraday. O grafeno também mostra-se notável, visto que possibilita a criação de dispositivos em escalas abaixo do comprimento de

onda para confinar e guiar ondas de luz (7).

Padronizar a camada de grafeno em uma forma periódica exhibe algumas características interessantes quando magnetizada, em especial a divisão dos modos ressonantes como já citado. O problema investigativo dá-se no processo de excitação da estrutura de discos em questão. Verificou-se que, dos modos naturais existentes, apenas o dipolo exibia pico aparente no regime de excitação por onda plana incidente, de maneira que os outros modos não se mostravam presentes. Em suma, uma forma de se obter tais excitações é através da quebra de simetria existente no grafeno. Para tal, um defeito geométrico foi incluído através de uma fenda retangular sutil na estrutura circular original.

Esse mecanismo mostra-se preferível visto que modos de frequências superiores as do dipolo não podem ser excitados apenas com onda incidente, de tal forma que a inclusão de um defeito torna-se uma alternativa necessária. Esses últimos, também chamados modos escuros, são protegidos por simetria e, ao contrário dos modos claros (como é o caso do dipolo), não podem ser excitados por incidência normal de ondas planas. Nesse sentido, a excitação se dá quebrando-se a simetria da célula unitária do arranjo em questão com a inclusão do defeito (14, 15, 16).

—

O capítulo 2 comporta a fundamentação teórica acerca do grafeno, principal material investigado neste trabalho, precedida de uma breve apresentação sobre a faixa de frequência THz, revisão sobre plasmônica e equações de Maxwell a fim de alicerçar as discussões posteriores.

O capítulo 3 apresenta os detalhes acerca da geometria da estrutura investigada e dos parâmetros escolhidos para os cálculos computacionais. Ademais, também detalha como foi feito todo o processo de modelagem computacional a partir do software COMSOL Multiphysics e discute as duas seções de investigação do estudo, sendo elas: análise de autofrequências (do inglês, *eigenfrequency*) e domínio de frequência (do inglês, *frequency domain*), referentes ao estudo sem excitação e com excitação, respectivamente.

Por fim, no capítulo 4 são apresentados e discutidos os resultados obtidos para a estrutura submetida à magnetização em comparação com a mesma não magnetizada sob os regimes em que a excitação por onda plana é ausente e presente. Reforça-se, então, a dificuldade de excitação de modos ressonantes superiores ao dipolo sendo necessário, para tal, o acréscimo de um defeito estrutural no disco de grafeno a fim de se observar os mínimos de transmissão anteriormente ausentes sob o mesmo estudo. Também se esclarece a diferença entre os modos circulares ressonantes escolhidos, bem como se mostra a comparação dos resultados a partir do gráfico de desdobramento das frequências e sentido de rotação na estrutura na ausência de defeito por fenda comparativamente com a presença do mesmo.

O capítulo 5 revisa e conclui a abordagem de todo o estudo, apresentando também perspectivas futuras para o presente trabalho.

1.1 Objetivo geral

- Investigar numericamente, com uso do software COMSOL Multiphysics, para diferentes valores de campo magnético, as ressonâncias na superfície do disco de grafeno na ausência e presença de um defeito estrutural através dos modelos de estudo de autofrequência, que simula os modos naturais do arranjo, e domínio de frequência, que analisa os modos em regime de excitação.

1.2 Objetivos específicos

- Apresentar o suporte teórico necessário sob o qual está fundamentado o estudo do grafeno;
- verificar a influência do campo magnético sobre o ressonador circular de grafeno;
- comparar as diferentes ressonâncias para a estrutura periódica de discos de grafeno sem defeito e com defeito;
- excitar modos ressonantes superiores ao dipolo com incidência de onda plana;
- discutir os resultados obtidos sob o ponto de vista comparativo analisando o problema de excitação de certos modos, como quadrupolo e hexapolo.

2 Fundamentação teórica

2.1 Terahertz

A região terahertz (THz) tem atraído grande interesse científico desde pelo menos a década de 1920. Já tendo sido identificada como uma das regiões menos exploradas do espectro eletromagnético, essa faixa de frequência desperta atenção crescente por englobar diversas aplicações desde segurança com detecção espectroscópica e passiva, inspeção médica, tecnologias ópticas até radioastronomia e comunicações sem fio. A detecção seletiva e espectroscopia de campos THz é uma tarefa desafiadora na optoeletrônica moderna. Encontra-se situada entre a faixa de microondas e o infravermelho médio indo de, aproximadamente 0,1 a 10 THz (100 a 10000 GHz) compreendendo à faixa de comprimento de onda submilimétrica (17, 18, 19).

Dos dois tipos de caracterização da radiação no espectro, sendo ionizante e não ionizante, a região de THz é identificada neste último podendo, então, atravessar roupas, papel, madeira, alvenaria, plástico, cerâmica e penetrar em neblina e nuvens (18). Abaixo na Figura 1 está ilustrado a região do espectro eletromagnético que comporta essa faixa de frequência.

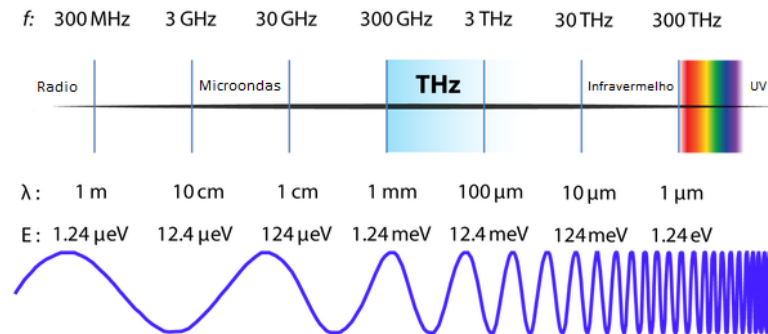


Figura 1 – Espectro eletromagnético com ênfase na região THz situada entre o microondas e infravermelho correspondente ao comprimento de onda λ de 1 mm a 100 μm . Adaptada da referência (1).

Especificamente para telecomunicações, os dispositivos de tecnologia *wireless* (sem fio) operam majoritariamente em frequência de microondas, na faixa de gigahertz (GHz). Para estes, há uma crescente demanda por altas velocidades de transmissão de sinais combinadas com bandas de dados mais largas (20, 21). Apesar do esforço considerável, ainda é um desafio a investigação de estruturas e dispositivos plasmônicos operando em frequências de THz. Em contrapartida, tal região já compreende uma fronteira potencial para as redes sem fio que poderá, por exemplo, ser uma alternativa para a sexta geração de telefonia celular (6G).

Assim, o grafeno revela-se como material capaz de enfrentar tal desafio, uma vez que,

na região THz as ondas eletromagnéticas interagem com a camada de grafeno e dominam os efeitos de transição intrabanda de sua condutividade de forma que os portadores de carga livres interagem mais fortemente com esse tipo de radiação (6, 22). Dessa maneira, a resposta THz do grafeno é essencial para aplicações em nano-óptica ou tecnologias de ponta aprimoradas. (23).

Nesse sentido, a radiação THz surge como uma proposta promissora, mais ainda pelo desenvolvimento de pesquisas recentes com a introdução de novos materiais como o grafeno em uma combinação de suas propriedades através da interação luz-matéria.

2.2 Eletrodinâmica clássica

Considerada a primeira teoria clássica de campo unificado, a eletrodinâmica clássica unifica eletricidade e magnetismo. E, sendo o limite da eletrodinâmica quântica, junto a esta abarca o maior número de concordâncias experimentais em relação às previsões teóricas, culminando em uma grande conquista científica do século XIX, atrelada principalmente aos trabalhos do físico James Clerk Maxwell, em 1864. Microscopicamente falando, ou seja, reduzindo o universo estudado a um número grande de fótons para pequenas transferências de momento e energia, esse tipo de formalismo é suficiente para a descrição desejada no grafeno, uma vez que descreve a luz como onda eletromagnética a propagar-se na forma de um campo eletromagnético tridimensional (6, 24).

2.2.1 Equações de Maxwell

Toda a interação entre luz e matéria na eletrodinâmica clássica é descrita através das equações de Maxwell cuja forma, no SI, é dada por (6, 2):

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

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

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

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

onde $\mathbf{D}(\mathbf{r}, t)$ é o deslocamento elétrico, $\rho(\mathbf{r}, t)$ caracteriza a densidade de carga livre, $\mathbf{H}(\mathbf{r}, t)$ é o campo magnético, $\mathbf{J}(\mathbf{r}, t)$ é a densidade de corrente, $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ denota o campo elétrico e $\mathbf{B}(\mathbf{r}, t)$ é a indução magnética. Os parâmetros $\rho(\mathbf{r}, t)$ e $\mathbf{J}(\mathbf{r}, t)$ relacionam-se através da equação da continuidade, o que implica na conservação de carga da seguinte forma:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J} = 0. \quad (2.5)$$

Para o caso do grafeno, onde consideramos $z = 0$, dado o seu caráter bidimensional, tem-se

$$\rho = \rho_{2D}\delta(z), \quad (2.6)$$

$$\mathbf{J} = \mathbf{J}_{2D}\delta(z). \quad (2.7)$$

Para meios lineares, uniformes e isotrópicos, e não magnéticos, são válidas as seguintes relações constitutivas

$$\mathbf{D} = \epsilon\epsilon_0\mathbf{E}, \quad (2.8)$$

e

$$\mathbf{H} = \frac{1}{\mu_0}\mathbf{B} \quad (2.9)$$

onde ϵ é a permissividade relativa (ou constante dielétrica), ϵ_0 é a permissividade elétrica do vácuo e μ_0 sua permeabilidade magnética.

No espaço livre ou em um meio dielétrico, caracterizados pela ausência de cargas e correntes livres, as equações (2.1-2.4) são reescritas como:

$$\nabla \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = 0, \quad (2.10)$$

$$\nabla \times \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{c^2}\epsilon \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = -\frac{i\epsilon}{c^2}\omega\mathbf{E}(\mathbf{r}, t), \quad (2.11)$$

$$\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = i\omega\mathbf{B}, \quad (2.12)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = 0, \quad (2.13)$$

com ω sendo a frequência da radiação incidente. Utilizando coordenadas cartesianas ¹ e aplicando o rotacional bem como suas propriedades em (2.12), obtém-se

$$\begin{aligned} \nabla \times (\nabla \times \mathbf{E}) &= \nabla(\nabla \cdot \mathbf{E}) - \nabla^2\mathbf{E} = \nabla \times \left(-\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \right), \\ \nabla^2\mathbf{E} - \nabla(\nabla \cdot \mathbf{E}) &= \frac{\partial}{\partial t} (\nabla \times \mathbf{B}), \end{aligned}$$

Aplicando a lei de Gauss, segundo a qual $\nabla \cdot \mathbf{E} = 0$, tem-se que

$$\nabla^2\mathbf{E} = \frac{1}{c^2}\epsilon \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2}, \quad (2.14)$$

ou ainda,

$$\left(\nabla^2 - \frac{1}{v^2}\epsilon \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right) \begin{Bmatrix} \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \\ \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) \end{Bmatrix} = 0, \quad (2.15)$$

¹ $\nabla \equiv \hat{x}\frac{\partial}{\partial x} + \hat{y}\frac{\partial}{\partial y} + \hat{z}\frac{\partial}{\partial z}$

que são as equações de ondas para os campos elétrico e magnético viajando à velocidade $v = c/\sqrt{\epsilon}$.

Uma relação constitutiva importante, para materiais condutores, é a lei de Ohm generalizada, segundo a qual

$$\mathbf{J} = \sigma \mathbf{E}, \quad (2.16)$$

com σ sendo uma condutividade dependente da frequência. Para o caso do grafeno, essa quantidade é substituída por um tensor $\bar{\sigma}$ como apresentado em (2.42). Esse é um parâmetro muito importante para a modelagem computacional do grafeno.

2.2.2 Condições de contorno

Se o sistema físico estudado envolve mais de um material, portanto um meio não homogêneo, um outro conjunto de equações deve também ser levado em consideração. Trata-se das condições de contorno para a continuidade das componentes normais e transversais dos campos elétrico e a descontinuidade do campo magnético na interface entre dois meios. A obtenção de tais condições perpassa pela aplicação dos teoremas da divergência e de Stokes nas equações de Maxwell (6). Assim,

$$(\mathbf{D}_2 - \mathbf{D}_1) \cdot \hat{n} = \sigma_s, \quad (2.17)$$

$$(\mathbf{B}_2 - \mathbf{B}_1) \cdot \hat{n} = 0, \quad (2.18)$$

$$(\mathbf{E}_2 - \mathbf{E}_1) \times \hat{n} = 0, \quad (2.19)$$

$$(\mathbf{B}_2 - \mathbf{B}_1) \times \hat{n} = \mu_0 \mathbf{J}_s, \quad (2.20)$$

onde \hat{n} é um vetor unitário normal à interface que aponta do meio 2 para o meio 1, σ_s é a densidade superficial de cargas livres e \mathbf{J}_s indica a densidade de corrente superficial na interface. Com isso, nota-se as relações entre amplitudes de campos nos meios dielétricos através das condições de contorno a serem aplicadas em $z = 0$ atreladas à continuidade das componentes tangenciais ao campo elétrico e descontinuidade do campo magnético.

Como nos condutores usuais, as cargas livres no grafeno acoplam-se às ondas eletromagnéticas. Assim busca-se soluções das equações de Maxwell na forma de ondas de superfície se propagando ao longo da folha de grafeno. A depender das propriedades da condutividade óptica do material, este pode suportar ondas elétricas transversais (TE) ou magnéticas transversais (TM). O grafeno suporta ambos os tipos, sendo que as últimas recebem maior atenção. Essas ondas propagam-se ao longo da interface metálica e decaem exponencialmente para longe dela (ao longo da direção z). No caso do grafeno, as oscilações dos portadores livres ficam confinadas ao plano xy , enquanto o campo eletromagnético penetra consideravelmente nos materiais (2).

Na abordagem eletrodinâmica, os plasmons polaritons de superfície (SPPs), discutidos na seção 2.4, propagam-se como uma onda eletromagnética paralela à direção x , com campo

magnético orientado paralelamente à direção y , ou seja, o estado de polarização magnética TM, condição necessária para gerar a distribuição de carga na interface do metal e posterior excitação dos SPPs, com características bem determinadas pela solução da equação de Maxwell para o problema de valor de contorno (25).

2.3 Grafeno

O grafeno é um nanomaterial constituído por uma única camada de grafite, tendo átomos de carbono dispostos em uma geometria hexagonal e periódica semelhante ao favo de mel, conservando uma estrutura de espessura próxima a 0,34 nm - o que permite a este a designação de primeiro material bidimensional já isolado, tendo em vista a proximidade com a espessura atômica.

Em 2010, Andre Geim e Konstantin Novoselov, pesquisadores da Universidade de Manchester, foram agraciados com o prêmio Nobel de física “*por experimentos inovadores sobre o material bidimensional grafeno*” e criação de dispositivos práticos a partir do isolamento do mesmo via método de esfoliação mecânica, realizado com êxito em 2004 (26). Nesse processo de obtenção, os pesquisadores usaram fita adesiva para retirar sucessivamente camadas cada vez mais finas de carbono do grafite. Finalmente, apenas uma camada de átomos de carbono permaneceu. A esta última dá-se o nome de grafeno.

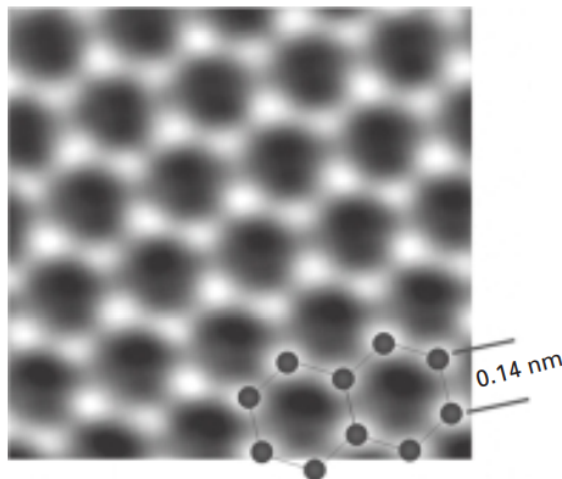
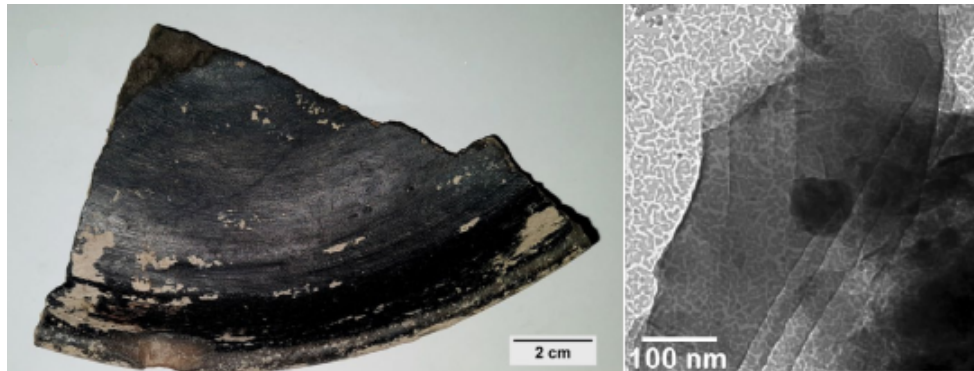


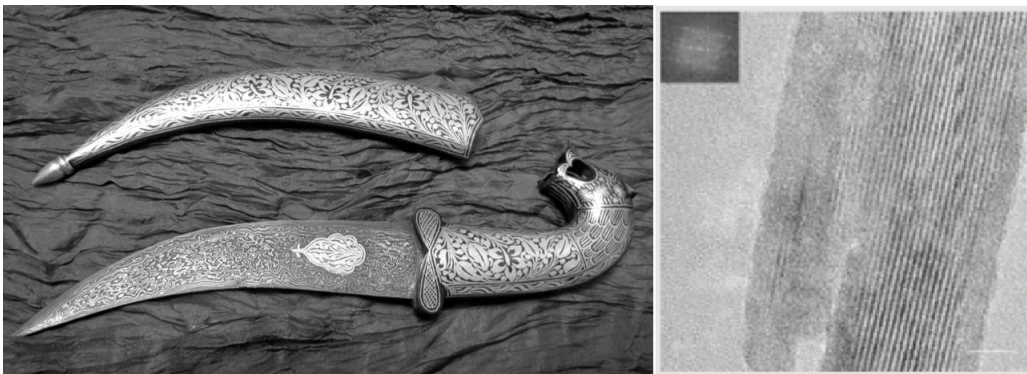
Figura 2 – Estrutura de favo de mel mostrando os átomos de carbono e as ligações na estrutura planar do grafeno (2).

As pesquisas científicas e avanços tecnológicos de cunho investigativo e empírico envolvendo a escala nanoscópica mostram-se recentes. No entanto, historicamente, o registro da síntese e uso desses materiais, como os nanotubos de carbono (CNTs), data do século III a.C, sendo elementos presentes em revestimentos pretos nas paredes internas de vasos de cerâmica - como os encontrados em Keelad, na Índia - e ainda no período do medievo, presentes em ferramentas antigas como é o caso das espadas ou lâminas de Damasco, cuja confecção era feita

a partir do aço de Wootz, ou sérico, com alto teor de carbono, cuja confecção final culminava em dureza e maleabilidade (27, 28). Esses dois exemplos estão ilustrados na Figura 3.



(a) Porção interna da cerâmica de Keeladi com revestimento preto brilhante. Ao lado, figura da pilha de folhas de óxido de grafeno obtida por microscopia eletrônica. Adaptada da referência (27).



(b) Lâmina de Damasco com um padrão característico de faixas onduladas. Ao lado, figura obtida via microscopia eletrônica de alta resolução com ênfase nos nanofios de cementita encapsulados e protegidos pelos nanotubos de carbono. Adaptada da referência (28).

Figura 3 – Exemplos históricos do uso e síntese de nanomateriais a partir do carbono.

Nos dias de hoje, o grafeno, sendo uma das formas cristalinas do carbono, tem se destacado como material com grande potencial para avanços tecnológicos em diversas áreas do conhecimento devido à diversidade de aplicações proporcionadas por suas inúmeras propriedades ópticas, eletrônicas, químicas e mecânicas.

2.3.1 Hibridização do Carbono

Ativo na produção de compostos moleculares e sólidos cristalinos, o carbono é um elemento especial pela possibilidade alotrópica das formas. A alotropia é a modificação estrutural em materiais na mesma fase da matéria podendo adquirir várias geometrias características e, conseqüentemente, manifestar diferentes propriedades. No carbono, tal diversificação é possível pela interação entre os orbitais de átomos vizinhos que culmina em distintos estados de hibridização.

Integrando a família IV-A na tabela periódica, caracterizada por elementos cuja camada de valência possui um total de quatro elétrons, os átomos de carbono, no estado fundamental

ilustrado na Figura (4a), distribuem-se da seguinte forma:



O processo de hibridização ocorre quando um dos elétrons da subcamada $2s$ no átomo de carbono é promovido a um orbital atômico $2p_z$ vago. Como cada átomo de carbono no grafeno se liga apenas a três outros, somente estes dos quatro elétrons de valência estão envolvidos na hibridização, de maneira que os orbitais híbridos formam-se a partir de $2s$ e $2p$ - com o elétron do orbital $2p_z$ permanecendo neste. Daí as interações no grafeno que ligam os átomos de carbono por meio desses orbitais caracterizarem a hibridização sp^2 (29).

Quando excitado, o orbital $2s$ interage com os orbitais $2p_x$ e $2p_y$ formando três orbitais híbridos sp^2 com o arranjo de elétrons, como mostra a Figura (4b). Desse fenômeno de interação resulta, no grafeno, na formação de três ligações no plano e uma quarta projetada verticalmente acima e abaixo.

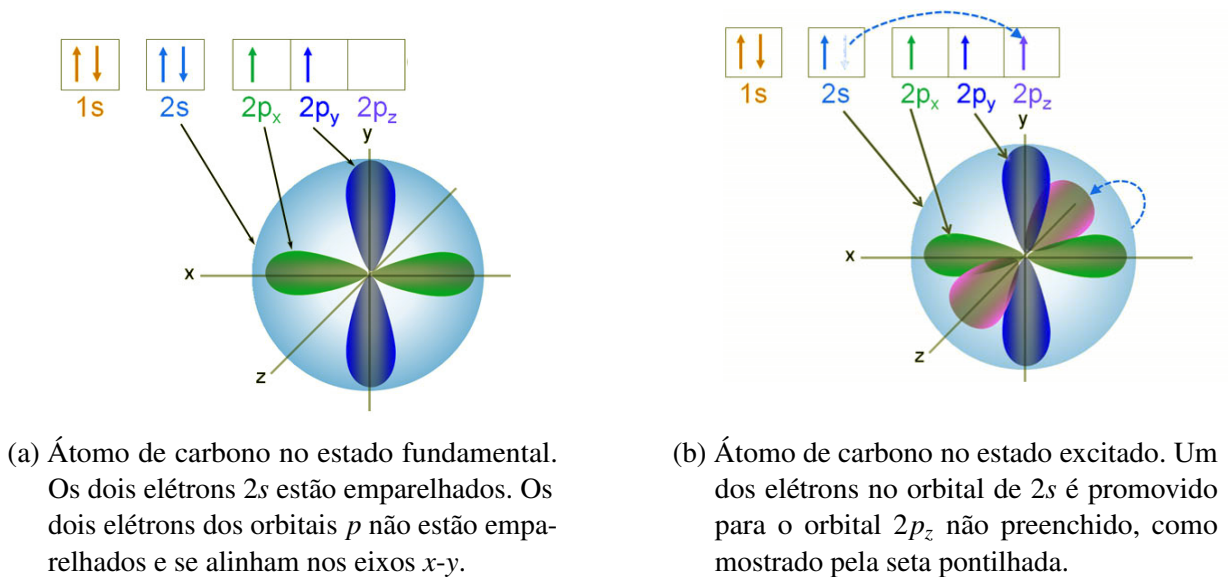


Figura 4 – Distribuição eletrônica do carbono mostrando a hibridização sp^2 . Adaptada da referência (3).

As interações sp^2 resultam em três ligações chamadas ligações- σ , que são o tipo mais forte de ligação covalente. A estas, localizadas ao longo do plano, associam-se as propriedades mecânicas e térmicas do grafeno. Em adição, os elétrons $2p_z$ formam as ligações- π acima e abaixo do plano da estrutura criando uma nuvem de elétrons deslocalizados que, por consequência, estão mais fracamente ligados ao núcleo. A esse tipo de ligação estão vinculadas as propriedades ópticas e eletrônicas do grafeno.

2.3.2 Rede direta e recíproca

Geometricamente, os átomos ou moléculas de um material podem ser representados pela rede de Bravais, estrutura que fornece informações do arranjo periódico no qual a base repetida do cristal está disposta. Para que uma certa configuração regular e periódica seja considerada uma estrutura em rede de Bravais, para além da periodicidade, considera-se também a sua orientação que deve ser a mesma para os pontos da rede.

Utilizando o modelo de pontos e linhas (do inglês, *ball-and-stick*), onde cada ponto preto representa um átomo de carbono e cada linha fina indica as ligações- σ que os conectam, a rede de Bravais para o grafeno fica bem representada esquematicamente na Figura 5. Para o formato hexagonal do grafeno, pela não ortogonalidade dos eixos, faz-se necessário escolher dois átomos, cada um pertencente a uma sub-rede triangular, para integrar a célula primitiva - unidade periódica básica da rede que, quando replicada, mantém a mesma estrutura.

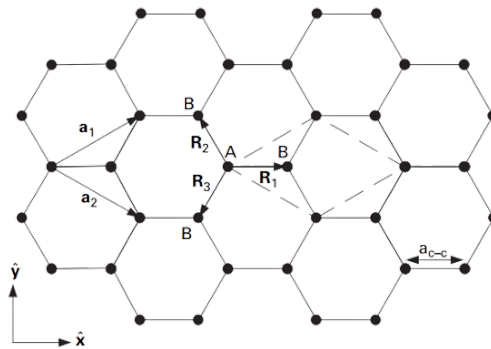


Figura 5 – Rede direta do grafeno com seus respectivos vetores na célula primitiva (paralelogramo equilátero tracejado) (2).

Tais átomos contribuem, em cada célula, com dois elétrons vinculados à ligação do tipo π devido o formato do orbital molecular resultante da combinação linear de seus orbitais p_z . Dessa forma, a base é bem determinada com os dois átomos (um na sub-rede A e o outro na sub-rede B) com distância $a_{C-C} \approx 1,42 \text{ \AA}$ entre eles e um paralelogramo equilátero de lado a representando a célula primitiva que os comporta (30).

Assim, para formar toda a rede bidimensional necessita-se de dois vetores primitivos \mathbf{a}_1 e \mathbf{a}_2 , dados por

$$\mathbf{a}_1 = \frac{a\sqrt{3}}{2}\hat{x} + \frac{a}{2}\hat{y}, \quad (2.22)$$

e

$$\mathbf{a}_2 = \frac{a\sqrt{3}}{2}\hat{x} - \frac{a}{2}\hat{y}, \quad (2.23)$$

que compõem o local denominado célula de Wigner-Seitz, formada geometricamente pelos pontos mais próximos de um certo ponto do que qualquer outro na rede de Bravais, indicada na Figura 6.

Como cada átomo está ligado a outros três mais próximos pelas respectivas ligações σ , também descreve-se \mathbf{R}_1 , \mathbf{R}_2 e \mathbf{R}_3 da forma

$$\mathbf{R}_1 = a_{C-C}\hat{x} + 0\hat{y} = \frac{a}{\sqrt{3}}\hat{x}, \quad (2.24)$$

$$\mathbf{R}_2 = -\frac{a_{C-C}}{2}\hat{x} + \frac{a}{2}\hat{y} = -\frac{a}{2\sqrt{3}}\hat{x} + \frac{a}{2}\hat{y}, \quad (2.25)$$

$$\mathbf{R}_3 = -\frac{a_{C-C}}{2}\hat{x} - \frac{a}{2}\hat{y} = -\frac{a}{2\sqrt{3}}\hat{x} - \frac{a}{2}\hat{y}, \quad (2.26)$$

onde $a = \sqrt{3}a_{C-C}$.

Pela regularidade observada nos padrões de rede, é natural que se pense em uma análise de Fourier para se obter informações fundamentais sobre o comportamento dos elétrons em sólidos cristalinos.

Uma vez conhecida a rede cristalina direta, portanto aquela cuja configuração está no espaço de posições ou espaço real, pode-se determinar os equivalentes vetores relativos entre os átomos vizinhos e obter uma representação para a rede cristalina no espaço dos vetores de onda \mathbf{k} , denominada rede recíproca com as seguintes propriedades (2):

- (i) A rede recíproca é sempre uma rede de Bravais, dado que a rede direta é sempre uma rede de Bravais podendo ser diferente em comparação com a rede de Bravais no espaço real.
- (ii) O recíproco da rede recíproca é a rede direta original.
- (iii) A rede direta é medida em termos de um vetor posição \mathbf{R} com unidades de comprimento; a rede recíproca é medida em termos do vetor de onda \mathbf{k} com unidades de $1/\text{comprimento}$.
- (iv) Se s é a área da célula primitiva da rede direta, então $(2\pi)^2/s$ é a área da célula primitiva da rede recíproca.
- (v) A rede direta existe no espaço real ou espaço de posição; a rede recíproca existe no espaço recíproco, que às vezes é chamado de espaço de momento, de Fourier ou, simplesmente, espaço \mathbf{k} .

Essencialmente, na rede direta foi obtida como célula primitiva a célula de Wigner-Seitz e, uma vez feita a análise para o espaço recíproco, obtém-se a primeira zona de Brillouin (Figura 6b) fundamental na descrição das ondas e excitações em um meio periódico como é o caso do grafeno. Ambas exibem simetria hexagonal rotacionadas por 90° uma em relação à outra.

Os vetores primitivos da rede recíproca são obtidos via

$$\begin{aligned} \mathbf{b}_1 &= 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \times \hat{z}}{(\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2) \cdot \hat{z}}, \quad (2.27) \\ &= 2\pi \left\{ \frac{\left(\frac{\sqrt{3}a}{2}\hat{x} - \frac{a}{2}\hat{y} \right) \times \hat{z}}{\left[\left(\frac{\sqrt{3}a}{2}\hat{x} + \frac{a}{2}\hat{y} \right) \times \left(\frac{\sqrt{3}a}{2}\hat{x} - \frac{a}{2}\hat{y} \right) \right] \cdot \hat{z}} \right\}, \end{aligned}$$



(a) Rede direta e célula de Wigner-Seitz (hexágono cinza).

(b) Rede recíproca e a primeira zona de Brillouin (hexágono cinza).

Figura 6 – Geometria do grafeno no espaço real e no espaço de Fourier e os respectivos vetores primitivos (4).

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{\sqrt{3}a}\hat{x} + \frac{2\pi}{a}\hat{y}, \quad (2.28)$$

e, da mesma forma,

$$\mathbf{b}_2 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_1 \times \hat{z}}{(\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2) \cdot \hat{z}}, \quad (2.29)$$

$$\mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{\sqrt{3}a}\hat{x} - \frac{2\pi}{a}\hat{y}. \quad (2.30)$$

A zona de Brillouin merece especial atenção pois engloba três pontos fundamentais para o estudo da dispersão do grafeno ilustrados na Figura 7. Em seu centro tem-se o ponto Γ de alta simetria. A partir desse, horizontalmente até no ponto médio da aresta, encontra-se o ponto M e, nos vértices, estão os pontos K . Esse último é denominado ponto de Dirac.

Tendo os vetores primitivos, pode-se escrever a localização dos pontos em relação ao centro do hexágono onde encontra-se o ponto Γ da seguinte forma

$$\Gamma M = \left(\frac{2\pi}{\sqrt{3}a}, 0 \right), \quad (2.31)$$

$$\Gamma K = \left(\frac{2\pi}{\sqrt{3}a}, \frac{2\pi}{a} \right), \quad (2.32)$$

$$\Gamma K' = \left(\frac{2\pi}{\sqrt{3}a}, -\frac{2\pi}{a} \right). \quad (2.33)$$

Esses aspectos geométricos são de suma importância para a consideração da descrição física dos elétrons, principalmente aqueles do orbital p_z , o qual determina as propriedades eletrônicas de transporte de cargas na consideração de baixos campos aplicados.

Em se tratando de uma camada única, os elétrons nas ligações- π unem-se para formar bandas de valência e condução - espaços indispensáveis para o estudo da condutividade do grafeno. E é nas proximidades dos pontos de Dirac que as bandas formam um duplo cone, denominados cones de Dirac, que se tocam no ponto de energia nula. Tais pontos são elementos cruciais para uma análise mais completa da energia e ocupação dos orbitais no estudo da estrutura de banda eletrônica do grafeno a ser discutida a seguir.

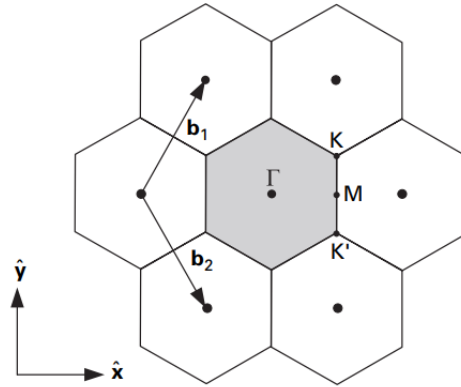


Figura 7 – Rede recíproca do grafeno com os vetores primitivos e pontos Γ , M e K (2).

2.3.3 Estrutura de banda eletrônica

A estrutura de banda é uma descrição do intervalo dos níveis de energias que os elétrons podem ou não ocupar a partir do exame das funções de ondas permitidas para um elétron na rede. Na distribuição eletrônica do carbono, foi visto que os elétrons ocupam certos orbitais atômicos que, por sua vez, comportam um nível discreto de energia. No entanto, estendendo essa análise para uma rede periódica, como é o caso do cristal, o número de átomos do ponto de vista macroscópico é consideravelmente grande ($N \approx 10^{22}$), culminando em um alto número de orbitais que estão tão próximos em energia ($10^{-22} eV$) que podem ser considerados um contínuo ou, mais rigorosamente, um quasi-contínuo, ou seja, caracterizados por uma banda de energia (31).

No grafeno, uma das características fundamentais que envolvem sua excelência como material semiconductor encontra-se exatamente nos pontos onde tocam-se os cones de Dirac que, conseqüentemente, comportam as bandas de energia com os pontos K e K' independentes (ou inequivalentes) e os outros quatro equivalentes por simetria. Isso ocorre porque, dentro da primeira zona de Brillouin, estão apenas 1/3 de cada par de cones. Sendo o grafeno uma estrutura hexagonal, portanto com seis átomos de carbono ordenados nos vértices, existem dois cones duplos inequivalentes (que tocam-se no ponto de energia nula - ou nível de Fermi), caracterizados pelos pontos K e K'. Na parte superior do cone está a banda de valência que encontra-se totalmente preenchida, enquanto, abaixo, está a banda de condução totalmente vaga (30).

Em uma relação energia \times momento, a energia de Fermi é aquela do estado k mais ocupado para um átomo em seu estado fundamental. Para a sua determinação, preenchem-se os k -estados na zona de Brillouin com os elétrons π , que estão menos presos dentro do cristal. Como visto, para um único átomo de carbono há o fornecimento de um elétron do orbital p_z resultando em dois elétrons por célula unitária. Tendo N células haverá um total de $2N$ elétrons a preencherem os k_N -estados da banda de valência, de forma que o estado ocupado mais externo abriga os elétrons mais energéticos estando nos pontos K com energia correspondente $E_F = 0$

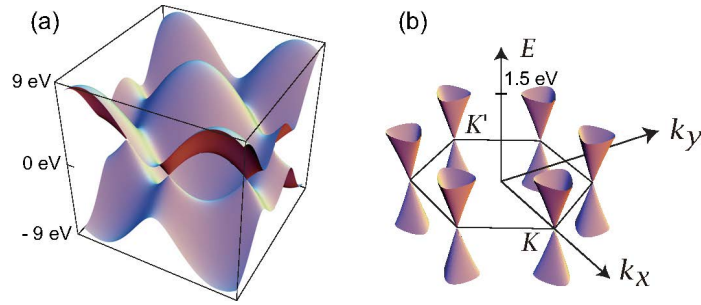


Figura 8 – Representação esquemática dos cones de Dirac localizados nos pontos K do grafeno. Figura retirada da referência (5)

eV, sendo a energia de Fermi.

Como observado, na relação entre a energia do estado e o respectivo momento, chamada relação de dispersão, as bandas não se sobrepõem em energia e o gap é nulo de forma que o topo da banda de valência e a base da de condução coincidem. Assim, pode-se excitar os elétrons da banda de valência para a de condução sem muito custo de energético.

A densidade zero de estados sem intervalo de gaps e as bandas de condução e valência encontrarem-se no ponto nulo de energia de Fermi dão ao grafeno o caráter especial de semimetal ou semiconductor de *gap* zero. É a essa formação característica dos elétrons mais externos no átomo que está vinculada a condutividade eletrônica do grafeno.

A primeira zona de Brillouin contém elétrons movendo-se livremente com energia relativamente baixa. Para regimes de baixa energia, ao redor dos pontos K a dispersão dos elétrons π no grafeno apresenta um comportamento linear com dependência do vetor de onda (tal qual uma partícula relativística com massa nula), de forma que comporta-se como férmions de Dirac não massivos em (D+1) dimensões, onde a seguinte relação de dispersão é válida:

$$E_{\pm}(\mathbf{k}) = \pm \hbar v_F \mathbf{k}. \quad (2.34)$$

A estrutura eletrônica do grafeno pode ser obtida através do método de tight-binding via interação com os primeiros átomos vizinhos. Essa aproximação fornece uma maneira útil de descrever as bandas de energia que surgem das camadas de transição atômicas e para a descrição da estrutura de banda eletrônica. Em seu desenvolvimento, assume-se que na vizinhança dos pontos da rede, o hamiltoniano (definido a partir do salto dos elétrons entre átomos de carbono dos vizinhos mais próximos) ao longo dos orbitais π , se assemelha ao de um único átomo localizado em um determinado ponto da rede. Assim, o espectro eletrônico fica escrito em termos do momento medido em relação aos pontos de Dirac como mostrado a seguir,

$$E_{\pm}(\mathbf{k}) = \pm \gamma \sqrt{1 + 4 \cos\left(\frac{\sqrt{3}k_x a}{2}\right) \cos\left(\frac{k_y a}{2}\right) + 4 \cos^2\left(\frac{k_x a}{2}\right)}, \quad (2.35)$$

apresentando duas soluções para a energia do sistema, de igual módulo e sinais contrários

com $E_+(\mathbf{k})$ e $E_-(\mathbf{k})$ sendo a banda de maior (valência) e a de menor energia (condução), respectivamente, simétricas em relação ao nível de Fermi.

2.3.4 Condutividade óptica do grafeno

Devido à sua estrutura de banda eletrônica sem gaps, o grafeno assume um caráter semi-metálico e, sendo assim, é adequado utilizar a condutividade como parâmetro para a caracterização de suas propriedades eletromagnéticas e interações luz-matéria. Sendo considerado um material bidimensional, em face à sua espessura monoatômica, é evidente que este seja modelado com uma condutividade de superfície. No entanto, há um detalhe a ser considerado: as estruturas macroscópicas são tridimensionais, e isto deve estar posto em todo o processo de modelagem.

Analiticamente, para melhor caracterizar a condutividade é útil separá-la em duas contribuições físicas distintas: as transições intrabanda e as transições interbanda. A primeira está associada exclusivamente à banda de condução ou de valência, enquanto a última vincula-se às transições verticais da banda de valência para a banda de condução. A Figura 9 ilustra esses processos.

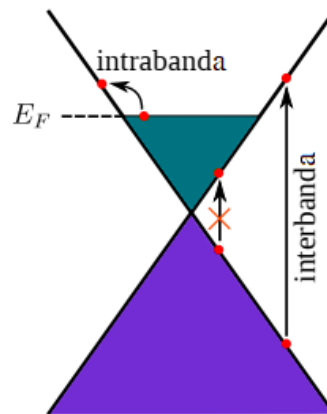


Figura 9 – Ilustração esquemática dos processos de transição intrabanda e interbanda. Adaptada da referência (6).

Ou seja,

$$\sigma_g(\omega) = \sigma_{intra}(\omega) + \sigma_{inter}(\omega), \quad (2.36)$$

de forma que as transições interbanda, na região de frequência THz, podem ser negligenciadas uma vez que as transições intrabanda são dominantes nesse regime. Para estas, pode-se fazer uso do modelo semi-clássico de Drude a ser discutido a seguir.

2.3.5 Modelo de Drude

O modelo proposto pelo físico alemão Paul Drude em 1900 tem sua inspiração na descoberta do elétron por J.J.Thompson, em 1897, cujo impacto nas teorias acerca da estrutura da

matéria foi vasto e sugeriu um mecanismo para a condução nos metais. Drude constrói sua teoria de condução elétrica e térmica aplicando, aos metais, a bem-sucedida teoria cinética dos gases, na aproximação de um modelo de gás de elétrons comportando-se como partículas livres - na consideração de que os elétrons de condução estão fracamente ligados e movem-se contra uma rede de pequenos núcleos iônicos espaçados em resposta a ação de um campo eletromagnético espacialmente uniforme aplicado. Para isto, algumas premissas básicas são necessárias, tais como (6, 32):

- cada elétron move-se uniformemente em linha reta, uma vez que nas colisões entre partículas e íons são desconsideradas as interações entre esses entes;
- as colisões são eventos instantâneos que alteram abruptamente a velocidade de um elétron;
- a probabilidade de um elétron sofrer uma colisão em qualquer intervalo de tempo infinitesimal dt/τ é $1/\tau$, sendo τ o parâmetro fenomenológico denominado tempo de relaxação, elemento que desempenha um papel fundamental na teoria da condução metálica.

Tal modelo fornece excelentes previsões para metais, especialmente no que diz respeito à condutividade e provê bons resultados na região do infravermelho e terahertz, visto que há um predomínio das transições intrabanda nas propriedades ópticas nesse regime do espectro eletromagnético.

2.3.5.1 Sem campo magnético externo

Para a região intrabanda, a condutividade do grafeno, na ausência de campo magnético externo, assume a característica isotrópica prevista no modelo analítico de Kubo:

$$\sigma_{intra}(\omega) = \frac{\sigma_0}{\pi} \frac{4}{\hbar\gamma - i\hbar\omega} \left[E_F + 2K_B T \ln \left(1 + e^{-\frac{E_F}{K_B T}} \right) \right], \quad (2.37)$$

com $\sigma_0 = \frac{e^2}{4\hbar}$ sendo a condutividade mínima do grafeno, K_B é a constante de Boltzmann, γ é a taxa de relaxação e E_F é a energia de Fermi ². Esta expressão é denominada fórmula de Kubo para a condutividade dinâmica do grafeno, para o caso em que são desconsiderados os efeitos não-locais. À temperatura zero ou, ainda, para quando a condição $E_F \gg K_B T$ é satisfeita, a Equação (2.37) reduz-se a (6)

$$\sigma_{intra}(\omega) = \frac{\sigma_0}{\pi} \frac{4E_F}{\hbar\gamma - i\hbar\omega}, \quad (2.38)$$

que é uma expressão semelhante ao modelo Drude para o grafeno.

² Em algumas literaturas, a energia de Fermi (E_F) e o potencial químico (μ_c) são considerados quantidades equivalentes. Isso porque o potencial químico do grafeno em temperatura nula, $\mu_c(T = 0) = E_F$, passa exatamente pelo plano em que o nível de Fermi se anula $E_F = 0$.

Para as transições interbanda, tem-se

$$\sigma_{inter}(\omega) = \sigma_0 \left[G\left(\frac{\hbar\omega}{2}\right) + i \frac{4\hbar\omega}{\pi} \int_0^\infty dE \frac{G(E) - G\left(\frac{\hbar\omega}{2}\right)}{(\hbar\omega)^2 - 4E_F^2} \right], \quad (2.39)$$

com

$$G(x) = \frac{\sinh\left(\frac{x}{K_B T}\right)}{\cosh\left(\frac{\mu}{K_B T}\right) - \cosh\left(\frac{x}{K_B T}\right)}, \quad (2.40)$$

que torna-se, sob as condições citadas acima,

$$\sigma_{inter}(\omega) = \sigma_0 \left[\Theta(\hbar\omega - 2E_F) + \frac{i}{\pi} \ln\left(\frac{\hbar\omega - 2E_F}{\hbar\omega + 2E_F}\right) \right], \quad (2.41)$$

com Θ sendo a função de Heaviside. Nesta última, ao analisar o denominador fazendo $2E_F > \hbar\omega$, nota-se, como já antecipado, que o termo de transições interbandas não gera contribuição significativa, confirmando que, de fato, as transições intrabanda são predominantes na região espectral de terahertz e infravermelho médio.

2.3.5.2 Com campo magnético externo

Sob a ação de um campo magnético externo e constante, surge nos sistemas eletrônicos bidimensionais uma resposta de natureza tensorial como manifestação direta da força de Lorentz, sob a forma de um tensor de condutividade magneto-óptica. Mais ainda, originam-se correntes eletrônicas longitudinais e transversais (33). Especificamente, se é considerada uma folha de grafeno com um campo magnético estático perpendicular ao seu plano, o grafeno acaba por apresentar a característica de anisotropia em sua condutividade que, por sua vez, pode ser deduzida inspecionando o movimento de um elétron sob um campo elétrico no plano do grafeno (34).

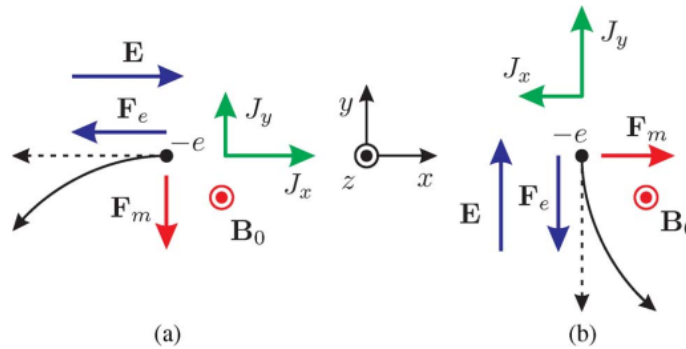


Figura 10 – Movimento de um elétron em um campo elétrico e magnético estáticos no grafeno. O elétron é acelerado na direção do campo elétrico e defletido perpendicularmente a este campo. Nesse ínterim, duas componentes de corrente elétrica, paralelas e perpendiculares ao campo elétrico, são geradas. (a) Caso do campo elétrico ao longo do eixo x . (b) Caso do campo elétrico ao longo do eixo y . Retirada da referência (7)

Em especial, sob a ação de um campo magnético, os espectros THz são dominados pelas ressonâncias de ciclotron que descrevem a interação de forças externas com partículas carregadas que se movem em uma trajetória circular como ilustrado na Figura 10. Assim, na frequência ciclotrônica (ω_c), os elétrons giram perpendicularmente ao plano $x - y$ tendendo a absorver a energia das ondas com frequência de radiação ω .

Esse detalhe é crucial para o estudo da plasmônica no grafeno, cujos efeitos manifestam-se na interface entre dois meios com propriedades ópticas ou magneto-ópticas distintas, dando origem aos modos de superfície confinados como solução especial para as equações de Maxwell denominados plasmons polaritons de superfície (SPPs), comentados mais detalhadamente na seção a seguir.

Tudo isso recai sobre a forma estrutural da condutividade na qual o setor dominante é o intrabanda. A partir deste ponto, para simplificar a notação, ao invés de $\sigma_{intra}(\omega)$, leia-se $\bar{\sigma}(\omega)$. A anisotropia presente no grafeno magnetizado é representada matematicamente pelo tensor a seguir (6, 12, 34):

$$\bar{\sigma}(\omega) = \begin{bmatrix} \bar{\sigma}_{xx} & \bar{\sigma}_{xy} \\ \bar{\sigma}_{yx} & \bar{\sigma}_{yy} \end{bmatrix}, \quad (2.42)$$

com

$$\bar{\sigma}_{xx} = \bar{\sigma}_{yy} = \frac{e^2 |\mu_c|}{\pi \hbar^2} \frac{1 + i\omega\tau}{(1 + i\omega\tau)^2 + \omega_c^2 \tau^2}, \quad (2.43)$$

$$\bar{\sigma}_{xy} = -\bar{\sigma}_{yx} = -\frac{e^2 |\mu_c|}{\pi \hbar^2} \frac{\omega_c \tau}{(1 + i\omega\tau)^2 + \omega_c^2 \tau^2}, \quad (2.44)$$

$$(2.45)$$

sendo σ_{ij} as componentes do tensor condutividade expressas pelo modelo semi-clássico de Drude. Note que estes termos são explicitamente dependentes da frequência de ciclotron

$$\omega_c = \frac{ev_F^2 B}{\mu_c}, \quad (2.46)$$

que, por sua vez, é influenciada pelo valor do campo magnético externo (B) aplicado.

Para a faixa de frequência de interesse neste trabalho (a faixa espectral THz), a aproximação acima fornece resultados precisos.

Os gráficos da Figura 11 ilustram a condutividade do disco de grafeno com os parâmetros utilizados neste trabalho e que são detalhados na seção 3.1. Pode-se notar que, na ausência de campo magnético, a única contribuição da condutividade está vinculada à componente $\sigma_{xx} = \sigma_{yy}$, uma vez que a componente $\sigma_{xy} = -\sigma_{yx}$ depende exclusivamente da frequência ciclotrônica que aparecerá apenas sob magnetização. O aumento do campo magnético desloca as curvas para frequências maiores.

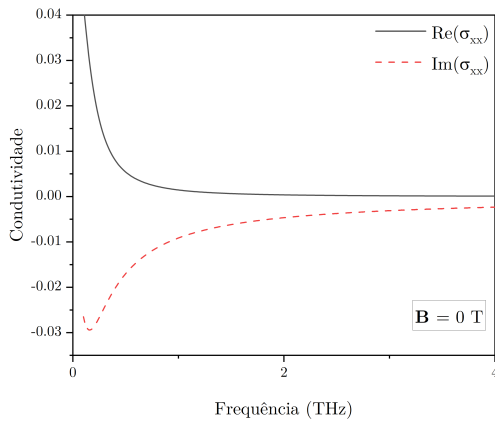
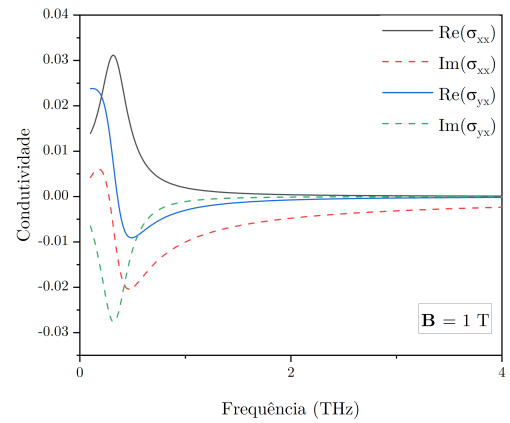
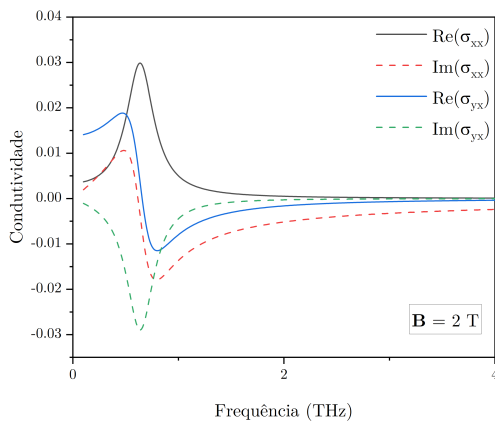
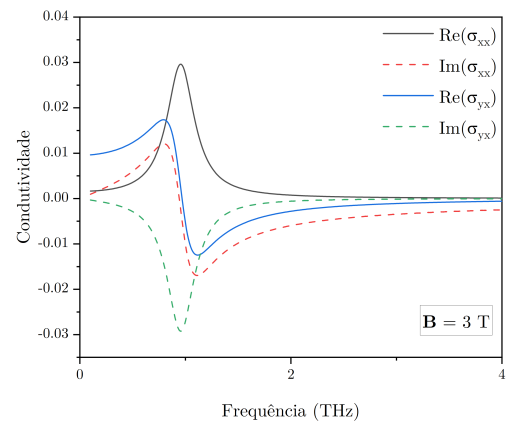
(a) $\mathbf{B} = 0 \text{ T}$.(b) $\mathbf{B} = 1 \text{ T}$.(c) $\mathbf{B} = 2 \text{ T}$.(d) $\mathbf{B} = 3 \text{ T}$.

Figura 11 – Gráficos de condutividade superficial do grafeno em função da frequência, contendo a parte real ($\text{Re}\{\sigma_{ij}\}$) e imaginária ($\text{Im}\{\sigma_{ij}\}$) para o campo magnético de 0 T a 3 T.

A condutividade de Drude na ausência de campo magnético é recuperada configurando $\mathbf{B} = 0 \text{ T}$.

2.4 Plasmônica

Os primeiros estudos da plasmônica foram investigados a partir da desigual distribuição da luz em um espectro de grade de difração em um fenômeno observado em 1902 pelo físico norte-americano Robert Wood, que ficou conhecido como anomalia de Wood (35). Este fenômeno abriu portas para o que viria a ser a plasmônica quando Ugo Fano, cerca de quarenta anos depois, mostrou que tais anomalias dependiam de ondas eletromagnéticas excitadas com grande momento tangencial em uma superfície metálica (36).

Mais tarde, William Crookes relata o plasma - à época nomeado de “matéria radiante” - como quarto estado fundamental da matéria formado pela oscilação de gases ionizados (37).

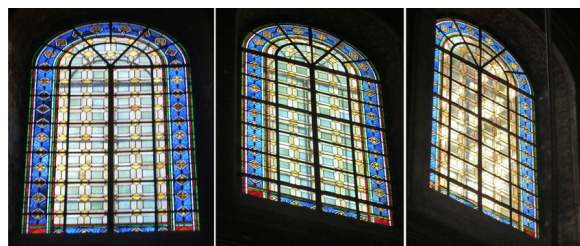
Juntamente com Tonks, mostra que o plasma sustenta oscilações iônicas e eletrônicas que formam uma onda de densidade eletrônica equivalente àquelas observadas por Fano, mas quantificada com os plasmons e tendo uma frequência ressonante associada (38).

Com os avanços nas pesquisas posteriores aos trabalhos iniciais acima citados, sabe-se hoje que os plasmons são exemplos de excitações coletivas em sistemas de matéria condensada, descrevendo a interação destes com a radiação eletromagnética, de forma que a propagação das ondas EM em um material que suporta esses modos coletivos pode ser fortemente modificada.

Os efeitos ópticos dos plasmons podem ser observados a nível macroscópico como evidenciam alguns artefatos antigos. Pode-se citar dois exemplos conhecidos acerca desse tema: no primeiro, tem-se o cálice romano composto usando nanopartículas de ouro para produzir o vidro de rubi, datado do século IV d.C., que apresenta mudanças de cor à medida que a luz interage com o material, devido à excitação das partículas metálicas dentro do vidro como mostrado em Fig.(12a) (39). No segundo, produzidos por artesãos medievais que também exploraram o efeito da adição de partículas de metal no vidro para criar vitrais, observa-se a mudança de cor nas janelas que decoram a Basílica de Notre Dame de la Daurade em Toulouse, na França, através da variação do ângulo de incidência da luz solar em Fig.(12b) (40).



(a) Cálice romano (taça de Licurgo) do século IV d.C com cores alteradas pela interação do material do mesmo com a luz.



(b) Janela da Basílica de Notre Dame, na França, com diferentes cores pela variação do ângulo de incidência luminosa.

Figura 12 – Exemplos de efeitos ópticos de plasmons (8).

Hoje, sabe-se que podem ser obtidas duas soluções que representam as ondas eletromagnéticas radiativas e coletivas derivadas das equações de Maxwell (38). Para esta última, denominamos de *plasmon* um *quantum* de oscilação de plasma. A nível comparativo, a oscilação

da luz está para os fótons, assim como a oscilação do plasma está para os plasmons. Portanto, os plasmons são as oscilações coletivas de cargas na superfície de certos materiais metálicos.

Sendo assim, a plasmônica é uma área promissora na análise de propagação de ondas através de superfícies metálicas planares ou seus arranjos periódicos sendo largamente estudada na engenharia e física aplicada. Dada as suas peculiaridades, despertou interesse de diversos cientistas e profissionais cujo esforço está centrado em integrá-la aos circuitos elétricos e fotônicos com a seleção de materiais que permitam a criação de dispositivos passivos eficientes e ajustáveis na faixa de THz, podendo-se alterar propriedades refletivas e absorptivas das ondas EM, podendo permitir ou proibir sua propagação em certa faixa de frequência.

Nesse sentido, o grafeno é um material oportuno visto que possui características únicas, incluindo o melhoramento da interação da interação com a luz devido a um tipo especial de oscilação denominadas plasmons de superfície, além da forte interação com a radiação terahertz, que desempenham um papel importante nas propriedades ópticas e condutoras de metais e semicondutores.

2.4.1 Plasmons Polaritons de Superfície

Por possuírem um vetor de onda maior que os da onda de luz com a mesma energia, os plasmons de superfície (SPs) não podem ser excitados por luz incidente. No entanto, sob certas circunstâncias, estes podem se acoplar aos fótons, produzindo plasmons polaritons de superfície (SPPs). O termo é tal pois envolve tanto o movimento de cargas no metal, atrelado aos plasmons, quanto às ondas eletromagnéticas no ar ou dielétrico, vinculado aos polaritons.

Assim, os SPPs são ondas que se propagam ao longo de uma interface metal-dielétrico ou metal-ar, em torno da região de frequência infravermelha ou visível, sendo oscilações longitudinais da nuvem eletrônica na direção de polarização do campo elétrico (6, 41). A Figura 13 esquematiza os SPPs.

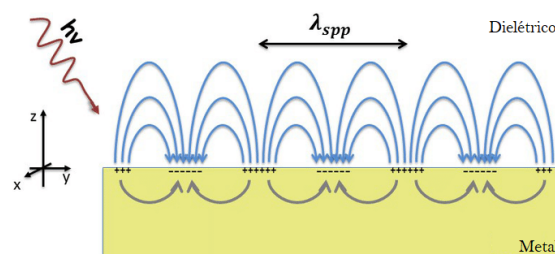


Figura 13 – Figura esquemática ilustrando os SPPs na interface dielétrico/metal. Adaptada da referência (8).

Ainda sobre o problema de excitação, um feixe de luz que atinge a superfície metálica vindo do ar não excitará o plasmon na interface, a menos que o momento do fóton seja aumentado para igualar ao momento SP. Para isso, a incompatibilidade de momento resultante entre luz e

SPs da mesma frequência deve ser superada no caso em que a excitação por onda EM é desejada (25).

Existem três alternativas principais que torna isso possível. A primeira é usar um acoplamento de prisma para aumentar o momento da luz incidente (6). A segunda faz uso de uma ondulação periódica na superfície do metal. E a terceira envolve a inclusão de defeitos geométricos na superfície (16).

O uso dessas excitações coletivas é consideravelmente relevante devido aos seus inúmeros benefícios, a saber: possuem um comprimento de onda mais curto do que a luz no vácuo na mesma frequência (fótons), podendo ter um momento e intensidade de campo local mais altos, além de possuir alto confinamento em escala de sub-comprimento de onda quando perpendiculares à interface e propagam-se a longa distância ao longo da superfície.

2.4.2 Plasmons polaritons de superfície de grafeno

O grafeno suporta a transmissão de SPPs em sua superfície com características peculiares como alta mobilidade de portadores, forte localização, baixo consumo de energia e alta sintonização. Por isso, especifica-se nesse material os plásmons polaritons de superfície de grafeno (GSPPs) e apresentam aplicações funcionais na transmissão óptica, fotodetectores, guias de onda, metamateriais e nanolasers (42).

Tal como em metais onde a manifestação dos SPPs dá-se nas regiões do visível e infravermelho próximo, o grafeno pode suportar SPPs nas frequências do infravermelho médio e THz (43). A vantagem do grafeno sobre os metais reside no fato de que os GSPPs exibem modo de confinamento muito mais forte e comprimento de propagação relativamente maior. Especialmente, no grafeno, o comprimento de onda SPP pode ser cerca de 40 vezes menor que o comprimento de onda da radiação incidente no espaço livre (44). Ademais, também permitem controlar as propriedades dos SPPs de grafeno visto que a energia de Fermi pode ser ajustada através da tensão de porta e dopagem química, por exemplo (41).

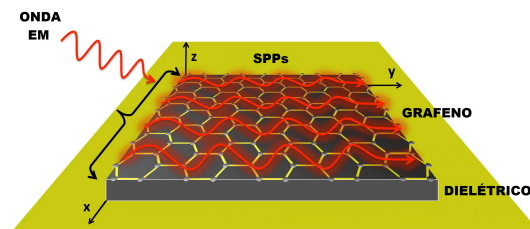


Figura 14 – Figura esquemática ilustrando as SPPs no grafeno (GSPPs).
Adaptada da referência (9).

Os GSPPs podem ser entendidos como soluções das equações de Maxwell que descrevem

uma onda eletromagnética se propagando ao longo de uma folha de grafeno condutora. O campo eletromagnético é fortemente confinado na vizinhança do grafeno, com evanescência fora do plano. Seu tipo de polarização característica é o modo TM e sua curva de dispersão, pode ser ajustada controlando a densidade de portadores. Em comparação com os SPPs na superfície de metais nobres, os polaritons de grafeno têm vantagens significativas, pois são caracterizados por uma vida útil mais longa e um maior grau de confinamento de campo (45).

Reiterando, os SPPs e, portanto, também os GSPPs, não podem ser excitados por luz direta devido às razões cinemáticas anteriormente citadas. Dessa forma, faz-se necessário utilizar de algum mecanismo que promova uma excitação desses entes, seja espalhamento com grades de difração, ondulação ou rugosidade na superfície condutora ou a inclusão de algum defeito geométrico que quebre a simetria original. Neste trabalho, optamos pela última, onde o defeito geométrico escolhido foi a quebra de simetria no disco de grafeno através de uma fenda retangular partindo de um de seus eixos até cerca de $1/5$ do raio. Todos os parâmetros estão descritos detalhadamente na subseção 3.1.

3 Cálculos Numéricos

3.1 Estrutura e parâmetros do ressonador circular de grafeno

A estrutura investigada baseia-se no arranjo periódico de ressonadores de grafeno em forma de disco dispostos no espaço livre. Neste trabalho, realizou-se dois tipos de estudo, a saber, estudo de autofrequência para a investigação dos modos naturais do ressonador e o estudo de excitação com onda plana de incidência normal à superfície. Das seções anteriores, sabe-se que há um problema a nível excitativo dos SPPs no grafeno de forma que estes não podem ser excitados apenas com onda EM. A alternativa escolhida para verificar a excitação de modos superiores ao dipolo foi a investigação da mesma geometria circular, porém, acrescida de um defeito no disco de grafeno.

Assim, o modelo de autofrequências possibilitou a observância dos modos ressonantes existentes no disco de grafeno completo, enquanto que o estudo com excitação se deu para o grafeno com a presença do defeito geométrico caracterizado por uma fenda axial na direção y partindo da borda com lado $L_y = 550$ nm e na direção x com lado $L_x = 10$ nm, sem alterações significativas na geometria original do disco.

A seguir na Tabela 1 estão detalhados todos os parâmetros numéricos utilizados na modelagem do problema.

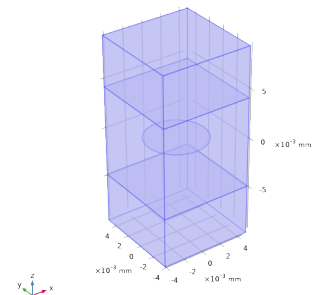
Disco		
Parâmetro	Descrição	Estrutura
$A = 9\mu\text{m}$ $\mu_c = 0,5\text{ eV}$ $V_F = 10^6\text{ m/s}$ $\tau = 1\text{ ps}$ $\gamma = 1/\tau = 10^{12}\text{ s}^{-1}$ $T = 300\text{ K}$ $\theta = 0\text{ rad}$ $\phi = 0\text{ rad}$	lado da célula unitária potencial químico velocidade de Fermi tempo de relaxação taxa de espalhamento temperatura ângulo de elevação ângulo azimute	

Tabela 1 – Parâmetros comuns utilizados na modelagem do disco de grafeno, com e sem fenda, acompanhados da imagem da estrutura formada com estes valores contendo a ilustração da célula unitária que envolve o grafeno. A estrutura contém acima e abaixo uma caixa PML de altura $5\mu\text{m}$.

A Tabela 2 compara os parâmetros de geometria utilizados para o caso em que se realizou a inserção do defeito em forma de uma fenda retangular em um lado do eixo que corta o raio original.

Disco	Parâmetro	Descrição
Sem fenda	$R_G = 3 \mu\text{m}$	raio do disco
Com fenda	$L_x = 10 \text{ nm}$ $L_y = 550 \text{ nm}$	lado do retângulo em x lado do retângulo em y

Tabela 2 – Parâmetros utilizados especificamente para cada uma das configurações (sem e com defeito)

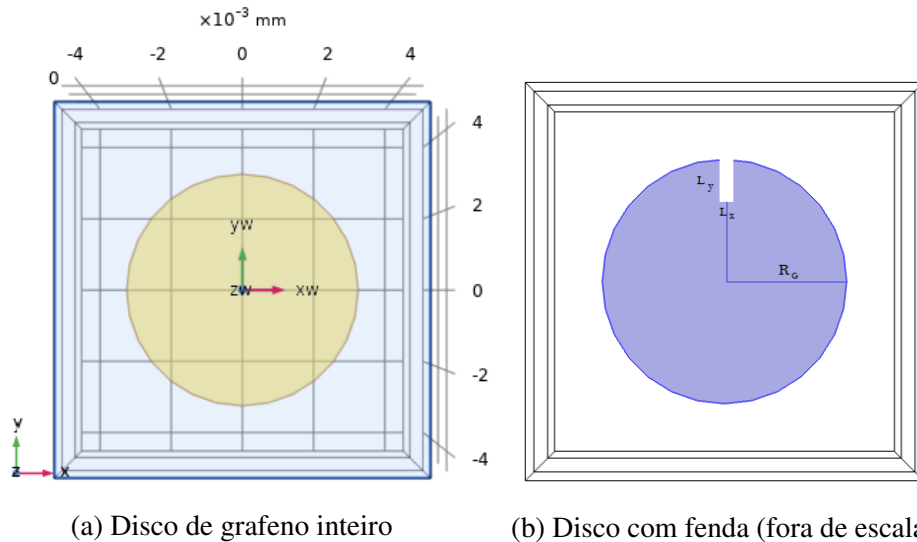


Figura 15 – Ilustração gerada pelo software COMSOL contendo a vista superior da estrutura do disco de grafeno. No centro encontra-se o disco 2D de grafeno de raio $3 \mu\text{m}$ envolto por um cubo de ar de lados $9 \mu\text{m}$.

As variáveis comuns da geometria são a frequência angular $\omega = 2\pi f$, o tensor de condutividade $\sigma(\omega)$ com componentes dadas por (2.43) e (2.44) e a frequência de ciclotron ω_c mostrada em (2.46) a depender do valor do campo magnético DC aplicado. Sobre este último, alterou-se o valor de intensidade de campo \mathbf{B} de forma a investigar sua influência para os casos de $\mathbf{B} = 1 \text{ T}$, $\mathbf{B} = 2 \text{ T}$ e $\mathbf{B} = 3 \text{ T}$ comparativamente à situação de ausência do mesmo ($\mathbf{B} = 0 \text{ T}$).

3.2 Modelagem computacional do arranjo do grafeno usando o software Comsol Multiphysics

Utilizou-se o software comercial COMSOL Multiphysics versão 5.6 para a análise, solução e simulação do problema. Este utiliza o método de elementos finitos (MEF) a fim de determinar as soluções aproximadas via análise numérica a partir da subdivisão da geometria em pequenas partes apresentadas na forma triangular, quadrilateral, entre outras. O método resulta na substituição de um número infinito de variáveis desconhecidas por um número finito de entes denominados elementos que, por sua vez, tem comportamento bem definido por representar funções desconhecidas através de aproximações (46).

Para tal, elencamos parâmetros fixos dos materiais e estrutura bem como as variáveis associadas à condutividade do grafeno e frequência angular detalhados na subseção 3.1. Dispomos a geometria centralizando o disco de grafeno de raio $3\mu\text{m}$ envolvido por um pela célula unitária representada por um bloco cúbico de ar de lado $9\mu\text{m}$.

Um desafio para a modelagem computacional do grafeno é precisamente a sua realidade quase bidimensional dada a sua espessura de caráter atômico, de forma que sua dimensão real não pode ser diretamente inserida no software. Uma forma recorrente de contornar esse problema é considerar uma camada tridimensional de grafeno com uma espessura $\Delta = 1\text{nm}$ finita e dividir o tensor de condutividade superficial do material por este valor da forma $[\sigma_v] = \frac{[\sigma_s]}{\Delta}$, resultando numa condutividade volumétrica.

No entanto, uma outra abordagem tornou-se relevante e mais compatível com resultados experimentais adotando a aproximação 2D do grafeno (47). Por ser um material de dimensões cuja espessura é desprezível, mostrou-se razoável modelar o grafeno com uma geometria bidimensional - além de exigir menos poder computacional. Para tal, ajusta-se sua condutividade de forma que abranja a superfície do disco verificando nesta uma densidade de corrente superficial J_s induzida proveniente da Lei de Ohm que, no domínio da frequência, equivale ao produto da condutividade do material e do campo elétrico - como explicitada em (3.8) e (3.9). Consequentemente, adicionou-se uma condição de contorno superficial exclusiva sobre o grafeno no setor de especificação da física presente no problema.

No regime semi-clássico, a condutividade é bem caracterizada pelo modelo de Drude com elementos que também são função dos parâmetros no grafeno como a amplitude do campo magnético DC externo, velocidade de Fermi, taxa de espalhamento e potencial químico, bem como descrita pela ressonância ciclotrônica.

A excitação dá-se na porta inicial por onda plana normalmente incidente, como mostra a Figura 16. Ambas as portas são modeladas sob condição no domínio "Floquet periodicity" dada a periodicidade espacial com a qual se repete a estrutura da célula primitiva grafeno-ar modelando assim as condições de contorno da célula unitária.

Verticalmente, encerrando toda a estrutura adicionou-se dois blocos de camadas perfeitamente combinadas (PML), um no topo da camada de ar e outro inferiormente. A grade de malha é então refinada, mostrada em Figura 18a, com tamanho dos elementos na forma extrafina de maneira que o grafeno adquira a distribuição "free tetrahedral" em seus domínios, onde uma combinação de elementos triangulares e tetraédricos é preferível.

Primeiramente, na seção de estudos, optou-se pelo pacote de análise Eigenfrequency visto que o objetivo inicial é observar a forma dos modos de vibração próprios do grafeno sob certa faixa de frequências, mais especificamente por volta de 6,5 THz.

As etapas da construção da estrutura até a obtenção dos resultados estão ilustradas no fluxograma abaixo e detalhadas posteriormente:

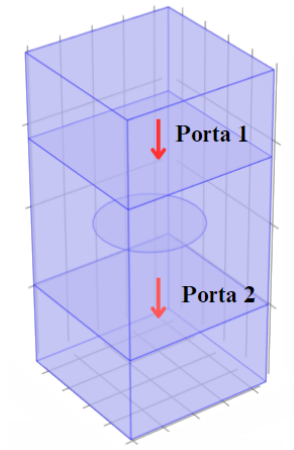


Figura 16 – Figura ilustrando a porta inicial (porta 1) e de saída (porta 2).

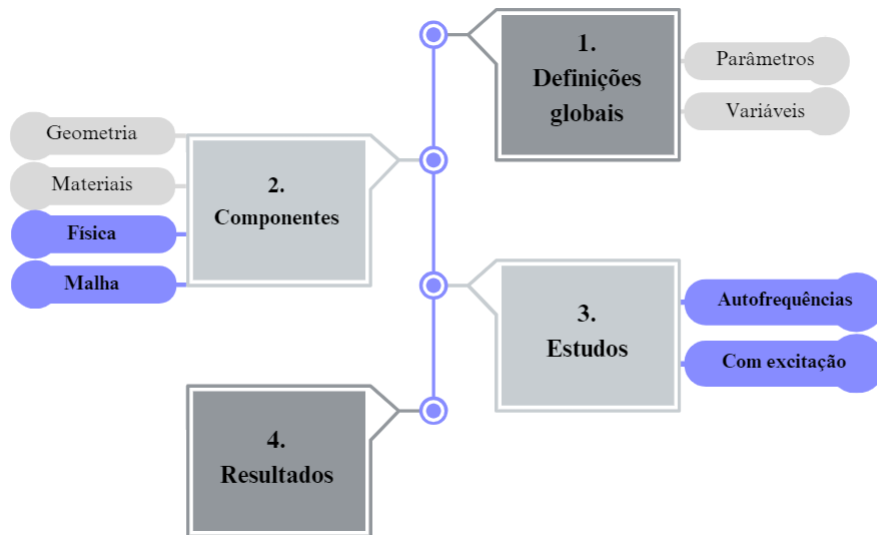


Figura 17 – Fluxograma contendo as quatro etapas principais da modelagem no COMSOL.

I. Definições globais

- Definição de parâmetros e variáveis: Nesta etapa de definições globais são indicados todos parâmetros como constantes universais, valores que balizam a geometria, expressões numéricas com termos bem definidos como os detalhados na Tabela 1, bem como todas as expressões algébricas com dependência de certa quantidade não constante, a exemplo do intervalo de frequência ω desejado como é o caso da condutividade que caracteriza o grafeno.

II. Componentes

- Especificação da geometria e seleção de materiais

Fazendo uso dos valores que dimensionam a estrutura já anteriormente estabelecidos, provê-se o esquema geométrico desta selecionando os elementos que a compõem e os posicionando na orientação desejada. Nesse caso, utilizou-se um cubo de lados $9\mu\text{m}$ e um disco

bidimensional centralizado de raio $3\ \mu\text{m}$. Acima e abaixo da estrutura adicionou-se uma camada a ser identificada como condição de contorno PML¹ de altura $5\ \mu\text{m}$. Utilizando a opção união de forma (*form union*) construiu-se então uma estrutura geométrica única de $19\ \mu\text{m}$ verticalmente.

Em seguida, identificou-se cubo com o material de ar considerando as suas características básicas fornecidas pelo programa. O mesmo procedimento foi realizado para o caso em que se considerou o disco com fenda, apenas removendo do raio original as dimensões do retângulo a representar o defeito estrutural de lados $L_x = 10\ \text{nm}$ e $L_y = 550\ \text{nm}$.

- Parâmetros físicos

É a parte fundamental que contém a interface física do modelo juntamente com a especificação das condições de contorno. A física do problema envolve ondas eletromagnéticas (electromagnetic waves - EMW) e, portanto, a descrição das equações de Maxwell discutidas na Seção 2.2 é apropriada. Selecionando os domínios para um condutor elétrico perfeito, não aplicável apenas sobre o disco, face superior e inferior do bloco de ar, ajusta-se as condições periódicas nos lados da camada de ar e nas faces laterais da camada PML sob a condição "floquet periodicity", visto que o problema possui uma periodicidade espacial da geometria em várias direções com célula unitária de estrutura repetitiva, com vetor de número de onda para excitação \mathbf{k}_F a seguir

$$\mathbf{k}_F = k_x \hat{x} + k_y \hat{y} \quad [\text{rad/m}], \quad (3.1)$$

onde k_x e k_y são,

$$k_x = k_0 \sin(\theta) \cos(\phi), \quad (3.2)$$

$$k_y = k_0 \sin(\theta) \sin(\phi). \quad (3.3)$$

Posteriormente, determina-se o tipo de porta. Esse nó indica se a onda entra ou sai do modelo e suporta cálculos de parâmetros S, sendo utilizada para excitar o modelo. Especificou-se o modo próprio da onda incidente na porta com entrada de energia igual a $1W$ que dá-se somente na porta superior. Ativou-se a condição slit (abertura) para usar em limites internos a condição do tipo domain-backed de forma a não haver ondas refletidas do setor das portas. Assim, o domínio de apoio truncado por uma PML é justificado. O modo de campo eletromagnético é especificado com a amplitude a seguir:

$$E_{0x} = e^{-ik_x x} e^{-ik_y y} (1 - \text{pol}_y) \quad [\text{V/m}], \quad (3.4)$$

e

$$E_{0y} = e^{-ik_x x} e^{-ik_y y} (\text{pol}_y) \quad [\text{V/m}], \quad (3.5)$$

¹ Uma PML é uma camada de absorção ou domínio artificial para equações de onda projetada de tal forma que as ondas incidentes não reflitam na interface PML/Não-PML.

com $pol_y = 1$, além da constante de propagação β

$$\beta = |k_z| = |k_0 \cos(\theta)|. \quad (3.6)$$

Ademais voltada para as faces superior e inferior das PML, seleciona-se a condição de espalhamento de ondas planas (scattering boundary condition) sem incidência de campo que é uma condição de contorno transparente para ondas planas de entrada com qualquer ângulo de incidência.

Finalmente, adicionamos a condição crucial que modela o disco bidimensional cujo material, até então, ainda não havia sido anteriormente especificado. Nesta última etapa do setor de componentes caracterizamos o disco como grafeno a partir da sua condutividade superficial inserida como variável que compõe a densidade de corrente superficial,

$$\mathbf{n} \times (\mathbf{H}_1 - \mathbf{H}_2) = \mathbf{J}_{s_i}, \quad (3.7)$$

com

$$J_{s_x} = \sigma_{xx}E_x + \sigma_{xy}E_y, \quad (3.8)$$

e

$$J_{s_y} = \sigma_{yx}E_x + \sigma_{yy}E_y. \quad (3.9)$$

dependentes necessariamente de sua condutividade explicitada nas definições globais.

- Malha

O setor de malha é a discretização do espaço para que se torne possível a análise de elementos finitos. Nele, pode-se dividir a geometria em formas ou combinação de elementos triangulares, tetraédricos, hexaédricos, piramidais e quadriláteros. O COMSOL disponibiliza nove configurações predefinidas acerca do tamanho dos elementos, que variam de extremamente fino a extremamente grosso. Tanto melhor estruturada (refinada) a malha, mais memória e tempo computacional são exigidos. É importante atentar, porém, que sem um bom refinamento há comprometimento com a simulação podendo ocorrer diversos erros.

Uma forma de manter um bom refinamento é priorizar a discretização dos espaços nas regiões em torno do alvo de estudo. Assim, utilizou-se uma distribuição pré-definida normal de forma a definir as bordas da PML (indicadas na cor azul da Figura 18b) com sequência de crescimento da fórmula do tipo aritmética; seus limites laterais foram discretizados com o nó de mapeamento (*mapped*); o nó de varredura (*swept*) foi usado para abarcar todo este domínio controlando o número e distribuição de elemento para a quantidade fixa de oito elementos.

Para os limites da camada de ar, ainda na predefinição normal, configurou-se as opções triangular livre (*free triangular*) em quatro faces do cubo - exceto onde foram especificadas as

portas, e tetraédrico livre (*free tetrahedral*) para compor seu domínio. Passando para a malha extremamente fina personalizada, adicionou-se a discretização tetraédrica livre para o grafeno e lados restantes, de forma a conter mais elementos de malha no disco de grafeno com customização do tamanho máximo e mínimo de elementos como $4,6 \times 10^{-5}$ a $4,6 \times 10^{-7}$, respectivamente.

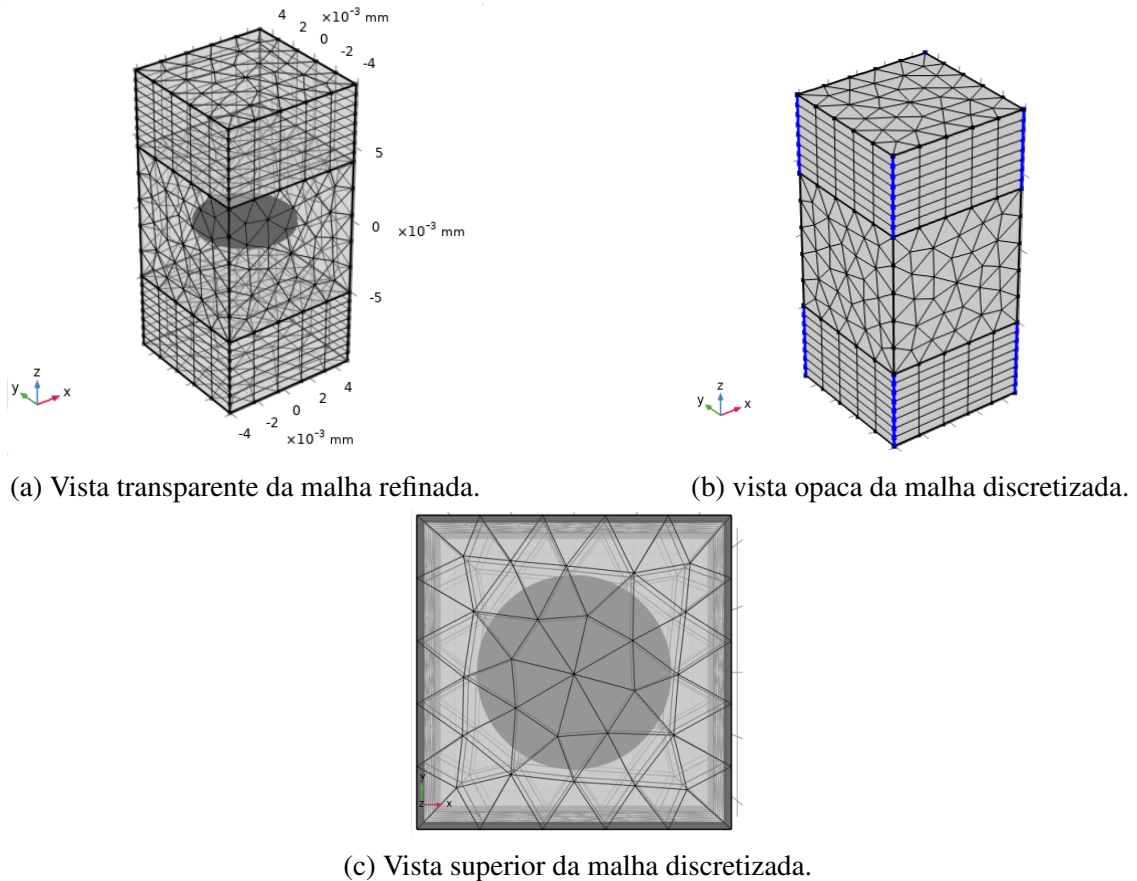


Figura 18 – Ilustração gerada pelo software COMSOL contendo a malha refinada da estrutura. A ênfase foi dada ao grafeno estruturado com elementos tetraédricos ultra finos enquanto os lados do cubo, a exceção das portas, receberam tratamento *free triangular*.

III. Estudos²

- Autofrequências

Neste estudo o software realiza o cálculo de todos os possíveis em torno de uma dada frequência requerida. Assim, resolve as autofrequências (também denominadas frequências naturais ou ressonantes) e fornece as formas dos automodos (campo eletromagnético normalizado) correspondentes a elas. Dessa forma, fornecerá uma lista, exibida no setor de resultados, com todas as frequências possíveis do sistema dispondo suas partes reais e imaginárias.

- Domínio de frequência

² A análise de autofrequência e domínio de frequência são estudos distintos e independentes, mas que podem se complementar potencializando a investigação dos resultados.

Tendo as informações acerca dos automodos obtidas no estudo de autofrequência, pode-se verificar a resposta do sistema considerando os efeitos de todos os modos resolvidos no refinamento da malha e verificar como se comportam quando submetido à excitação por onda plana incidente aplicada. O nome dado a esse tipo de estudo no modelo do COMSOL é domínio de frequência (*frequency domain*), entendido aqui como regime de excitação. É uma etapa útil e fundamental do cálculo de transmissão e reflexão em função da frequência, bem como para a obtenção dos gráficos de desdobramento, por exemplo.

IV. Resultados

- Pós-processamento dos resultados

É o setor de investigação dos resultados gerados a partir dos cálculos realizados pelo software via MEF. Pode-se sugerir plots de gráficos, gerar animações para visualizar a simulação, tabelar valores, observar superfícies e diversos parâmetros a partir de soluções personalizadas aplicáveis às circunstâncias únicas do problema. A depender do tipo de estudo escolhido, o leque de visualização automática varia. Num estudo eigenfrequency, o COMSOL fornece automaticamente os dados necessários para a visualização dos modos, por exemplo. E, por se tratar de uma plataforma editável e interativa, pode-se adicionar outros ramos investigativos relevantes, como gráficos de condutividade para distintos valores de campo magnético aplicados e a transmissão para o caso do estudo de excitação.

Nesse setor, obtivemos as imagens dos modos com campo elétrico E_z visualizado no plano a cerca de 200nm abaixo do grafeno, bem como a disposição da corrente superficial no disco. Também foram gerados os pontos para os gráficos de condutividade e transmissão num intervalo de 0,1 a 10 THz.

4 Resultados

4.1 Ressonador circular de grafeno

Busca-se analisar a estrutura periódica com elementos em discos de grafeno na configuração natural (sem excitação) e no regime em que as ressonâncias de GSPPs no ressonador são excitadas. A geometria estudada em autofrequências refere-se ao disco de grafeno inteiro, enquanto que a geometria abordada no estudo de excitação por onda plana dá-se para o disco de grafeno com o corte axial retangular.

Com isso, diferentes modos são calculados e obtidos para distintas faixas de frequências com comportamento analisado sob a influência da magnetização por campos externos nos valores de $\mathbf{B} = 0 \text{ T}$, $\mathbf{B} = 1 \text{ T}$, $\mathbf{B} = 2 \text{ T}$ e $\mathbf{B} = 3 \text{ T}$.

4.1.1 Análise de autofrequências

Primeiramente, sem excitação, o objetivo é verificar as frequências naturais nas quais o sistema tende a ressonar caracterizando um modo próprio (automodo). É importante frisar que esse tipo de análise fornece os automodos correspondentes, bem como a distribuição de frequências próprias destes manifestando o comportamento do sistema. As autofrequências resultantes apresentarão valores complexos, onde a parte real contém a frequência angular e a parte imaginária fornece informações sobre o amortecimento do modo.

Na análise estudada, investigamos quais modos e frequências de ressonâncias podem existir na estrutura. Dos modos que apresentavam de dois a doze polos, apenas um número limitado foi escolhido. São eles: modo dipolo, quadrupolo, hexapolo e o modo de simetria azimutal. A justificativa para tal escolha repousa na improbabilidade de que modos mais altos sejam excitados de forma significativa e geralmente possuem um amortecimento mais alto.

Dessa forma, investigou-se primeiramente o comportamento do sistema sem magnetização para, de forma subsequente, investigá-lo sob ação de campo magnético DC externo sob os parâmetros apresentados na Tabela 1. Para este estudo verificou-se inicialmente quais os possíveis modos existentes para a estrutura em questão bem como a distribuição do campo elétrico a ser observado na direção E_z .

4.1.1.1 Sem campo magnético externo

Inicialmente, realizou-se a análise sem excitação para o caso em que não há incidência de campo magnético DC externo sobre o arranjo. Observou-se, a geração diversos modos como o dipolo, quadrupolo, hexapolo, modo de simetria azimutal, octopolo, decapolo e dodecapolo com

todas as suas respectivas frequências de ressonâncias. Desses modos, selecionou-se os quatro primeiros para balizar a análise, estando ilustrados na Tabela 3, com seus respectivos valores de autofrequências obtidas.

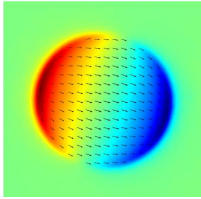
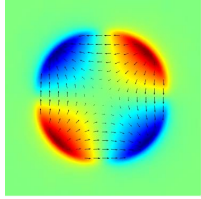
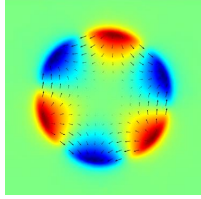
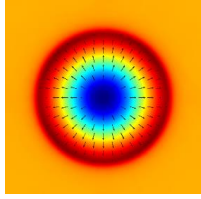
Autofrequências			
Modo dipolo	Modo quadrupolo	Modo hexapolo	Simetria azimutal
			
$(5,245 + 0,357i)$ THz	$(7,284 + 0,077i)$ THz	$(8,844 + 0,082i)$ THz	$(9,759 + 0,088i)$ THz

Tabela 3 – Modos presentes no arranjo sem campo magnético ($\mathbf{B} = 0$ T) e suas respectivas autofrequências complexas.

Na ausência de campo magnético, pode-se observar a inversão na fase dos polos variando em intensidade na escala direta de campo elétrico E_z máximo e mínimo (cores vermelho e azul respectivamente), mas não se verifica rotação. A densidade de corrente superficial é ortogonal e aponta no sentido máximo \rightarrow mínimo.

Sabe-se que os plasmons, as oscilações coletivas de sistemas de elétrons discutidas na seção 2.4, podem acoplar eficientemente à luz.

Um modo diferente do que estamos acostumados a ver é o de simetria azimutal. Este leva esse nome pois possui uma variação de campo elétrico radialmente. Este modo, que aparece em autofrequências como um modo natural desta configuração, não teve pico observado na análise de ressonância em domínio de excitação.

As frequências de ressonantes que aparecem em termos de uma parte real e imaginária nos dão suporte para a discussão acerca do estudo de excitação visto que nem todos esses modos plasmônicos podem ser excitados diretamente devido às restrições da simetria estrutural. De fato, as excitações dos modos ressonantes em uma estrutura fotônica dependem fortemente de sua simetria. Para uma estrutura com alta simetria, como é no caso circular, podem existir modos escuros que são difíceis de serem excitados diretamente pela luz externa. No entanto, esses modos escuros podem ser excitados quebrando a simetria estrutural.

Em geral, o setor imaginário está vinculado ao acoplamento com onda incidente. No caso do grafeno, como no disco já estão incluídas as perdas do material intrínsecas ao parâmetro τ , não necessariamente esse setor designa um possível acoplamento. Para parte imaginária grande, como o caso do dipolo que aparece em torno de 0,357 THz, há predominância dessa

influência sobre os outros modos de forma a não apresentar problema resposta à excitação. Por isso, pode-se considerar o quadrupolo e hexapolo, por exemplo, como modos escuros e para excitá-los é necessário quebrar a simetria.

4.1.1.2 Com campo magnético externo

Em função do aumento do campo magnético aplicado, ocorre o afastamento das frequências de ressonância como visto, onde é possível observar os modos dipolos girantes ω_+ e ω_- afastando-se. Sabe-se que para um dado campo magnético, a separação máxima é realizada em discos (48). A Tabela 4 mostra comparativamente a forma de todos os modos obtidos nesse regime de estudo onde não se têm excitação concomitante aos modos obtidos quando não se submete o arranjo a um campo magnético externo.

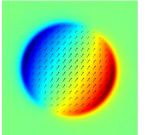
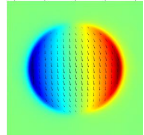
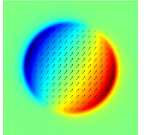
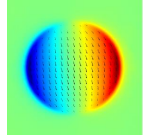
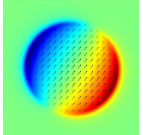
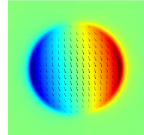
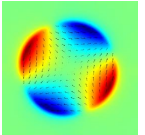
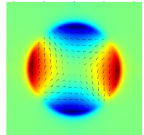
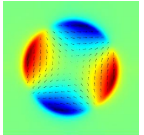
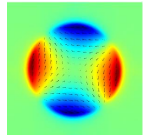
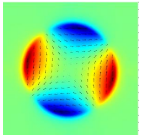
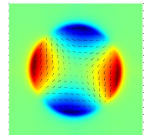
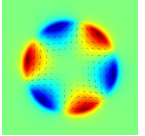
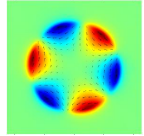
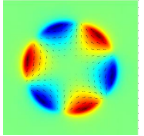
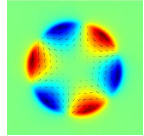
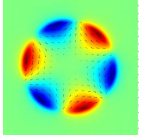
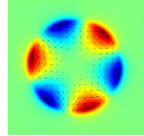
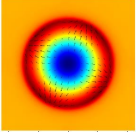
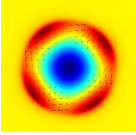
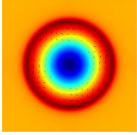
Modos	Autofrequências					
	B = 1 T		B = 2 T		B = 3 T	
	ω_-	ω_+	ω_-	ω_+	ω_-	ω_+
Dipolo						
	(5,105 + 0,346i) THz	(5,390 + 0,367i) THz	(4,970 + 0,336i) THz	(5,541 + 0,377i) THz	(4,841 + 0,326i) THz	(5,698 + 0,386i) THz
Quadrupolo						
	(7,215 + 0,076i) THz	(7,550 + 0,080i) THz	(7,099 + 0,075i) THz	(7,679 + 0,082i) THz	(6,977 + 0,074i) THz	(7,822 + 0,084i) THz
Hexapolo						
	(8,707 + 0,079i) THz	(8,987 + 0,086i) THz	(8,577 + 0,077i) THz	(9,140 + 0,091i) THz	(8,451 + 0,075i) THz	(9,308 + 0,100i) THz
Simetria azimutal						
	(9,768 + 0,089i) THz		(9,793 + 0,091i) THz		(9,838 + 0,098i) THz	

Tabela 4 – Vista da componente E_z do campo elétrico e autofrequências do ressonador circular de grafeno para os campos de 1T, 2T e 3T culminando em modos dipolo, quadrupolo, hexapolo e azimutal. A presença do campo magnético desdobra as frequências de ressonâncias em modos girantes no sentido horário (ω_+) e anti-horário (ω_-).

Os modos dipolares caracterizam as duas autofrequências mais baixas. Em contrapartida, são os modos em que a contribuição da parte imaginária é maior. Para estes, as figuras da Tabela 4 demonstram claramente que a densidade de corrente superficial J_s é bem distribuída ao longo do disco. Para modos de ordem superior, esta tende a se acumular perto das bordas, tal como a

distribuição do campo elétrico, e assemelha-se a essas ordens multipolares superiores confinadas ao disco de grafeno 2D.

A Tabela 5 contém, comparativamente, os valores de autofrequências para os campos de 1 T a 3 T de forma aproximada.

Modos		1T	2T	3T
Dipolo	ω_-	(5,105 + 0,346i) THz	(4,970 + 0,336i) THz	(4,841 + 0,326i) THz
	ω_+	(5,390 + 0,367i) THz	(5,541 + 0,377i) THz	(5,698 + 0,386i) THz
Quadrupolo	ω_-	(7,550 + 0,080i) THz	(7,099 + 0,075i) THz	(6,977 + 0,074i) THz
	ω_+	(7,215 + 0,076i) THz	(7,679 + 0,008i) THz	(7,822 + 0,084i) THz
Hexapolo	ω_-	(8,707 + 0,079i) THz	(8,577 + 0,077i) THz	(8,451 + 0,075i) THz
	ω_+	(8,987 + 0,086i) THz	(9,140 + 0,091i) THz	(9,308 + 0,100i) THz
Simetria azimutal		(9,768 + 0,089i) THz	(9,793 + 0,091i) THz	(9,838 + 0,098i) THz

Tabela 5 – Autofrequências de ressonância dos modos com campo $\mathbf{B} \neq 0$. A presença do campo magnético gera um desdobramento das frequências no sentido horário (ω_+) e anti-horário (ω_-).

Esse efeito em um único disco circular de grafeno sob ação de um campo magnético estático ocorre graças às ressonâncias originadas do movimento ciclotrônico da trajetória do elétron, e se divide em dois ramos correspondentes a diferentes rotações de corrente de borda em relação ao campo magnético.

Na Figura 19 percebe-se que, para o caso onde o campo magnético é nulo, não há separação das frequências ω_+ e ω_- . Em contrapartida quando o campo magnético é aumentado gradativamente, essa separação pode ser identificada.

Os modos que giram no sentido anti-horário (ω_-) mostram uma redução na frequência de ressonância e no setor imaginário à medida que o campo magnético é aumentado. Por outro lado, modos que rotacionam no sentido horário (ω_+) apresentam aumento na frequência real de ressonância bem como na parte imaginária da autofrequência complexa com o aumento do campo magnético DC. O modo de simetria azimutal não demonstra dependência com o campo magnético de forma a se manter sempre próximo à mesma frequência em um comportamento constante.

Observamos em outros resultados paralelos que, para campos magnéticos próximo de 5 T, as frequências começam a apresentar superposição de modos (por exemplo, ω_{+q} e ω_{-h}), de forma que o afastamento mais desejável deva ocorrer entre o intervalo de 0 T a 3 T, como elencado.

Devido à influência da magnetização na luz transmitida ou refletida pode-se investigar efeitos magneto-ópticos (MO). O primeiro efeito MO foi observado em 1845 pelo físico Michael Faraday, onde a luz polarizada linearmente adentrava um material vítreo que era alimentado por um campo magnético e saía com seu plano de polarização girado, caracterizando o efeito

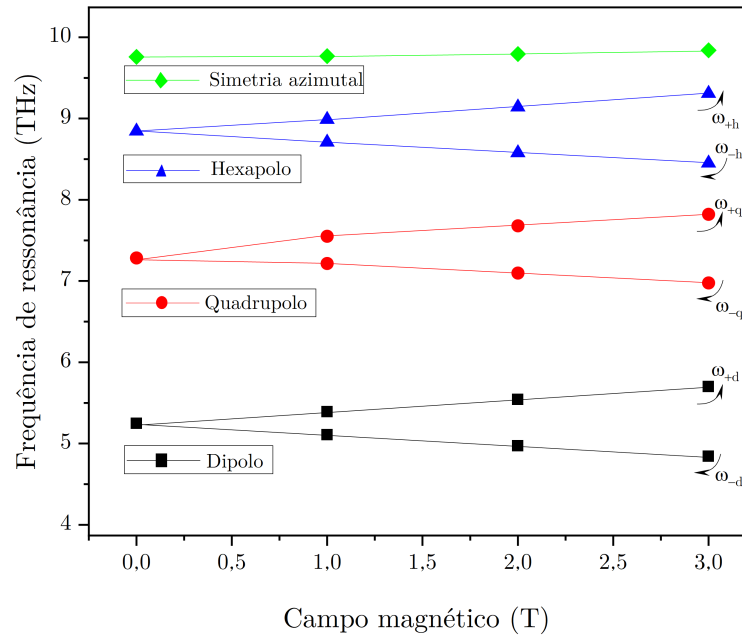


Figura 19 – Gráfico de desdobramento no regime sem excitação indicando a divisão de frequências ω_+ e ω_- dos modos observados em função do campo magnético.

Faraday. Em outras palavras, é a mudança no plano de polarização da onda transmitida em relação à incidente quando esta passa por um meio magnetizado - resultando numa rotação em tal plano.

Combinados às ressonâncias do próprio grafeno, esse efeito óptico têm mostrado uma quantidade considerável de rotação de Faraday para intensidades consideravelmente baixas de campo em frequências altas, o que é preferível para dispositivos integrados. Esse giro é relevante para características não recíprocas em vários dispositivos como isoladores, circuladores, deslocadores de fase e rotadores de Faraday.

4.1.2 Análise com onda plana incidente

Na segunda análise, quer-se excitar a estrutura através de uma onda plana incidente normalmente à superfície do disco. Tendo a porta 1 (superior) e 2 (inferior), ao excitar a estrutura, a onda incidente atravessa o disco de grafeno de forma a chegar na porta 2. Matematicamente, nesse momento obtém-se o resultado do parâmetro S_{21} associado à transmissão direta (da porta 1 para a porta 2) em função da frequência. Os parâmetros de dispersão descrevem as relações de entrada-saída entre portas.

Para este regime, foi observado que nem todos os modos podem existir por simples incidência de onda plana de maneira que os picos mínimos referentes a esses modos não estão presentes no disco de grafeno completo. O que ocorre é que, de fato, não é possível acoplar um

feixe eletromagnético incidente aos GSPPs devido a uma incompatibilidade entre o momento da radiação incidente e o momento dos mesmos (6).

Para certa frequência um fóton no espaço livre possui momento menor que um SPP visto que possuem diferentes relações de dispersão. No entanto, para que um fóton excite um SPP ambos devem possuir a mesma frequência e momento. É dessa incompatibilidade que se justifica o fato de que um fóton no espaço livre não acopla-se a um SPP.

A existência e a capacidade de ajuste de plasmons localizados em arranjos de discos de grafeno foram demonstradas em muitos experimentos, nos quais as ressonâncias de plasmons dipolares foram excitadas usando ondas planas (6).

O espectro de excitações plasmônicas suportadas por um disco de grafeno contém diversas ressonâncias multipolares. Dentre elas, as ressonâncias de dipolo que mostram-se ser mais facilmente excitadas por meio de ondas planas, nas quais as cargas oscilam em resposta ao campo eletromagnético.

O aparecimento dos modos no regime de excitação é puramente dependente da geometria da estrutura; em particular, não depende nem da resposta óptica do sistema, como, por exemplo, a condutividade de forma que esta apenas medeia as frequências nas quais as excitações ocorrem.

Assim, um exemplo para a excitação de SPPs por luz incidente sobre uma superfície de grafeno reside em adicionar um defeito com as dimensões preferíveis e características na superfície. Quando a luz incide sobre um defeito, seja no grafeno ou em uma superfície metálica, a excitação de SPPs torna-se possível induzindo alterações neste espectro.

4.1.2.1 Sem fenda no disco de grafeno

Incidindo uma onda plana normal à superfície do arranjo, observa-se a resposta do sistema à essa excitação apenas para os modos de dipolo, independentemente do valor do campo magnético aplicado. A Figura 20 ilustra os mínimos de transmissão obtidos e suas respectivas frequências.

Na ausência de campo magnético externo, visualiza-se um único pico de transmissão próximo à frequência central de $\omega_{0d} = 5,2$ THz. Aumentando o campo para 1 T, o pico do dipolo desdobra-se em dois, indicando o aparecimento da rotação característica proveniente da magnetização. Pode-se verificar que há um deslocamento das frequências à esquerda e à direita se comparado ao pico do dipolo na ausência de campo magnético, indicando as frequências $\omega_{-d} = 5,1$ THz e $\omega_{+d} = 5,3$ THz. O mesmo segue-se para o aumento do campo em 2 T e 3 T, com duplos picos de ressonância afastando-se da frequência central com diminuição para os picos no sentido anti-horário e aumento para os picos no sentido horário. Esses últimos, aumentando de acordo com o campo magnético, também apresentam aumento gradativo no coeficiente de transmissão.

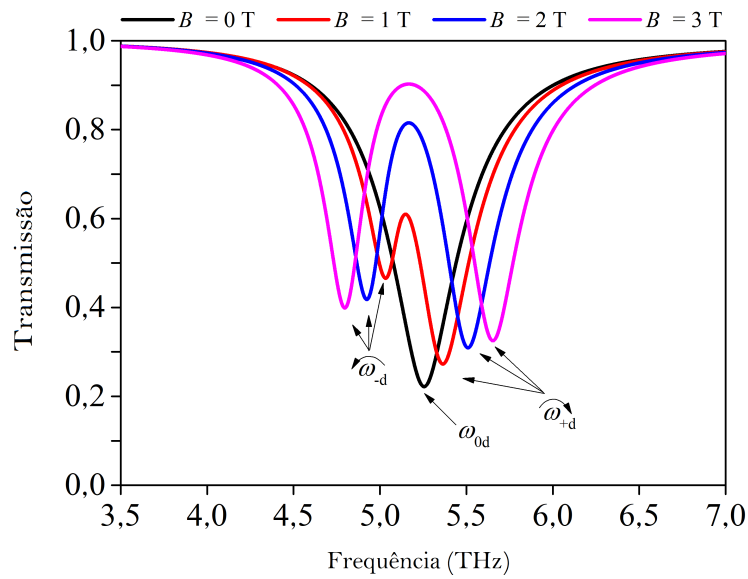


Figura 20 – Gráfico de transmissão no regime de excitação indicando a divisão de frequências ω_+ e ω_- do modo dipolo em função da frequência.

4.1.2.2 Com fenda no disco de grafeno

Neste problema, considerou-se como defeito uma fenda retangular (corte) partindo da borda até cerca de $1/5$ do raio original do disco de grafeno com lados $L_x = 10$ nm e $L_y = 550$ nm. O gráfico da Figura 21 ilustra a transmissão em função da frequência com os picos de ressonância do dipolo (ω_d), quadrupolo (ω_q) e hexapolo (ω_h) na ausência de campo magnético externo.

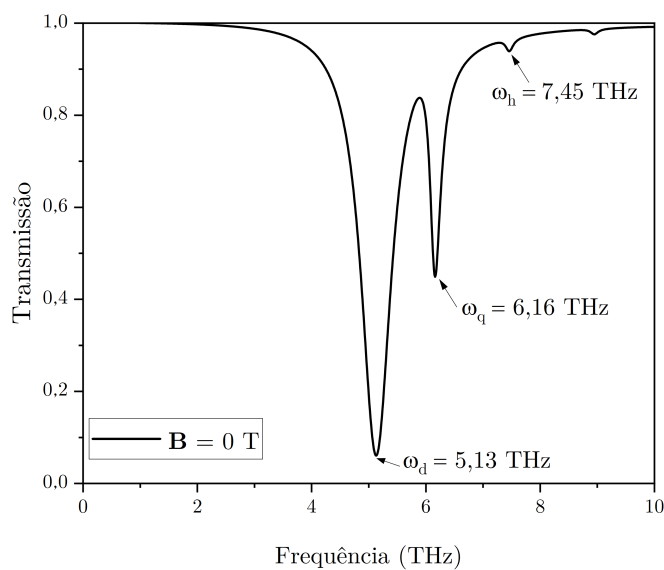


Figura 21 – Gráfico de transmissão para $\mathbf{B} = 0$ T no regime de excitação com a presença da fenda $L_x \times L_y$ no disco de grafeno indicando o aparecimento dos modos quadrupolo e hexapolo com as respectivas frequências de ressonância ω_q e ω_h , além do dipolo.

De fato, como esperado, a inserção do defeito estrutural no grafeno promoveu a excitação dos modos que não foram observados para a configuração do ressonador sem fenda. A Tabela 6 ilustra a forma dos modos indicados no gráfico da Figura 21.

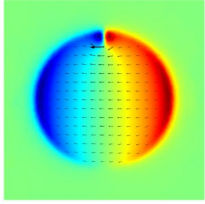
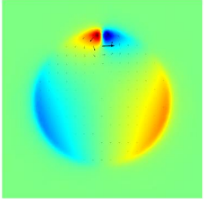
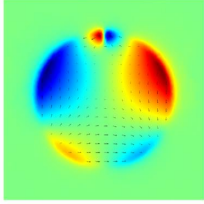
Excitação com onda plana – com corte		
Dipolo	Quadrupolo	Hexapolo
		
$\omega_d = 5,13$ THz	$\omega_q = 6,16$ THz	$\omega_h = 7,45$ THz

Tabela 6 – Modos respectivos das frequências ω_d , ω_q e ω_h no regime de excitação com corte no disco de grafeno para $\mathbf{B} = 0$ T.

Tal como no caso do disco completo, a fenda na ausência de campo magnético não influencia no desdobramento das frequências de ressonâncias que apresentam picos únicos para cada modo. O modo de simetria azimutal, não foi observado, de forma que o último pico não especificado na Figura 6 é identificado como um octopolo.

Comparando com a configuração sem fenda, esta apresenta as frequências de ressonâncias em valores menores de forma que os modos dipolo, quadrupolo e hexapolo foram obtidos para frequências anteriores àquelas naturais mostradas no regime de autofrequências.

Com a presença do campo magnético, pode-se observar novamente o desdobramento das frequências no sentido horário e anti-horário como mostra a Figura 22.

Observa-se que, para o campo de 1 T (Figura 22a) não há desdobramento suficientemente aparente das frequências de ressonância, mantendo-se apenas a rotação no sentido horário proveniente da presença do campo magnético. O modo dipolo (ω_{+d}), naturalmente, apresenta um pico mais acentuado para 5,1 THz. O quadrupolo (ω_{+q}) novamente apresenta seu pico em 6,16 THz e o hexapolo (ω_{+h}) configura-se a partir de 7,34 THz.

Com o campo de 2 T, identifica-se mais enfatizado o desdobramento dos modos girantes iniciando com os dipolos no sentido horário em 4,97 THz e anti-horário a partir de 5,26 THz - este último destacado como uma curva suave na Figura 22b. Sem mostrar aumento ou diminuição na frequência, o modo quadrupolo mantém-se em 6,16 THz. O hexapolo que rotaciona no sentido horário mostra-se em 7,22 THz, anterior ao mesmo modo para o caso de 1 T, enquanto no sentido anti-horário apresenta aumento de frequência em uma curva bastante suave para 7,7 THz,

Para $\mathbf{B} = 3$ T percebe-se um desdobramento mais nítido dos modos ressonantes, bem como o sentido horário e anti-horário dos mesmos. O modo dipolo a girar no sentido horário

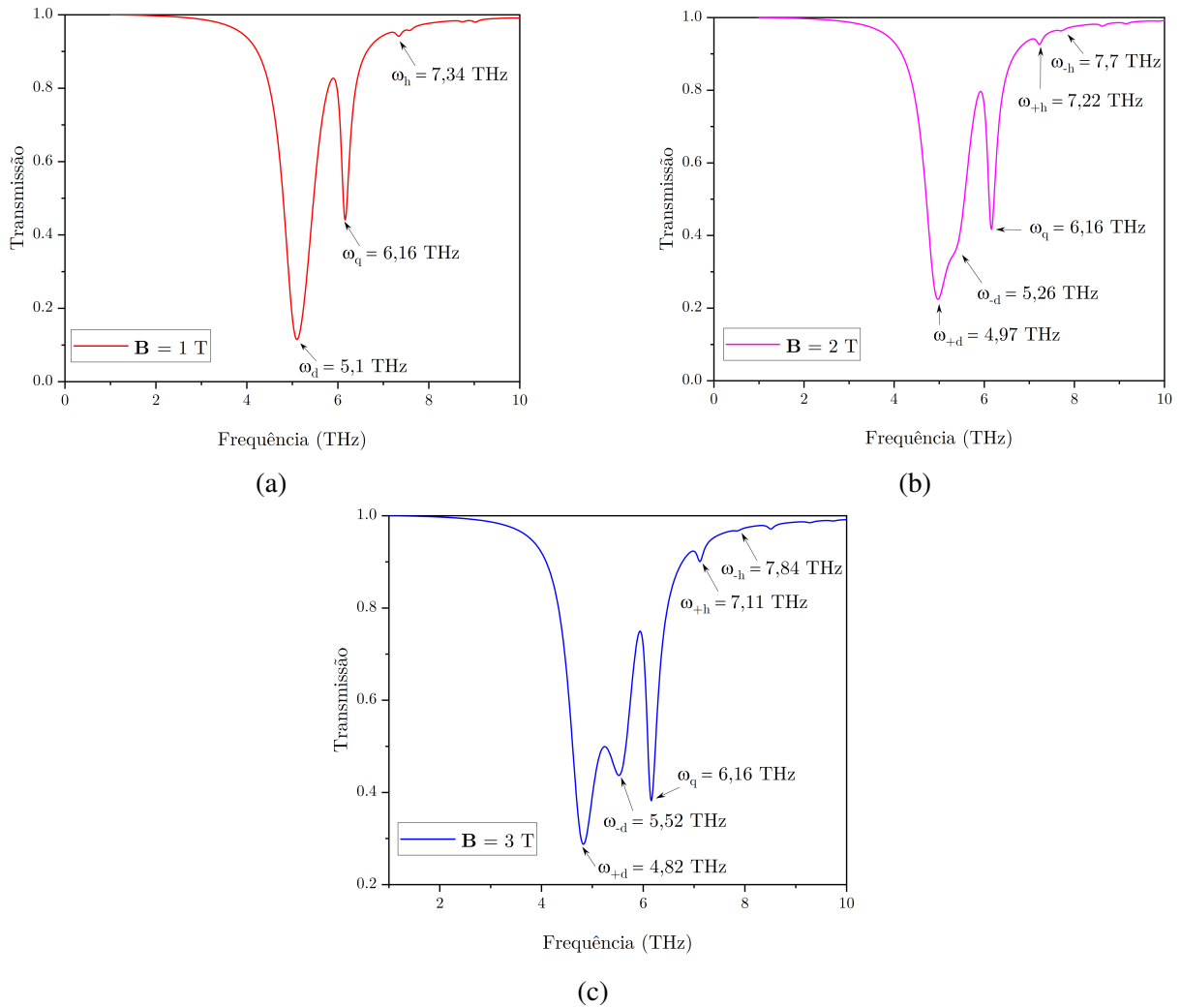


Figura 22 – Espectro de transmissão em função da frequência para o disco com fenda sob (a) $\mathbf{B} = 1$ T, (b) $\mathbf{B} = 2$ T e (c) $\mathbf{B} = 3$ T.

(ω_{+d}) apresenta pico de ressonância em 4,82 THz, anterior aos outros com campos inferiores. O modo quadrupolo, que mostrou-se mais difícil de excitar e apresentar desdobramentos por rotação, apresentou pico de ressonância ainda em 6,16 THz mais proeminente que nos casos precedentes - com inversão dos polos de intensidade de campo elétrico. O modo hexapolo manifesta rotação no sentido horário (ω_{+h}) em 7,11 THz, frequência mais baixa que para os casos anteriores, e em 7,84 THz no sentido anti-horário (ω_{-h}) - frequência essa maior se comparada com esse mesmo modo para os outros valores campo magnético.

As imagens dos modos correspondentes estão contidas na Tabela 7.

Num quadro geral, pode-se observar que há uma mudança nos níveis de transmissão e nas frequências de ressonância que são deslocadas para valores menores, nos casos de rotação no sentido horário, ou maiores, para os casos de rotação no sentido anti-horário.

Em suma, o modo dipolo não apresentou resistência à excitação por onda plana incidente, de forma que apareceu no estudo de transmissão sem a inserção da fenda no disco de grafeno. Os

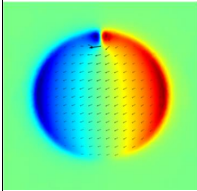
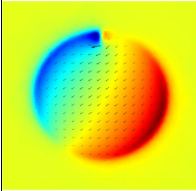
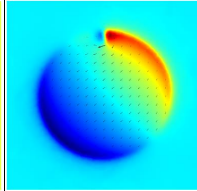
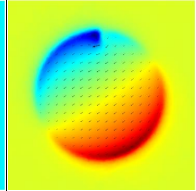
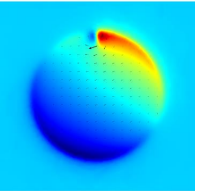
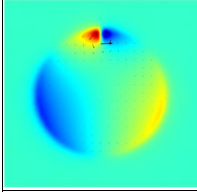
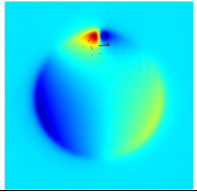
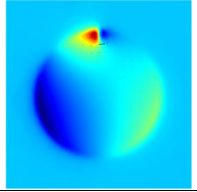
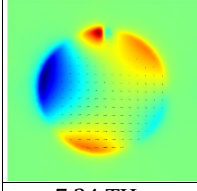
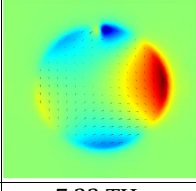
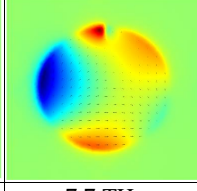
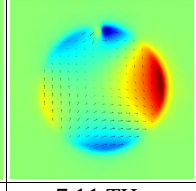
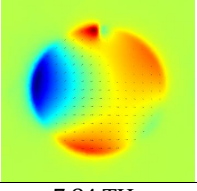
Modos	Excitação com onda plana – com corte				
	B = 1 T	B = 2 T		B = 3 T	
		ω_+	ω_-	ω_+	ω_-
Dipolo					
	5,1 THz	4,97 THz	5,26 THz	4,82 THz	5,52 THz
Quadrupolo					
	6,16 THz	6,16 THz		6,16 THz	
Hexapolo					
	7,34 THz	7,22 THz	7,7 THz	7,11 THz	7,84 THz

Tabela 7 – Modos respectivos das frequências ω_d , ω_q e ω_h no regime de excitação com fenda no disco de grafeno com campo magnético $\mathbf{B} \neq 0$.

modos superiores, ao contrário, não apresentaram pico de transmissão. Sendo assim, o defeito estrutural precisou ser inserido como alternativa para excitação. Trabalhos anteriores mostram o acoplamento da onda incidente com prismas, configuração do tipo Otto, acoplamento de rede, defeitos em formato de sulcos ou grades e outros (6, 49, 50, 51). No entanto, um terreno pouco explorado na literatura é a investigação da excitação de modos superiores ao dipolo, tidos como modos escuros por apresentarem maior dificuldade para tal.

Assim, a investigação acerca dos modos ressonantes no arranjo de grafeno cumpre seu objetivo identificando os automodos naturais visualizados no estudo de autofrequências e ratificando a dificuldade de se excitar modos superiores ao dipolo no regime de incidência de onda plana normal sobre o arranjo. Para tal, um simples corte sutil, caracterizando uma fenda, foi incrementado na superfície do disco de forma a ter sido consideravelmente suficiente para explicitar os modos quadrupolo e hexapolo anteriormente ausentes no mesmo regime para o disco completo.

5 Conclusão

Neste trabalho de análise, investigamos as ressonâncias eletromagnéticas dos modos ressonantes em discos de grafeno de raio $3\mu\text{m}$ dispostos em um arranjo periódico no espaço livre. O material em questão foi escolhido por ser uma excelente alternativa para aplicações plasmônicas sendo identificado como uma monocamada em rede hexagonal atômica espessa que lhe caracteriza como primeiro material bidimensional já isolado e possuidor de propriedades mecânicas, ópticas e eletrônicas únicas. Em cálculos numéricos, pode-se bem expressar sua condutividade como a soma do termo intrabanda e interbanda. No entanto, o termo interbanda não gera contribuição na região espectral de terahertz, faixa de frequência investigada.

Utilizando o software COMSOL Multiphysics, abordou-se numericamente dois regimes de estudos complementares: autofrequências e de excitação com onda plana. O primeiro fornece a forma dos modos ressonantes naturais da estrutura e suas respectivas frequências. O segundo incide no sistema uma excitação normal através de uma onda plana. Naturalmente, o grafeno mostrou suportar modos diversos de dipolos a dodecapolos. Uma análise da distribuição do campo elétrico da componente E_z , mostra que as ondas SPP no grafeno excitam no ressonador circular o modo com rotação no sentido horário e anti-horário com frequências ω_+ e ω_- , respectivamente. Tal fato é evidenciado no desdobramento e distanciamento das frequências de ressonância, devido ao acréscimo do campo magnético aplicado variando de 0 T a 3 T. Esse tipo de rotação característica a partir da magnetização permite estudar efeitos magneto-ópticos, em especial o efeito de Faraday.

No entanto, como já explorado na literatura, nem todos os esses modos plasmônicos podem ser excitados pela luz externa devido às questões cinemáticas e restrições de simetria. Dessa forma, no disco de grafeno sob excitação, verificou-se que apenas o modo simétrico (modo claro) pode ser excitado, a saber o modo dipolo. Sendo assim, foi sugerido e confirmado por simulações numéricas que a inserção de um corte sutil no disco de grafeno promove a excitação de modos superiores, sem a necessidade de acoplamento por prisma e afins, como comumente explorado.

Para isso, dispomos de outra configuração no disco para contornar esse problema de excitação que foi a introdução de um defeito estrutural na forma de corte em fenda retangular em um dos eixos ao longo do raio do disco. Assim, os modos escuros puderam ser eficientemente excitados devido à quebra de simetria. Ao introduzir esse defeito, os modos ressonantes de quadrupolo e hexapolo, que não foram identificados no disco inteiro sob esse mesmo regime, puderam ser excitados.

Tais resultados numéricos obtidos através das simulações computacionais são destacados em termos do parâmetro S , especificamente S_{21} , que diz respeito à transmissão da porta 1 para

a porta 2 no arranjo, além do desdobramento de frequências em termos do campo magnético aplicado. Os modos escuros plasmônicos reais do grafeno raramente foram relatados, apesar de possuírem aplicações potenciais no desenvolvimento de dispositivos optoeletrônicos baseados em grafeno devido à sua perda óptica muito menor em comparação com os modos dipolares de grafeno (52).

Dessa forma, percebe-se que o mecanismo de acrescentar um defeito na estrutura do disco original de grafeno mostra-se uma alternativa simples e eficaz para promover a excitação dos modos ressonantes outrora faltantes no regime de incidência de onda plana para o caso em que não há fenda na superfície do grafeno, onde apenas o dipolo fora observado. A possibilidade de otimização deste trabalho verte-se na investigação de outros parâmetros como a variação da posição e tamanho do defeito a fim de manter próximos os mesmos níveis dos modos dipolo e quadrupolo almejando aplicações como divisores de sinal ou filtro de banda dupla, por exemplo.

Trabalhos futuros

A estudante foi aprovada para o Doutorado pelo Programa de Pós-Graduação em Engenharia Elétrica (PPGEE) da Universidade Federal do Pará (UFPA), de forma a dar continuidade à pesquisa iniciada no mestrado. Como proposta para trabalhos futuros é sugerido:

- Continuar a investigação acerca da excitação dos modos ressonantes variando a posição, parâmetros dimensionais e quantidade de defeitos no disco de grafeno;
- Acrescentar um substrato dielétrico de espessura h ;
- Verificar o comportamento do sistema grafeno/dielétrico sob variação de parâmetros como o potencial químico e espessura;
- Investigar outras geometrias como o quadrado sob o mesmo estudo;
- Confrontar os resultados numéricos com abordagem analítica;
- Propor um dispositivo para aplicações em telecomunicações.

Publicações durante o mestrado

- Apresentação e publicação de resumo online na Conferência Internacional de Pesquisa Científica Silk Road (Silk Road International Scientific Research Conference) realizada na Universidade Estadual de Lankaran, Azerbaijão, no dia 9 de dezembro de 2022 (53).

Referências

- 1 TERAHERTZ Optoelectronics Research Group. <<https://terahertzoptoelectronics.org/>>. Acesso em: 09-01-2023. Citado 2 vezes nas páginas 17 e 31.
- 2 WONG, H.-S. P.; AKINWANDE, D. *Carbon nanotube and graphene device physics*. [S.l.]: Cambridge University Press, 2011. Citado 7 vezes nas páginas 17, 32, 34, 35, 38, 39 e 41.
- 3 HYBRIDIZATION: Flexibility at its best. <<http://www.chemistryland.com/CHM151S/09-CovalentBonds/Covalent.html>>. Acesso em: 22-08-2022. Citado 2 vezes nas páginas 17 e 37.
- 4 HERVÁS, R. G. et al. Aproximación continua al grafeno. 2016. Citado 2 vezes nas páginas 17 e 40.
- 5 GRAPHENE Physics. <<http://park.itc.u-tokyo.ac.jp/nagaosa-lab/ezawa/abstracts.html>>. Acesso em: 25-04-2022. Citado 2 vezes nas páginas 17 e 42.
- 6 GONÇALVES, P. A. D.; PERES, N. M. *An introduction to graphene plasmonics*. [S.l.]: World Scientific, 2016. Citado 11 vezes nas páginas 17, 27, 32, 34, 43, 44, 46, 49, 50, 66 e 70.
- 7 SOUNAS, D. L.; CALOZ, C. Gyrotropy and nonreciprocity of graphene for microwave applications. *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques*, IEEE, v. 60, n. 4, p. 901–914, 2012. Citado 3 vezes nas páginas 17, 28 e 45.
- 8 DAS, G. et al. Plasmonic nanostructures for the ultrasensitive detection of biomolecules. *La Rivista del Nuovo Cimento*, Springer, v. 39, p. 547–586, 2016. Citado 3 vezes nas páginas 17, 48 e 49.
- 9 GRAPHENE-BASED nano-antennas may enable networks of tiny machines. <<https://phys.org/news/2013-12-graphene-based-nano-antennas-enable-networks-tiny.html>>. Acesso em: 24-11-2022. Citado 2 vezes nas páginas 17 e 50.
- 10 DOLATABADY, A.; GRANPAYEH, N. Manipulation of the faraday rotation by graphene metasurfaces. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, Elsevier, v. 469, p. 231–235, 2019. Citado na página 27.
- 11 CRASSEY, I. et al. Giant faraday rotation in single-and multilayer graphene. *Nature Physics*, Nature Publishing Group, v. 7, n. 1, p. 48–51, 2011. Citado na página 27.
- 12 ROUMI, B.; ABDI-GHALEH, R. Polar magneto-optical kerr effect of reflected light from graphene/inas/graphene/polyimide/al structure. *Superlattices and Microstructures*, Elsevier, v. 158, p. 107021, 2021. Citado 2 vezes nas páginas 27 e 46.
- 13 LIU, J. Q. et al. Giant faraday rotation in graphene metamolecules due to plasmonic coupling. *Journal of Lightwave Technology*, IEEE, v. 36, n. 13, p. 2606–2610, 2018. Citado na página 27.
- 14 LIU, J. et al. Enhanced magnetic circular dichroism by subradiant plasmonic mode in symmetric graphene oligomers at low static magnetic fields. *Optics Express*, Optical Society of America, v. 27, n. 2, p. 567–575, 2019. Citado 2 vezes nas páginas 27 e 28.

- 15 DAI, Y. et al. Symmetry breaking induced excitations of dark plasmonic modes in multilayer graphene ribbons. *Optics Express*, Optica Publishing Group, v. 24, n. 18, p. 20021–20028, 2016. Citado na página 28.
- 16 DMITRIEV, V. et al. Flat metasurfaces with square supercells of dielectric disk quadrumers: tailoring the fine structure of toroidal mode local field. *Journal of Physics D: Applied Physics*, IOP Publishing, v. 55, n. 20, p. 205104, 2022. Citado 2 vezes nas páginas 28 e 50.
- 17 SIEGEL, P. H. Terahertz technology. *IEEE Transactions on microwave theory and techniques*, IEEE, v. 50, n. 3, p. 910–928, 2002. Citado na página 31.
- 18 ROSTAMI, A.; RASOOLI, H.; BAGHBAN, H. *Terahertz technology: fundamentals and applications*. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2010. v. 77. Citado na página 31.
- 19 BANDURIN, D. A. et al. Resonant terahertz detection using graphene plasmons. *Nature communications*, Nature Publishing Group, v. 9, n. 1, p. 1–8, 2018. Citado na página 31.
- 20 SENSALE-RODRIGUEZ, B. et al. Broadband graphene terahertz modulators enabled by intraband transitions. *Nature communications*, Nature Publishing Group, v. 3, n. 1, p. 1–7, 2012. Citado na página 31.
- 21 FRANCO, M.; CRUZ, A. *Technologia terahertz: Avanços e potenciais aplicações-uma revisão*. 2018. Citado na página 31.
- 22 POUMIROL, J.-M. et al. Electrically controlled terahertz magneto-optical phenomena in continuous and patterned graphene. *Nature communications*, Nature Publishing Group, v. 8, n. 1, p. 1–6, 2017. Citado na página 32.
- 23 LIANG, G. et al. Integrated terahertz graphene modulator with 100% modulation depth. *ACS photonics*, ACS Publications, v. 2, n. 11, p. 1559–1566, 2015. Citado na página 32.
- 24 VISNOVSKY, S.; THOMPSON, B. J. *Optics in magnetic multilayers and nanostructures*. [S.l.]: Crc Press, 2018. Citado na página 32.
- 25 SZUNERITS, S.; BOUKHERROUB, R. *Introduction to plasmonics: advances and applications*. CRC Press, 2015. Citado 2 vezes nas páginas 35 e 50.
- 26 NOVOSELOV, K. S. et al. Electric field effect in atomically thin carbon films. *science*, American Association for the Advancement of Science, v. 306, n. 5696, p. 666–669, 2004. Citado na página 35.
- 27 KOKARNESWARAN, M. et al. Discovery of carbon nanotubes in sixth century bc potteries from keeladi, india. *Scientific Reports*, Nature Publishing Group, v. 10, n. 1, p. 1–6, 2020. Citado na página 36.
- 28 REIBOLD, M. et al. Carbon nanotubes in an ancient damascus sabre. *Nature*, Nature Publishing Group, v. 444, n. 7117, p. 286–286, 2006. Citado na página 36.
- 29 NETO, A. C.; GUINEA, F.; PERES, N. M. Drawing conclusions from graphene. *Physics world*, IOP Publishing, v. 19, n. 11, p. 33, 2006. Citado na página 37.
- 30 DARTORA, C.; JIMENEZ, M. J. S.; ZANELLA, F. Os fundamentos da física dos férmions de dirac sem massa em (1+ 2)-d e o grafeno. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, SciELO Brasil, v. 37, p. 3301–1, 2015. Citado 2 vezes nas páginas 38 e 41.

- 31 SANTOS, J. M. L. dos. O grafeno. *Revista de Ciência Elementar*, Casa das Ciências, v. 2, n. 2, 2014. Citado na página 41.
- 32 ASHCROFT, N. W.; MERMIN, N. D. Solid state physics (brooks cole, 1976). *Cited on*, v. 26, 1993. Citado na página 44.
- 33 BLUDOV, Y. V. et al. A primer on surface plasmon-polaritons in graphene. *International Journal of Modern Physics B*, World Scientific, v. 27, n. 10, p. 1341001, 2013. Citado na página 45.
- 34 SOUNAS, D. L.; CALOZ, C. Gyrotropy and nonreciprocity of graphene for microwave applications. *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques*, IEEE, v. 60, n. 4, p. 901–914, 2012. Citado 2 vezes nas páginas 45 e 46.
- 35 WOOD, R. W. Xlii. on a remarkable case of uneven distribution of light in a diffraction grating spectrum. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, Taylor & Francis, v. 4, n. 21, p. 396–402, 1902. Citado na página 47.
- 36 FANO, U. Zur theorie der intensitätsanomalien der beugung. *Annalen der Physik*, Wiley Online Library, v. 424, n. 5, p. 393–443, 1938. Citado na página 47.
- 37 CROOKES, W. On radiant matter; a lecture delivered to the british association for the advancement of science, at sheffield, friday, august 22, 1879. *American Journal of Science*, American Journal of Science, v. 3, n. 106, p. 241–262, 1879. Citado na página 47.
- 38 LUO, X. et al. Plasmons in graphene: recent progress and applications. *Materials Science and Engineering: R: Reports*, Elsevier, v. 74, n. 11, p. 351–376, 2013. Citado na página 48.
- 39 FREESTONE, I. et al. The lycurgus cup—a roman nanotechnology. *Gold bulletin*, Springer, v. 40, p. 270–277, 2007. Citado na página 48.
- 40 HAES, A. et al. Using solution-phase nanoparticles, surface-confined nanoparticle arrays and single nanoparticles as biological sensing platforms. *Journal of fluorescence*, v. 14, p. 355–67, 08 2004. Citado na página 48.
- 41 WU, Y.; WU, W.; DAI, X. Spps in a double layer graphene system with an anisotropic dielectric. *Results in Physics*, Elsevier, v. 15, p. 102718, 2019. Citado 2 vezes nas páginas 49 e 50.
- 42 CUI, L.; WANG, J.; SUN, M. Graphene plasmon for optoelectronics. *Reviews in Physics*, Elsevier, v. 6, p. 100054, 2021. Citado na página 50.
- 43 BI, Y. et al. Magnetically controllable metasurface and its application. *Frontiers of Optoelectronics*, Springer, v. 14, n. 2, p. 154–169, 2021. Citado na página 50.
- 44 BLUDOV, Y. V. et al. A primer on surface plasmon-polaritons in graphene. *International Journal of Modern Physics B*, World Scientific, v. 27, n. 10, p. 1341001, 2013. Citado na página 50.
- 45 BLUDOV, Y. V. et al. Hybrid plasmon-magnon polaritons in graphene-antiferromagnet heterostructures. *2D Materials*, IOP Publishing, v. 6, n. 4, p. 045003, 2019. Citado na página 51.
- 46 MULTIPHYSICS, C. Introduction to comsol multiphysics®. *COMSOL Multiphysics*, Burlington, MA, accessed Feb, v. 9, n. 2018, p. 32, 1998. Citado na página 54.

-
- 47 JOHNSON, D. Graphene paves the way for next-generation plasmonics. *COMSOL*. Citado na página 55.
- 48 JIAO, N. et al. Shape effects on graphene magnetoplasmons. *Physical Review B*, APS, v. 99, n. 19, p. 195447, 2019. Citado na página 63.
- 49 JU, L. et al. Graphene plasmonics for tunable terahertz metamaterials. *Nature nanotechnology*, Nature Publishing Group UK London, v. 6, n. 10, p. 630–634, 2011. Citado na página 70.
- 50 PERES, N. et al. Exact solution for square-wave grating covered with graphene: surface plasmon-polaritons in the terahertz range. *Journal of Physics: Condensed Matter*, IOP Publishing, v. 25, n. 12, p. 125303, 2013. Citado na página 70.
- 51 GAO, W. et al. Excitation of plasmonic waves in graphene by guided-mode resonances. *ACS nano*, ACS Publications, v. 6, n. 9, p. 7806–7813, 2012. Citado na página 70.
- 52 ZHU, Q. et al. Tunable graphene quadrupole dark mode based ultranarrow fano resonance in asymmetric hybrid metamaterial. *Optics Communications*, Elsevier, v. 510, p. 127927, 2022. Citado na página 72.
- 53 SILVA, A. E.; OLIVEIRA, C. B.; DMITRIEV, V. Analysis of magnetized graphene disk electromagnetic resonances. *Silk Road International Scientific Research Conference*, IKSAD Publishing House Authors, ISBN: 978-625-7898-68-3, p. 296–297, 2022. Citado na página 72.
-