

# Simulação de Sensores Plasmônicos em Terahertz Baseados em Grafeno pelo Método dos Elementos Finitos

Rodolfo Fernandes Ramalho de Oliveira Torres e Karlo Queiroz da Costa

**Resumo**—Este trabalho aborda a modelagem de sensores plasmônicos de grafeno por elementos finitos. O estudo é realizado com sensor na configuração *Surface Plasmon-Coupled Emission* (SPCE), em que os campos próximos e os diagramas de radiação são analisados em função da permissividade do sensor Ar/Grafeno/SiO<sub>2</sub>. No material do Ar, um dipolo infinitesimal Hertziano é colocado em diferentes alturas  $h_{dip}$  a fim de concluir as condições de excitação das ondas plasmônicas na camada de Grafeno e verificar a possibilidade de desenvolver sensores plasmônicos de terahertz baseado neste material.

**Palavras-Chave**—Sensores Plasmônicos, Grafeno, Método dos Elementos Finitos

**Abstract**—This paper addresses the modeling of graphene plasmonic sensors using the finite element method. The study is conducted with the sensor in the Surface Plasmon-Coupled Emission (SPCE) configuration, where the near fields and radiation patterns are analyzed as a function of the sensor's Air/Graphene/SiO<sub>2</sub> permittivity. In the Air material, an infinitesimal Hertzian dipole is placed at different heights  $h_{dip}$  in order to determine the conditions for the excitation of plasmonic waves in the graphene layer and to assess the feasibility of developing terahertz plasmonic sensors based on this material.

**Keywords**—Plasmonic Sensors, Graphene, Finite Element Method

## I. INTRODUÇÃO

A área de sensores plasmônicos e suas aplicações em detecção molecular tem sido objeto de intensa investigação. Estes sensores exploram ondas plasmônicas geradas pela excitação de metais em frequências ópticas, com estudos dedicados à caracterização dos Surface Plasmon Polariton (SPP) em interfaces metal/dielétrico [4].

Na busca por alternativas viáveis para contornar desafios em dispositivos plasmônicos, destaca-se o grafeno, com suas propriedades excepcionais de baixas perdas e suporte a ondas plasmônicas, especialmente na faixa de Terahertz [2]. A configuração de sensores de ressonância plasmônica superficial (SPR) em conjunto com a integração do grafeno promete melhorar sensibilidade e seletividade dos dispositivos, impulsionando avanços em detecção molecular [1]-[3].

O presente trabalho apresenta simulações de sensores plasmônicos em Terahertz baseados em grafeno pelo método dos elementos finitos.

Rodolfo Fernandes Ramalho de Oliveira Torres, Faculdade de Engenharia Elétrica e Biomédica, Universidade Federal do Pará, Belém-PA, e-mail: rodolfo.torres@itec.ufpa.br; Karlo Queiroz da Costa, Faculdade de Engenharia Elétrica e Biomédica, Universidade Federal do Pará, Belém-PA, e-mail: karlo@ufpa.br. Este trabalho foi parcialmente financiado por PIBIC.

## II. GEOMETRIA E MODELAGEM

A Fig. 1 mostra o modelo da geometria do sensor, com o Dielétrico 1 sendo o Ar ( $\epsilon_1 \approx 1$ ), o Dielétrico 2 o Dióxido de Silício (SiO<sub>2</sub>) ( $\epsilon_2 \approx 2.13$ ) e a superfície planar como a Camada de Grafeno.

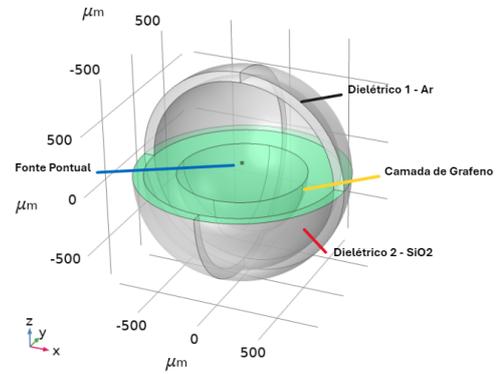


Fig. 1. Modelo da geometria do sensor plasmônico.

Para a modelagem numérica do sensor SPR, foi crucial estabelecer parâmetros como o potencial químico ( $\mu_c$ ) e o comprimento de onda mínimo do grafeno ( $\lambda_{min}$ ) [1], além do dipolo Hertziano [5] fundamentais para a análise do seu comportamento sob diferentes condições [2]. A Tabela I resume esses parâmetros, fornecendo uma base para a interpretação dos resultados obtidos durante a simulação.

TABELA I

DEFINIÇÃO DOS PARÂMETROS UTILIZADOS NO SENSOR SPR

Parâmetro	Valor	Descrição
$\mu_c$	0.5 eV	Potencial Químico
$\tau$	$1 \times 10^{-12}$ s	Tempo de Acomodação
$T$	300 K	Temperatura
$k_B$	$1.3806 \times 10^{-23}$ J/K	Constante de Boltzmann
$\hbar$	$1.0546 \times 10^{-34}$ J · s	Constante de Planck
$\gamma$	$5 \times 10^{11}$ s <sup>-1</sup>	Taxa de relaxamento
$q_e$	$1.6022 \times 10^{19}$ C	Carga do Elétron

A condutividade de interbanda ( $\sigma_{inter}$ ), que escreve a contribuição para a condutividade que resulta da transição de elé-

trons entre bandas de energia e a condutividade de intrabanda ( $\sigma_{\text{intra}}$ ), a qual descreve a contribuição para a condutividade que resulta de processos que ocorrem dentro da mesma banda de energia são representadas em (1) e (2) - onde  $\sigma_0 = \frac{q_e^2}{4\hbar}$  -, respectivamente [2] e [4].

$$\sigma_{\text{inter}}(\omega_1) = \frac{-jq_e^2}{4\pi\hbar} \log \left( \frac{2|\mu_c| - (w_1 - 2j\gamma)\hbar}{2|\mu_c| + (w_1 - 2j\gamma)\hbar} \right) \quad (1)$$

$$\sigma_{\text{intra}}(\omega_1) = \frac{-4j\sigma_0 k_B T}{\pi\hbar(w_1 - 2j\gamma)} \left( \frac{\mu_c}{k_B T} + 2 \ln \left( 1 + \exp \left( -\frac{\mu_c}{k_B T} \right) \right) \right) \quad (2)$$

O dipolo Hertziano, com unidade  $A.m$ , por sua vez, é dado pela Eq. (3), onde  $\mathbf{n}_p = 1\mathbf{a}_x + 1\mathbf{a}_y + 1\mathbf{a}_z$ , conforme [2].

$$\mathbf{P} = p\mathbf{n}_p \quad (3)$$

### III. RESULTADOS

As simulações foram executadas no ambiente de elementos finitos do software COMSOL Multiphysics® em um sistema com processador Ryzen 7 1700 de 8 núcleos, 64 GB de memória RAM, e sistema operacional Linux Debian. A Fig. 2 mostra a malha utilizada nas simulações. O tempo de simulação foi de 50 minutos para as configurações de altura do dipolo ( $h_{\text{dip}}$ ), que foram  $20 \mu\text{m}$  e  $200 \mu\text{m}$ , respectivamente.

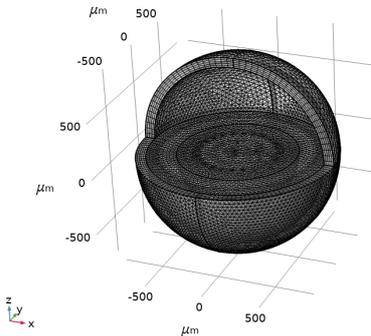


Fig. 2. Malha do sensor plasmônico.

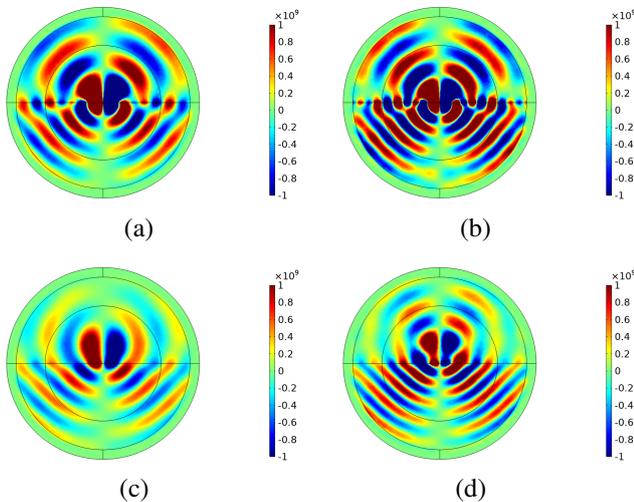


Fig. 3. Para  $h_{\text{dip}} = 20\mu\text{m}$ : (a)  $freq = 0.9 \text{ THz}$ ; (b)  $freq = 1.1 \text{ THz}$ . Para  $h_{\text{dip}} = 200\mu\text{m}$ : (c)  $freq = 0.9 \text{ THz}$ ; (d)  $freq = 1.1 \text{ THz}$

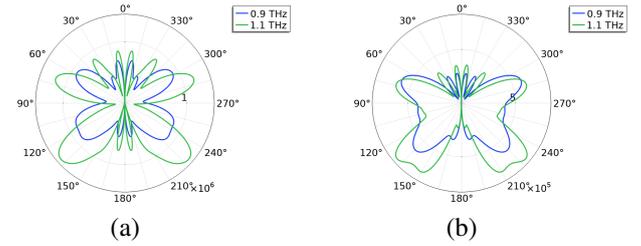


Fig. 4. Diagramas *Far-Field* para (a)  $h_{\text{dip}} = 20\mu\text{m}$  e (b)  $h_{\text{dip}} = 200\mu\text{m}$  para frequências de 0.9 e 1.1 THz

Os resultados das simulações mostraram que, conforme  $h_{\text{dip}}$  se altera em relação ao plano de trabalho  $xz$ , a distribuição do campo no dielétrico  $\epsilon_1$  (Ar) se modifica significativamente. À medida que  $h_{\text{dip}}$  aumenta (Fig. 3b e Fig. 3d), observa-se uma diminuição na excitação dos plmons de superfície [2]. Por outro lado, nota-se uma resposta com alterações mais significativas de campo nos dielétricos  $\epsilon_1$  e  $\epsilon_2$  ( $\text{SiO}_2$ ) com o aumento da frequência. Isso indica uma dependência crítica entre a posição do dipolo e a frequência de excitação, afetando diretamente a interação campo-matéria no sistema estudado.

Verificando a intensidade na Fig. 4 dos lóbulos superiores e inferiores, os quais dependem do campo total da camada de grafeno e do campo acoplado ao substrato, respectivamente, percebe-se que suas intensidades aumentam de modo diretamente proporcional ao aumento das frequências. Há, portanto, coerência com os resultados vistos na Fig. 3 e Fig. 3, confirmando a relação direta entre a frequência de excitação e a distribuição de campo no sistema.

### IV. CONCLUSÃO

Constatou-se que o aumento da altura do dipolo em relação a camada de grafeno implicava diretamente na diminuição da intensidade de campo neste. Em contrapartida, analisando individualmente cada altura com o aumento da frequência, observou-se maior interação entre o dipolo e a camada de grafeno, evidenciando que o grafeno possui maior resposta de campo em frequências elevadas. A intensidade dos lóbulos, tanto superiores como inferiores, comprovou tal relação de altura do dipolo Hertziano e frequência. Propõe-se, para futuros trabalhos, simular sensores plasmônicos em Terahertz com substrato adicional e uma segunda camada de grafeno e estudar o comportamento dos campos na nova modelagem.

### REFERÊNCIAS

- [1] Wêndria Cunha da Silva, "Modelagem de sensores plasmônicos em terahertz baseados em grafeno", Trabalho de Conclusão de Curso, Faculdade de Engenharias Elétrica e Biomédica, Engenharia Elétrica, Universidade Federal do Pará, 2020.
- [2] Yago G. da Conceição, et al. "Análise de Sensor SPR na Configuração SCPE Baseado em Camada Dupla de Grafeno em THz.", in press.
- [3] Homola, Jiri, Sinclair S. Yee, and Günter Gauglitz. "Surface plasmon resonance sensors." *Sensors and actuators B: Chemical* 54.1-2 (1999): 3-15, in press.
- [4] Hanson, George W. "Dyadic Green's functions and guided surface waves for a surface conductivity model of graphene." *Journal of Applied Physics* 103.6, 2008.
- [5] Novotny, Lukas, and Bert Hecht. *Principles of nano-optics*. Cambridge university press, 2012.
- [6] Alexander, Charles K., and Matthew NO Sadiku. *Fundamentos de circuitos elétricos*. AMGH Editora, 2013.