

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/SiO₂. 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/SiO₂ 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 (SiO₂) ($\epsilon_2 \approx 2.13$) e a superfície planar como a Camada de Grafeno.

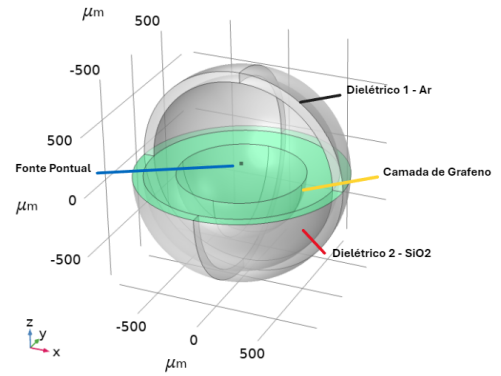


Fig. 1. Modelo da geometria do sensor plasmônico.

Para a modelagem numérica do sensor SPR, foi crucial estabelecer parâmetros como o potencial químico (μ_c) e o comprimento de onda mínimo do grafeno (λ_{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
μ_c	0.5 eV	Potencial Químico
τ	1×10^{-12} s	Tempo de Acomodação
T	300 K	Temperatura
k_B	1.3806×10^{-23} J/K	Constante de Boltzmann
\hbar	1.0546×10^{-34} J · s	Constante de Planck
γ	5×10^{11} s ⁻¹	Taxa de relaxamento
q_e	1.6022×10^{19} C	Carga do Elétron

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

trons entre bandas de energia e a condutividade de intrabanda (σ_{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_{dip}), que foram $20 \mu\text{m}$ e $200 \mu\text{m}$, respectivamente.

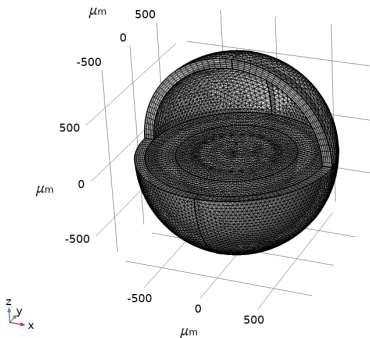


Fig. 2. Malha do sensor plasmônico.

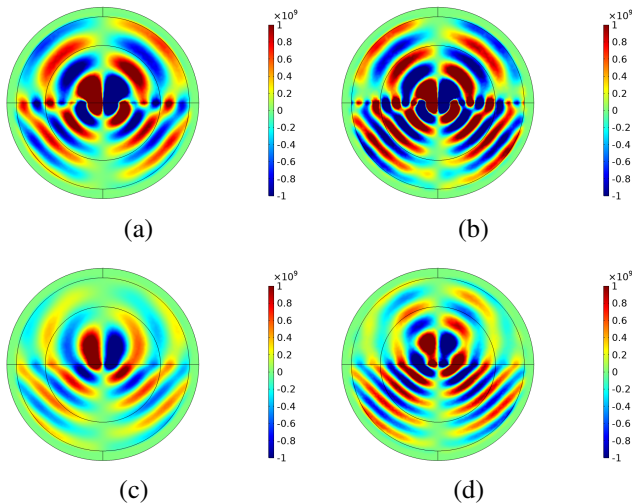


Fig. 3. Para $h_{\text{dip}} = 20\mu\text{m}$: (a) $freq = 0.9 \text{ THz}$; (b) $freq = 1.1 \text{ THz}$. Para $h_{\text{dip}} = 200\mu\text{m}$: (c) $freq = 0.9 \text{ THz}$; (d) $freq = 1.1 \text{ THz}$

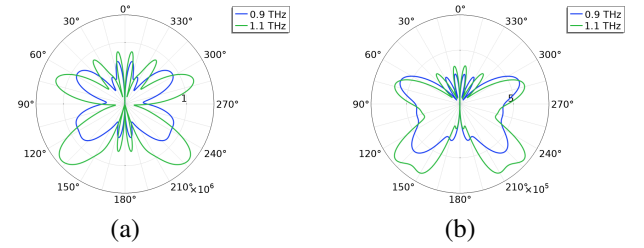


Fig. 4. Diagramas *Far-Field* para (a) $h_{\text{dip}} = 20\mu\text{m}$ e (b) $h_{\text{dip}} = 200\mu\text{m}$ para frequências de 0.9 e 1.1 THz

Os resultados das simulações mostraram que, conforme h_{dip} se altera em relação ao plano de trabalho xz , a distribuição do campo no dielétrico ϵ_1 (Ar) se modifica significativamente. À medida que h_{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 ϵ_1 e ϵ_2 (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.