# UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

ESCOLA DE ENGENHARIA DE SÃO CARLOS

DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA ELÉTRICA

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA ELÉTRICA


# Modelagem de Nano-Estruturas para Aplicações na Geração de Plásmon-Poláritons de Superfície (SPP)


**AUTOR: Yang Min Shih**

**ORIENTADOR: Prof. Dr. Ben-Hur Viana Borges**


Dissertação apresentada à Escola de Engenharia de São Carlos da USP como parte dos requisitos para a obtenção do título de Mestre em Engenharia Elétrica.


São Carlos – SP

2009

# Livros Grátis

http://www.livrosgratis.com.br

Milhares de livros grátis para download.

**FOLHA DE JULGAMENTO**

Candidato: Engenheiro **YANG MIN SHIH.**

Dissertação defendida e julgada em 08/09/2009 perante a Comissão Julgadora:

Aprovado

Prof. Associado **BEN-HUR VIANA BORGES (Orientador)**
(Escola de Engenharia de São Carlos/USP)

Aprovado

Prof. Associado **ANTONIO DOMINGUES DOS SANTOS**
(Instituto de Física/USP)

Aprovado

Prof. Associado **EUCLYDES MAREGA JÚNIOR**
(Instituto de Física de São Carlos/USP)

Prof. Titular **GERALDO ROBERTO MARTINS DA COSTA**
Coordenador do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Elétrica e
Presidente da Comissão de Pós-Graduação

# AGRADECIMENTOS

**Ao Cristo pela Graça.**

**Aos meus pais, Tso Chia e Feng Chu, e aos meus irmãos Jefferson e Jeniffer pelo carinho e apoio incondicional.**

**À minha namorada, I Chen, pelo apoio e paciência.**

**Aos meus amigos de laboratório, Luizir, Helvécio, Eduardo, Valdemir, Anderson, Alex, Tany e Marcelo.**

**Aos meus colegas de laboratório Valtemir, Lorena e Walter.**

**Ao meu orientador Ben-Hur Viana Borges, pela dedicação.**

**Ao INOF – Instituto Nacional de Óptica e Fotônica.**

**À Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (Capes) pelo suporte financeiro.**

# Sumário ..... i

Resumo ..... iii
Abstract ..... iv
Lista de Figuras ..... v
Lista de Tabelas ..... ix
Lista de símbolos ..... x
Lista de Publicações ..... xiii
Capítulo 1 - Introdução ..... 1
Capítulo 2 - Plásmons de superfície e suas aplicações ..... 8
2.1 - Excitação de plásmon-Poláriton de superfície em uma interface plana ..... 9
2.2 - Excitações de SPPs em nanopartículas ..... 15
Capítulo 3 – Resultados numéricos ..... 20
3.1 - Guias plasmônicos planares ..... 20
3.1.1 - Nomenclatura para modos em guias plasmônicos ..... 22
3.1.2 - Definição modal: modos simétricos e anti-simétricos ..... 22
3.2 - Análises de guias de ondas plasmônicos tipo fenda ..... 27
3.3 - Acoplador direcional plasmônico ..... 34
3.3.1 – Análise de sensibilidade ..... 46
3.4 - Ressoadores em anel ..... 50
3.4.1 – Análise de sensitividade ..... 59
Capítulo 4 - Conclusões ..... 67
4.1 Trabalhos futuros ..... 68
Referências Bibliográficas ..... 69
Apêndice ..... 74
A - Representação da permissividade de metais. ..... 74
A.1 - Representação via modelo de Drude ..... 74
A.2 - Representação via HOM - modelo de oscilador harmônico ..... 78
A.3 - Ajuste polinomial de dados experimentais ..... 78
A.4 - Representação via modelo de Lorentz ..... 80
A.5 - Representação via modelo de Drude-Lorentz ..... 81
B - Confinamento de campo ..... 84
Referências associadas ao Apêndice ..... 86

# Resumo

Yang, M. S. (2009) **Modelagem de Nano-Estruturas para Aplicações na Geração de Plásmon-Poláritons de Superfície (SPP).** Dissertação de Mestrado, Departamento de Engenharia Elétrica, EESC - Escola de Engenharia de São Carlos.

O incessante aumento do volume de informações produzido por uma sociedade cada vez mais informatizada tem elevado drasticamente os requisitos quanto ao desenvolvimento de dispositivos capazes de suportar velocidades de operação cada vez mais elevadas em tamanhos cada vez mais reduzidos. No entanto, a contínua redução do tamanho desses dispositivos, celebrado através da Lei de Moore, também produz um indesejável aumento na produção de calor durante a operação dos mesmos, comprometendo seu desempenho global. Uma alternativa promissora para aliviar, ou mesmo superar, estas limitações é oferecida pelos dispositivos ópticos integrados. No entanto, todo esse avanço esbarrava no fato de que as dimensões de tais dispositivos estavam restringidas fundamentalmente ao que é largamente conhecido como limite de difração (LD). Uma maneira de contornar essa limitação é obtida através da utilização de Plásmon Poláritons de Superfície, ou SPPs, que, de maneira simplificada, são ondas que se propagam ao longo da superfície de um condutor depositado sobre um dielétrico. Estas são essencialmente ondas de luz que são localizadas na superfície por causa de sua interação com os elétrons livres do condutor. Nesta interação, os elétrons livres respondem coletivamente oscilando em ressonância com a onda de luz.

No presente trabalho, o fenômeno de geração de SPPs é estudado teoricamente e aplicado na modelagem de diversas estruturas de interesse científico e tecnológico, tais como acopladores direcionais e ressoadores. O objetivo principal é a obtenção de estruturas capazes de proporcionar propagação de SPPs por longas distâncias, permitindo, assim, estender ainda mais o leque de possíveis aplicações. As estruturas são investigadas prioritariamente no *COMSOL Multiphysics*, um aplicativo baseado em elementos finitos que permite solução vetorial de problemas eletromagnéticos.

Os resultados obtidos até o momento permitem afirmar que o conceito de SPP de longa distância (*long range* SPP, LRSPP) podem ser aplicados com sucesso a estruturas geometricamente complexas como os ressoadores em anel e acopladores direcionais.

*Palavras-chave*: Plásmon-Poláritons de superfície, guias de onda tipo "*rib*" multicamadas, acoplador direcional, ressoadores em anel.

# Abstract

The continuous growth of knowledge produced by a society with increasing access to information technologies has demanded the development of communication devices capable of supporting high processing speeds at more and more reduced sizes. Nevertheless, the continuous reduction of the size of these devices, celebrated by the Moore's Law, has also produced an undesirable increase of heat produced during the operation of the device itself, compromising its overall performance. A promising alternative to alleviate, or even overcome, these limitations has been offered by photonic integrated circuits. However, all the advance of photonic devices was restricted to what is known as diffraction limit. A fascinating way of circumventing this limit is now available to the scientific community, and consists in the generation of Surface Plasmon Polariton (SPP) waves. In a simplified manner, SPP waves are waves that propagate along a metal/dielectric interface. These waves are essentially localized at the metal/dielectric interface because of the interaction of light with free electrons of the metal. In this interaction, the free electrons respond collectively and oscillate resonantly with the incident light.

In the present work, the phenomenon of SPP generation is theoretically investigated and applied to the modeling of several structures, such as directional couplers and resonators. The primary goal of this work is to design structures capable propagating SPP waves for long distances, known as long range SPP (LRSPP). The structures are investigated mostly with *COMSOL Multiphysics*, a finite elements based software that allows for the vectorial solution of electromagnetic problems.

The results obtained so far are extremely encouraging, and prove that the LRSPP concept can be successfully applied to geometrically complex structures, such as couplers and ring resonators.



Key words: Surface Plasmon Polariton, multilayer rib waveguides, directional couplers, ring resonators.

# Lista de Figuras

Figura 2.1.1. Geometria para propagação de SPPs em uma interface metal-dielétrico..... 10

Figura 2.1.2. Propagação de SPPs em uma interface metal-dielétrico. ..... 13

Figura 2.1.3. Relação de dispersão de SPPs em uma interface metal-dielétrico. O metal é representado pelo modelo de Drude, porém com o constante de amortecimento excluído. Linha de luz do ar (azul sólida), linha de luz da sílica (vermelha pontilhada), vetores de propagação de plásmon de superfície $k_{SP_Ar/Ag}$ (azul pontilhada) e $k_{SP_Sílica/Ag}$ (vermelha tracejada e pontilhada). ..... 15

Figura 2.2.1. Esquema de uma esfera homogênea posicionada em um campo eletrostática no meio dielétrico. ..... 17

Figura 3.1.1. Estrutura de filme metálico considerada neste trabalho. O metal apresenta espessura t, largura w, e permissividade $\varepsilon_{r,m}$. O ambiente é um meio homogêneo com permissividade $\varepsilon_{r,2}$. ..... 22

Figura 3.1.2. Relação de dispersão para $w \to \infty$, (a) Parte real do índice efetivo, (b) parte imaginária do índice efetivo. ..... 24

Figura 3.1.3. Relação de dispersão dos oito primeiros modos suportados pelo filme metálico de Ag com largura $w = 1\mu m$. (a) Parte real do índice efetivo, (b) parte imaginária do índice efetivo. ..... 25

Figura 3.1.4. Campo elétrico $Ey$ dos dois primeiros modos plasmônicos obtidos para $w = 1\mu m$ e $t = 60nm$, (a) modo $aa_b^0$, (b) modo $as_b^0$, (c) $ss_b^0$, (d) $sa_b^0$, (e) $aa_b^2$, (f) $as_b^2$ ,(g) $sa_b^1$ e (h) $ss_b^1$. ..... 26

Figura 3.1.5. As distâncias de propagação dos modos apresentados nesta seção. ..... 27

Figura 3.2.1. (a) guia de onda do tipo fenda quadrada, (b) guia de onda tipo fenda - V. ..... 27

Figura 3.2.2 Distribuição espacial de campo $H_y$ para (a) modo simétrico e (b) anti-simétrico em uma fenda quadrada, e (c) modo simétrico e (d) anti-simétrico em uma fenda tipo V. ..... 28

Figura 3.2.3. Modo $s_b$ (a) parte real de seu índice efetivo, (b) parte imaginária, (c) confinamento de campo, (d) distância de propagação. ..... 30

Figura 3.2.4. Relação de dispersão associada à guia plasmônico do tipo fenda quadrada. (a) $Re[n_{eff}]$, (b) $Im[n_{eff}]$, (c) confinamento de campo, (d) distância de propagação. ..... 31

Figura 3.2.5. Contornos de campo referentes aos pontos a' e b' indicados na Fig. 3.2.3 (a), para $w = 50nm$. (a) $d_q = 200nm$, e (b) $d_q = 1000nm$. ..... 32

Figura 3.2.6. Modo $s_b$ do guia plasmônico do tipo V. (a) $Re[n_{eff}]$, (b) $Im[n_{eff}]$, (c) confinamento de campo, (d) distância de propagação. ..... 33

Figura 3.2.7. Modo $a_b$ do guia plasmônico do tipo V. (a) $Re[n_{eff}]$, (b) $Im[n_{eff}]$, (c) confinamento de campo, (d) distância de propagação. ..... 34

Figura 3.3.1. Acoplador plasmômico proposto vista na secção transversal, o metal e dielétrico 2 são colocados em um ambiente no qual o índice dielétrico é $n_1$, onde $(n_2 = n_6) \geq n_1$. ..... 35

Figura 3.3.2. Relação de dispersão do acoplador plasmônico para modo $ss_b^1$, $t_m$ a espessura de metal e $t$ a distância que separa metal e canal dielétrico. (a) parte real do índice efetivo, (b) parte imaginária, (c) confinamento de campo e (d) distância de propagação. Os pontos de A a F representam casos extremos de confinamentos.38

Figura 3.3.3. Distribuição de campo para a componente $E_y$, (a) referente ao ponto A, e (b) referente ao ponto B, (c) referente ao ponto C, para $t_m = 20nm$ e $t_d = 40nm$, (d) referente ao ponto D, e (e) referente ao ponto E. (f) referente ao ponto F, para $t_m = 80nm$ e $t_d = 99{,}3nm$. Os pontos são referentes à Fig. 3.3.2(b). ..... 39

Figura 3.3.4. (a) parte real de $n_{eff}$, (b) parte imaginária de $n_{eff}$, (c) confinamento de campo e (d) distância de propagação do modo $aa_b^2$. ..... 40

Figura 3.3.5. (a) parte real de $n_{eff}$, (b) parte imaginária de $n_{eff}$, (c) confinamento de campo e (d) distância de propagação do modo $as_b^2$ ..... 41

Figura 3.3.6. (a) parte real de $n_{eff}$, (b) parte imaginária de $n_{eff}$, (c) confinamento de campo e (d) distância de propagação do modo $sa_b^1$ ..... 42

Figura 3.3.7. (a) Distribuição de campo $E_y$ para metal/substrato. (b) Distribuição de campo $E_y$ para dielétrico/substrato, ambos utilizando modo híbrido como fonte de excitação. ..... 43

Figura 3.3.8. (a) Distribuição de campo $E_y$ para modo 1 com $t_m = 20nm$, $t_d = 40nm$, $w = 1\mu m$ e $t = 1000nm$, (b) campo $E_y$ em 3D, (c) campo $Ey$ para modo 2, (d) modo 2 em 3D, (c) e (d) são distribuição de campo $E_y$ para modo 3 e sua forma em 3D, respectivamente. ..... 44

Figura 3.3.9. Distribuição de campo $E_y$ para estrutura com apenas guias 2 e 4, (a) modo par e (b) ímpar. ..... 45

Figura 3.3.10. Comprimento de acoplamento de acoplador direcional de três núcleos. ..... 46

Figura 3.3.11. Comprimento de acoplamento $L_\pi$ quando varia a largura da estrutura w e a separação entre guias, t. ..... 47

Figura 3.3.12. Comprimento de acoplamento, (a) variando a espessura de guia dielétrico, e (b) variando a espessura do metal. ..... 48

Figura 3.3.13. Comprimento de acoplamento obtido utilizando HOM [63], (a) varia a distância de separação entre guias, (b) varia a espessura de guia dielétrico e (c) varia a espessura de metal. ..... 49

Figura 3.4.1. Ressoador de anel, com largura de canal $w$, raio $r$, comprimento de acoplamento $L_\pi$, e separação $t$. ..... 50

Figura 3.4.2. (a) Corte 1, seção transversal do ressoador de anel, (b) corte 2 e (c) Estrutura de ressoador final com seu respectivos valores de índice efetivo. ..... 53

Figura 3.4.3. Relação de dispersão de um guia rib isolado, (a) $Re[n_{eff}]$, (b) $Im[n_{eff}]$, (c) confinamento de campo e (d) distância de propagação. ..... 54

Figura 3.4.4. Distribuição de campo $E_y$ do modo simétrico do guia rib isolado, (a) vista na direção xy e (b) vista na direção yz. ..... 55

Figura 3.4.5. Distribuições de campos $H_x$ para dois guias multicamadas e seus índices efetivos são: (a) modo par com $n_{eff\,1}$ e (b) modo ímpar com $n_{eff\,2}$. ..... 56

Figura 3.4.6. Resposta em freqüência (a) fator de qualidade Q e (b) *FRS – Free Spectral Range*. ..... 57

Figura 3.4.7. Resposta em freqüência, o gráfico de atenuação para porta de corte - Drop (curva azul) e porta de passagem - Through (curva vermelha). ..... 58

Figura 3.4.8. (a) Distribuição de campo $H_z$ em $\lambda = 1552nm$. (b). Distribuição de campo $H_z$ em $\lambda = 1540nm$. ..... 58

Figura 3.4.9. (a) Parte real de índice efetivo, (b) parte imaginária, (c) o confinamento de campo, (d) distância de propagação e (e) comprimento de acoplamento. ..... 60

Figura 3.4.10. Os parâmetros são fixos exceto $t_m$ e $n_{g1}$, (a) parte real de índice efetivo, (b) parte imaginária, (c) confinamento de campo, (d) distância de propagação e (e) comprimento de acoplamento. ..... 62

Figura 3.4.11. Os parâmetros são fixos exceto $t_m$ e $n_{g2}$, (a) parte real de índice efetivo, (b) parte imaginária, (c) confinamento de campo, (d) distância de propagação e (e) comprimento de acoplamento. ..... 63

Figura 3.4.12. Os parâmetros são fixos exceto $t_m$ e $n_{g3}$, (a) parte real de índice efetivo, (b) parte imaginária, (c) confinamento de campo, (d) distância de propagação e (e) comprimento de acoplamento. ..... 64

Figura 3.4.13. Resposta em freqüência de ressoador para: (a) w=500nm, (b) w=450nm, (c) w=480nm, (d) w=520nm e (e) w=550nm. Todos variam a distância de separação t de 80nm a 140nm. ..... 66

Figura A.1. A função dielétrica $\varepsilon_r(\omega)$ via equação (A-23), (linha sólida) e dados experimentais (círculos) para o Au versus energia ($eV$). A validade do modelo de elétrons livres é limitada pela região de transições de interbanda na faixa de freqüência ópticas ou superiores. ..... 77

Figura A.2. Permissividade relativa para a Ag obtida pelo modelo de oscilador harmônico (linha sólida), com $\omega_p = 1.419 \times 1016 rad/s$ e $\Gamma = 1.0 \times 1014 rad/s$. (a) parte real, e (b) parte imaginária. Para comparação são incluídos os dados experimentais de Palik [A2] (triângulos) e Johnson [A3] (círculos). ..... 78

Figura A.3. Permissividade do Au em função da energia ($eV$). Ajuste polinomial (linha sólida), e dados experimentais (símbolos), (a) parte real e (b) imaginária..... 79

Figura A.4. Permissividade do Au em função da energia ($eV$). Ajuste polinomial (linha sólida), e dados experimentais (símbolos), (a) parte real e (b) imaginária. A faixa de energia foi reduzida apenas para melhorar a precisão do polinômio..... 80

Figura A.5. Partes real e imaginária da constante dielétrica da prata (Ag) [A1]. As curvas pretas são geradas pelo modelo de Drude-Lorentz, as curvas vermelhas são geradas utilizando o modelo de Drude. Círculos e quadrados representam os dados experimentais de Palik para as partes reais e imaginárias, respectivamente [A2].82

# Lista de Tabelas

TABELA 1. Dados físicos e geométricos do acoplador plasmônico. Para cada espessura adotada para o metal, associa-se uma espessura de dielétrico de tal forma que a estrutura permaneça casada*. ..... 37

TABELA 2. Dados do ressoador em anel vistam da seção transversal. ..... 55

TABELA A.1. - Parâmetros do modelo de Drude-Lorentz [A1] ..... 82

# Lista de símbolos

| | |
|---|---|
| $D$ | Densidade superficial de campo elétrico |
| $B$ | Densidade superficial de fluxo magnético |
| $E$ | Campo elétrico |
| $H$ | Campo magnético |
| $\rho_{ext}$ | Densidade de carga |
| $J_{ext}$ | Densidade de corrente |
| $\mu$ | Permissividade |
| $\varepsilon$ | Permissividade |
| $\mu_0$ | Permissividade do vácuo |
| $\varepsilon_0$ | Permissividade do vácuo |
| $k_0$ | Constante de propagação no vácuo |
| $\beta$ | Constante de propagação |
| $H_x$ | Componente de campo magnético na direção *x* |
| $H_y$ | Componente de campo magnético na direção *y* |
| $H_z$ | Componente de campo magnético na direção *z* |
| $E_x$ | Componente de campo elétrico na direção *x* |
| $E_y$ | Componente de campo elétrico na direção *y* |
| $E_z$ | Componente de campo elétrico na direção *z* |
| $k_1$ | Constante de propagação no meio metálico |
| $k_2$ | Constante de propagação no meio dielétrico |
| $TM$ | Campo magnético transversal |
| $TE$ | Campo elétrico transversal |
| $\varepsilon_1$ | Permissividade do metal |
| $\varepsilon_2$ | Permissividade do material dielétrico |
| $k_{sp}$ | Constante de propagação para plásmon de superfície |
| $l_{sp}$ | Distância de propagação |
| $\omega$ | Freqüência em rad/s |
| $\omega_p$ | Freqüência de plasma |
| $\omega_{sp}$ | Freqüência de plásmon de superfície |
| $k_{sp_Ar/Ag}$ | Constante de propagação de plásmon de superfície para interface formada pelo ar e prata |
| $k_{sp_Sílica/Ag}$ | Constante de propagação de plásmon de superfície para interface formada pela sílica e prata |
| $\omega_1$ | Região proibida de $k_{sp_Ar/Ag}$ |
| $\omega_2$ | Região proibida de $k_{sp_Sílica/Ag}$ |
| $SP$ | Plásmon de superfície |
| $SPPs$ | Plásmon-Poláriton de Superfície |
| $LSP$ | Plásmon de superfície localizada |
| $a$ | Raio da esfera |
| $\lambda$ | Comprimento de onda |
| $\varepsilon_{sur}$ | Permissividade do meio |
| $\varepsilon_m$ | Permissividade do metal |
| $P$ | Vetor P |
| $\theta$ | • Ângulo entre o vetor P e o eixo z (capítulo 2)<br>• Ângulo de abertura (seção 3.2) |
| $\Phi_{in}$ | Potencial eletrostático dentro da esfera |
| $\Phi_{out}$ | Potencial eletrostático fora da esfera |
| $l$ | Ordem do polinômio de Legendre |
| $r$ | Vetor *r* |
| $p$ | Momento de dipolo |
| $E_0$ | Intensidade de campo elétrico |
| $\alpha$ | Polarizabilidade |
| $E_{in}$ | Campo elétrico no interior da esfera |
| $E_{out}$ | Campo elétrico fora da esfera |

| | |
|---|---|
| $b$ | Confinado |
| $s_b$ | Modo simétrico confinado |
| $a_b$ | anti-simétrico confinado |
| $LRSPP$ | Plásmon-Poláriton de Superfície de Longo Alcance |
| $w$ | Largura |
| $t$ | • Espessura do metal (seção 3.1.1)<br>• Separação entre guias (seção 3.3 e 3.4) |
| $\varepsilon_{r,m}$ | Permissividade de metal |
| $\varepsilon_{r,2}$ | Permissividade de dielétrico |
| $n$ | Número de ordem do modo |
| $ss_b^n$ | Modo confinado simétrico tanto no eixo principal quanto no eixo secundário de ordem *n* |
| $sa_b^n$ | Modo confinado simétrico no eixo principal e anti-simétrico no eixo secundário de ordem *n* |
| $as_b^n$ | Modo confinado anti-simétrico no eixo principal e simétrico no eixo secundário de ordem *n* |
| $aa_b^n$ | Modo confinado anti-simétrico tanto no eixo principal quanto no eixo secundário de ordem *n* |
| $\lambda_0$ | Comprimento de onda |
| $n_{eff}$ | Índice efetivo |
| $Re[n_{eff}]$ | Parte real do índice efetivo |
| $Im[n_{eff}]$ | Parte imaginária do índice efetivo |
| $v_0$ $e$ $c_0$ | Velocidade da luz no vácuo |
| $t_m$ | Espessura de metal |
| $ss_b^0$ | Modo confinado simétrico tanto no eixo principal quanto no eixo secundário de ordem *0* |
| $sa_b^0$ | Modo confinado simétrico no eixo principal e anti-simétrico no eixo secundário de ordem *0* |
| $as_b^0$ | Modo confinado anti-simétrico no eixo principal e simétrico no eixo secundário de ordem *0* |
| $aa_b^0$ | Modo confinado anti-simétrico tanto no eixo principal quanto no eixo secundário de ordem *0* |
| $ss_b^1$ | Modo confinado simétrico tanto no eixo principal quanto no eixo secundário de ordem *1* |
| $sa_b^1$ | Modo confinado simétrico no eixo principal e anti-simétrico no eixo secundário de ordem *1* |
| $as_b^2$ | Modo confinado anti-simétrico no eixo principal e simétrico no eixo secundário de ordem *2* |
| $aa_b^2$ | Modo confinado anti-simétrico tanto no eixo principal quanto no eixo secundário de ordem *2* |
| $\varepsilon_{ar}$ | Permissividade do ar |
| $d_q$ | Profundidade da fenda quadrada |
| $d_v$ | Profundidade da fenda tipo V |
| $n_{meio}$ | Índice dielétrico do meio |
| $M_1$ | Confinamento de campo |
| $\pi$ | pi |
| $\kappa_c$ $ou$ $\kappa$ | Coeficiente de acoplamento |
| $\Delta n_{eff}$ | Diferença entre índice efetivo do modo par e ímpar |
| $L_c$ | Comprimento de acoplamento para guia de dois núcleos |
| $L_\pi$ | Comprimento de acoplamento |
| $\kappa_1$ | Coeficiente de acoplamento entre guia 2 e 4 |
| $\kappa_1$ | Coeficiente de acoplamento entre guia 4 e 6 |
| $t_d$ | • Espessura da camada dielétrica (seção 3.3)<br>• Espessura de *buffer* (seção 3.4) |
| $t_m$ | Espessura da camada metálica |
| $\delta_d$ | Distância de propagação |
| $w_m$ | Largura do metal |
| $d_{pm\,1}$ | Distância de propagação para modo 1 |

| | |
|---|---|
| $d_{pm\,2}$ | Distância de propagação para modo 2 |
| $d_{pm\,3}$ | Distância de propagação para modo 3 |
| $n_{eff_par}$ | Índice efetivo do modo par |
| $n_{eff_ímpar}$ | Índice efetivo do modo ímpar |
| *HOM* | Modelo de oscilador harmônico |
| $\varepsilon_{m_HOM}$ | Permissividade do metal obtida utilizando o modelo HOM |
| *WDM* | multiplexação em comprimento de onda |
| *in* | Porta de excitação |
| *drop* | Porta de corte |
| *through* | Porta de passagem |
| $\lambda_i$ | Comprimento de onda a ser filtrada |
| *buffer* | Camada de isolamento |
| $t_{g1}$ | Espessura da camada 1 |
| $t_{g2}$ | Espessura da camada 2 |
| $t_{g3}$ | Espessura da camada 3 |
| $\beta_1$ | Constante de propagação do modo par |
| $\beta_2$ | Constante de propagação do modo ímpar |
| $m$ | Número inteiro de comprimento de onda |
| $n_{g1}$ | Índice dielétrico da camada 1 |
| $n_{g2}$ | Índice dielétrico da camada 2 |
| $n_{g3}$ | Índice dielétrico da camada 3 |
| $n_d$ | Índice dielétrico de *buffer* |
| $n_{subs}$ | Índice dielétrico do substrato |
| $n_o$ | Índice dielétrico do ar |
| $d_{p1}$ | Distância de propagação do modo par |
| $d_{p2}$ | Distância de propagação do modo ímpar |
| $r_{out}$ | Raio externo de *racetrack* |
| $r_{in}$ | Raio interno de *racetrack* |
| $Q$ | Fator de qualidade |
| *FSR* | *Free Spectral Range* |
| *Ag* | Prata |
| *Au* | Ouro |
| *Cu* | Cobre |
| *SPR* | *surface plasmon resonance* |
| $m$ | Massa de elétron |
| $q$ | Carga de elétron |
| $\tau$ | Tempo de relaxação |
| $n$ | Número de elétrons livres por unidade de volume |
| $\sigma$ | Condutividade |
| $x$ | Posição de elétrons |
| $v$ | Velocidade de elétrons |
| $\Gamma$ | Freqüência de colisão |
| $\varepsilon_r$ | Permissividade |
| $\varepsilon_1$ | Parte real da permissividade |
| $\varepsilon_2$ | Parte imaginária da permissividade |
| $f$ | Energia do fóton em $eV$ |
| $k$ | Número de osciladores |
| $\hbar$ | Constante de Planck |
| $\varepsilon^{(c)}$ | Função dielétrica é produzida pelos "elétrons confinados" |
| $\omega_k$ | Freqüência de ressonância |
| $f_k$ | Força |
| $\Gamma_k$ | Constante de amortecimento |
| $\varepsilon_\infty$ | Constante dielétrica em freqüência infinita |
| $A_{eff}$ | Área efetivo do modo plasmônico |

# Lista de Publicações

Macêdo, J. A. S., Shih, Y. M., Dinis, L. O. e Borges, B. V. "Two dimensional finite difference time domain study of mode propagation in nanoscale structures." In: **Workshop on Frontiers in Nanophotonics and Plasmonics, 2007, Guarujá.**

Shih, Y. M., Dinis, L. O. e Borges, B. V. "Modelagem de Acoplador Direcional de Três Núcleos e Ressoador tipo *Racetrack* utilizando Plásmon-Poláriton de Superfície." In: **Workshop e Escola Avançada em Nanoplasmônica, Aug. 2009**.

Dinis, L. O., Shih, Y. M., e Borges, B. V. "Biomolecular Sensor Based In Label-Free Detection with Planar Ring Resonator." In: **Workshop e Escola Avançada em Nanoplasmônica, Aug. 2009**.

# Capítulo 1 - Introdução

O constante aumento do volume de informações produzido globalmente vem demandando o desenvolvimento de dispositivos eletrônicos cada vez mais rápidos em dimensões cada vez mais reduzidas. A redução da dimensão desses dispositivos, no entanto, também produz um indesejável aumento na produção de calor durante a operação dos mesmos, comprometendo seu desempenho global. Uma alternativa são os dispositivos ópticos integrados, tendo em vista que a fotônica vem se beneficiando de todos os avanços obtidos com a tecnologia de microeletrônica, permitindo o desenvolvimento de dispositivos cada vez mais complexos e robustos. Por outro lado, esse avanço é limitado pelas dimensões de tais dispositivos, restringidas fundamentalmente pelo limite de difração (LD). Uma maneira de se contornar essa limitação é obtida através da utilização de SPPs (plásmon poláritons de superfície) que, de maneira simplificada, são ondas que se propagam ao longo da superfície de um condutor depositado sobre um dielétrico. Essas são essencialmente ondas de luz localizadas na sua interface por causa de sua interação com os elétrons livres do condutor em que estes respondem coletivamente oscilando em ressonância com a onda de luz. É importante ressaltar que o grande impulso em direção ao estudo da geração de SPPs foi dado pelo notável trabalho realizado por Ebbsen *et al.* relativo à fabricação de uma rede de difração metálica sobre um filme dielétrico [1]. Esta rede de difração foi formada a partir de um arranjo periódico de minúsculos buracos com diâmetros sub-micrométricos. Foi verificado um aumento na transmissividade da luz, maior que a área projetada dos buracos poderia sugerir. Um aumento várias ordens de magnitude, maior que aquele de uma abertura sub-micrométrica isolada. Esta descoberta despertou um enorme interesse da comunidade científica, pois abriu a possibilidade de fabricação de dispositivos ópticos sem a restrição imposta pelo limite de difração [2]. Desde então este assunto tem obtido cada vez mais destaque nos centros de pesquisa.

A interação da ressonância entre a oscilação da carga de superfície e o campo eletromagnético da luz constitui o SPP, responsável por suas propriedades originais, que são: oferecimento de maior confinamento de campo comparando com os guias dielétricos convencionais e forte realce de campo próximo quando a estrutura está em ressonância. Além disso, alterando a estrutura da superfície do metal, as propriedades dos SPPs (em particular sua interação com a luz) podem ser manipuladas, possibilitando o

desenvolvimento de novos tipos de dispositivos fotônicos em escalas de comprimento menores do que aquelas conseguidas atualmente, mais precisamente em escala nanométrica. Outra característica destes dispositivos é que os modos SPP podem também ser utilizados para transportar sinais elétricos. Características como estas possibilitaram a criação de uma nova área de pesquisa na ciência, denominada como "plasmônica" [3]-[4]. Um breve histórico desse notável efeito é dado a seguir.

O efeito SPP, antes de ser estudado por cientistas, foi muito utilizado por artistas como técnicas para produzir cores vibrantes em artefatos de vidro e coloração de vitrais de Catedrais. Um dos mais famosos exemplos que pode ser citado é a Taça de Licurgo, produzida no império Bizantino no século IV. Uma vez que uma fonte de luz é inserida em seu interior, a Taça (inicialmente esverdeada) torna-se de coloração vermelha. A mudança de cor só é possível graças à excitação plasmônica das partículas metálicas dentro da matriz do vidro. O estudo sobre o efeito de plásmons teve início em 1902 com o professor Robert W. Wood, motivado pela observação de características até então inexplicáveis em medidas de reflexão óptica em redes de difração metálicas [5]. Dois anos depois, Maxwell Garnett [6] descreveu as cores brilhantes observadas em vidros dopados com partículas metálicas usando o modelo recém-desenvolvido por Drude para metais e as propriedades eletromagnéticas de uma pequena esfera sugeridas por Lord Rayleigh. Outro trabalho que contribuiu para a compreensão do assunto foi realizado por Gustav Mie, em 1908, onde a teoria de espalhamento de luz por partículas esféricas é descrita [7].

Cinqüenta anos depois, em 1956, David Pines descreveu teoricamente as características das perdas de energia experimentadas por elétrons rápidos que viajam através dos metais [4]. Ele atribui essas perdas à oscilação coletiva de elétrons livres no metal, fazendo uma analogia ao trabalho de oscilação de plasma numa descarga gasosa. Essas oscilações foram denominadas por ele como "Plásmons". No mesmo ano, Robert Fano introduziu o termo "Poláriton" para denominar uma oscilação acoplada entre elétrons confinados e luz em um meio transparente [8]. Em 1957, Rufus Rithie apresentou um estudo sobre a perda de energia de elétrons em filmes metálicos [9], onde foi demonstrado que modos plásmônicos podem existir perto da superfície do metal representando, assim, a primeira descrição teórica sobre plásmons de superfície. O maior avanço no estudo de plásmons de superfície foi feito no ano de 1968, quando Andreas Otto, bem como Erich Kretschmann e Heinz Raether, apresentaram um método para

excitação óptica de SPPs em filmes metálicos [10]-[11], tornando esses experimentos mais acessíveis para os pesquisadores.

Após todo esse avanço no estudo de efeito de geração de plásmons, faltava ainda a conexão de nano partículas metálicas com as propriedades ópticas. No ano de 1970, mais de sessenta anos após o trabalho de Garnett sobre cores brilhantes observado no vidro dopado com partículas de metal, Uwe Kreibig e Peter Zacharias fizeram um estudo no qual eles compararam as respostas eletrônicas e ópticas de nano partículas de ouro e de prata [12]. Naquele trabalho, eles, pela primeira vez, descreveram as propriedades ópticas de uma nano partícula em termos de plásmons de superfície. A pesquisa desse efeito continuou e a importância de acoplamento entre oscilações de elétrons e campo eletromagnético tornou-se cada vez mais aparente. Mais tarde, em 1974, Stephen Cunningham e colaboradores introduziram o termo plásmon-poláriton de superfície (SPP) [13].

Outra grande descoberta nesta área ocorreu naquele mesmo ano (1974), quando Martin Fleischmann e colaboradores observam um forte espalhamento Raman das moléculas de piridina próximo à superfície áspera de um eletrodo de prata [14]. O espalhamento Raman, caracterizado por uma troca de energia entre os fótons e moléculas vibracionais, foi intensificado pelo campo eletromagnético próximo à superfície áspera de prata devido à presença de plásmons de superfície. Essa observação conduziu ao que hoje é conhecido como Espectroscopia Raman Intensificada pela Superfície (SERS).

Deste então, houve uma transição da teoria de SPP para aplicação deste novo efeito. O impulso atual na pesquisa baseada em plásmons está acontecendo em um momento onde áreas tecnológicas cruciais, tais como litografia óptica, armazenamento de dados via óptica, e indústria de eletrônica de alta densidade (tais como circuitos integrados), estão no limite físico de miniaturização. Diversos desafios tecnológicos podem ser superados utilizando-se as propriedades de SPPs. Graças aos diversos estudos recentes, uma enorme variedade de dispositivos ópticos baseados na geração de plasmons podem ser agora aplicados em áreas tais como microeletrônica, medicina, militar, telecomunicação, etc. [15]-[35].

A motivação para este trabalho, portanto, deve-se não apenas ao fato de que a área de "plasmônica" ainda seja recente, mas pelas infinitas possibilidades oferecidas em termos de projeto e modelagem de novos dispositivos, e aos extraordinários avanços já obtidos nesse campo de pesquisa. Nesse contexto, serão explorados nesta pesquisa novos dispositivos ópticos, notadamente os guias de ondas SPP de longa distância (LRSPP)

[35]-[37]. Essas estruturas possibilitam estender o alcance da propagação de SPPs por várias ordens de magnitude quando comparadas às estruturas existentes, tais como fendas do tipo quadrada e tipo V. Embora as fendas apresentem facilidades nos processos de fabricação, os componentes ópticos construídos com este tipo de seção transversal apresentam uma distância de propagação da ordem de poucas dezenas de microns [26], o que é um valor muitas vezes insuficiente para aplicações de sensoriamento e em comunicações ópticas.

Como pôde ser visto acima, a área de plasmônica apresenta uma vasta gama de novas possibilidades no campo de projeto, modelagem, e fabricação de dispositivos. E isso passa, necessariamente, pela investigação de estruturas (normalmente de geometrias mais complexas) que permitem a propagação de SPPs por longas distâncias. Como pode ser observada nos trabalhos publicados [36]-[37], a investigação de tais dispositivos requer um controle adequado dos modos que serão excitados na mesma. Por isso, o estudo da denominação modal em estruturas plasmônicas sugerido por Berini será brevemente revisitado neste trabalho com o objetivo de solidificar os conhecimentos relativos não só à denominação modal, mas também quanto ao de gerenciamento de perdas nestes dispositivos. Esse estudo se justifica tendo em vista que a denominação modal em guias de plásmons não é tão trivial quanto em guias ópticos dielétricos convencionais. Neste contexto, vale salientar que em uma estrutura de fita metálica de largura finita, existem quatro modos fundamentais, ou seja, modos $\boldsymbol{ss_b^n}$, $\boldsymbol{sa_b^n}$, $\boldsymbol{as_b^n}$ e $\boldsymbol{aa_b^n}$, nas quais a letra *a* representa o campo anti-simétrico, *s* o campo simétrico, *b* classifica o confinamento do modo e *n* a numeração da ordem do modo. Esta mesma classificação não pode ser feita em guias assimétricos.

Neste trabalho, optou-se por dar o enfoque a novas abordagens para algumas estruturas de elevado interesse científico e tecnológico, como acopladores direcionais e ressoadores, ambos utilizando como princípio de funcionamento o efeito de geração de SPPs. Em se tratando de acopladores plasmônicos, a geometria mais simples para este tipo de aplicação é a do tipo fenda, como sugerido por [29]. Nesse caso, a estrutura consiste de uma fenda com largura e profundidade de $100nm$, projetado para o comprimento de onda $632{,}8nm$. Embora esta estrutura seja relativamente fácil fabricação, as perdas decorrentes da interação da luz com o metal limitam a distância de propagação a aproximadamente $10\mu m$. Por conta disso, a estrutura deve ser projetada de modo que o comprimento de acoplamento seja o mais curto possível. No caso de [29],

esse comprimento é de $3\mu m$. Uma abordagem um pouco diferente, consistindo de duas fitas de ouro de largura finita colocadas em proximidade, pode também ser aplicada com sucesso no projeto acopladores plasmônicos, como sugerido em [30]-[31]. Em [30], os autores realizam um estudo teórico do mecanismo de acoplamento entre as duas fitas metálicas. Mais tarde, em [31], o mesmo grupo de autores fez a caracterização experimental utilizando os parâmetros obtidos de [30] definidos para o comprimento de onda de $1550nm$. A perda para a estrutura fabricada foi de $1{,}2dB/cm$, para fitas de Au de espessura de $14nm$, largura $16\mu m$, e separação de $8\mu m$, e um comprimento de acoplamento de $4{,}68mm$. O inconveniente desta abordagem está nas dimensões da estrutura, que são muito grandes neste caso.

Em se tratando de ressoadores plasmônicos, embora a geometria tipo fenda possibilite dimensões reduzidas, os fatores de qualidade oferecidos são extremamente baixos em virtude das elevadas perdas [32]-[34]. Em [32], o autor simula inicialmente a estrutura desconsiderando a perda do metal. Dessa forma, foi possível obter um fator $Q = 4000$. No entanto, quando as perdas são consideradas, há uma drástica redução no fator de qualidade, chegando a $Q = 60$ (em [33], os autores obtêm um fator de qualidade $Q = 39$, e para [34], $Q = 166$).

No caso do acoplador direcional plasmônico proposto neste trabalho, decidiu-se pela utilização de três núcleos de guias de ondas (dois dielétricos e um metálico), o que possibilita um aumento considerável na distância de propagação dos modos SPP desta estrutura. Adicionalmente, como poderá ser visto mais à frente, as dimensões são menores que os acopladores direcionais baseados em fita proposto em [31]. O princípio de funcionamento está no fato de que os guias dielétricos funcionam como "reservatórios de energia" para o guia metálico, garantindo, assim, um aumento efetivo da distância propagada [40]. As estruturas são projetadas de modo a garantirem a transferência total de energia entre os guias no comprimento de onda desejado. Para isso, é necessário obter corretamente o comprimento de acoplamento entre os modos, lembrando que o mesmo deve, necessariamente, ser suficientemente menor que a máxima distância de propagação dos modos SPP. Embora seja uma afirmação óbvia, isso requer um elevado número de simulações numéricas de modo a se obter a correta relação entre o confinamento de campo e a distância de propagação, como será discutido mais adiante.

O ressoador analisado neste trabalho apresenta uma geometria em anel, mais precisamente um oval (denominado *race-track*). Esta estrutura apresenta um desafio não

apenas científico em sua modelagem, mas também computacional. A seção transversal adotada nesse caso é denominada do tipo-*rib* (largamente utilizada em guias de ondas ópticos), em virtude desta permitir que o campo óptico seja confinado lateralmente. Confinamento lateral é um aspecto crucial no projeto destas estruturas tendo em vista que o modo deverá percorrer seções curvas de raio muito reduzido. Isso requer não apenas uma minimização das perdas de propagação modal, mas também uma minimização das perdas por radiação nas seções curvas. A abordagem adotada para a redução das perdas de propagação consiste na utilização de camadas de isolação (ou *buffer*) de baixo índice de refração envolvendo o filme metálico, como sugerido originalmente por Kou e Guo [40] e [41], respectivamente. A idéia nesse caso é reduzir a interação do campo óptico com o filme metálico. Isso causa uma redução do confinamento do modo SPP, que precisa ser equacionada utilizando-se materiais dielétricos com índices de refração mais altos para as camadas restantes. O aumento do índice de refração destas camadas é positivo também para a redução das perdas por radiação, uma vez que o modo será mais confinado. Um grande problema observado no projeto desta estrutura é a elevada carga computacional demandada para sua modelagem tri-dimensional (3D). Isso se deve não apenas ao comprimento do dispositivo, mas principalmente a diferentes razões de aspectos das camadas dielétricas (várias centenas de nanômetros) e o filme metálico (dezenas de nanômetros). Assim, optou-se pela sua redução, a partir da estrutura 3D, para uma estrutura bi-dimensional (2D) utilizando o método do índice efetivo, tratado em detalhes mais à frente.

Vale salientar que tanto o acoplador direcional quanto o ressoador são estruturas ainda inéditas na literatura e representam, portanto, a contribuição deste trabalho. A modelagem das estruturas será realizada por meio do aplicativo *COMSOL Multiphysics*, baseado em elementos finitos.

Este trabalho está organizado da seguinte forma. No capítulo 2, são apresentados os estudos teóricos sobre modos plasmônicos, iniciando com a formulação teórica para uma estrutura planar (metal/dielétrico), que é o mais simples possível. Em seguida será feito também um estudo para esferas metálicas mergulhadas em ambiente dielétrico. No capítulo 3, são apresentados os resultados numéricos com enfoque para o diagrama de dispersão de modos SPP e suas distribuições de campo e distância de propagação. Em seguida, são apresentados estudos detalhados dos guia tipo fenda quadrada e tipo V, e guias "*rib*" multicamadas. As figuras de mérito adotadas na análise dos resultados são o fator de confinamento de campo e a distância de propagação. Ainda neste capítulo são

apresentados dois projetos de estruturas visando aplicação em chaveamento óptico (i.e., acoplador óptico) e sensoriamento e/ou filtragem óptica (i.e., ressoador em anel) para aplicações em redes ópticas multiplexadas em comprimento de onda (WDM).

Finalmente, no capítulo 4, são apresentadas as conclusões e as sugestões para trabalhos futuros.

# Capítulo 2 - Plásmons de superfície e suas aplicações

É bem sabido que sistemas de comunicação modernos fazem tratamento de uma enorme quantidade de dados em uma velocidade de processamento elevada. No entanto, para atingir esse objetivo, pesquisadores vêm procurando unir as melhores características de circuitos eletrônicos e ópticos [42] e [43]. Circuitos eletrônicos são minúsculos, mas sua velocidade de operação é limitada. Por outro lado, circuitos ópticos são mais adequados para transmissão de dados em alta velocidade, mas suas dimensões são limitadas pelo limite de difração. Ou seja, a luz propagante não pode ser confinada em uma seção transversal menor que meio comprimento de onda no material utilizado.

A limitação quanto à dimensão de componentes ópticos pode ser virtualmente eliminada com a utilização de um efeito elementar conhecido como plásmon-poláriton de superfície (SPP). Este efeito possibilita o guiamento de onda abaixo de comprimento de onda e, conseqüentemente, a fabricação de componentes ópticos ultra compactos [34]. O termo "plásmon" foi cunhado no ano de 1956 pelos cientistas David Pines e D. Bohm [3]-[4], que teorizaram a característica de perda de energia sofrida por elétrons que viajam rapidamente na superfície de um metal. Eles fizeram uma analogia com a oscilação de plasma em uma descarga gasosa, como observado por Tonks e Langmuir [44]. Conseqüentemente, tal fenômeno de oscilação foi batizado de “plásmon”.

Já o termo plásmon de superfície (SP), nome atribuído por Stern e Ferrell [45], refere-se à plásmons confinados em uma interface metal-dielétrico. Este efeito foi demonstrado experimentalmente pelos cientistas Powell e Swan [46] e [47]. Sendo os SP um tipo de excitação elementar, o seu forte acoplamento com um campo eletromagnético (fótons) dá origem à outra quasepartícula, o poláriton. Portanto, os termos plásmon de superfície e Plásmon-Poláritons de superfície (SPPs) referem-se ao mesmo efeito, e são gerados pela oscilação coletiva entre fótons e elétrons. O fenômeno SP acontece quando dois materiais cujas partes reais de suas respectivas constantes dielétricas apresentam sinais opostos entre si são colocados em contado. Essa interface pode ser constituída por metais nobres ou materiais com permissividade negativa, em contato com vácuo ($\varepsilon_{ar} = 1.0$) ou com outros materiais com constante dielétrica positiva (como a sílica, por exemplo).

Outra característica marcante desse efeito é a ressonância de plásmon de superfície (SPR). Este fenômeno ocorre principalmente em nanopartículas ou superfícies curvas. A forte ressonância ocorre aproximadamente no comprimento de onda $\lambda$ que

obedece à condição de Fröhlich, a qual será discutida mais à frente. Porém, esta condição é válida para partículas muito menores que $\lambda$, uma vez que os elétrons superficiais são coerentes, fazendo com que o campo seja realçado de forma intensa [48].

## 2.1 - Excitação de plásmon-Poláriton de superfície em uma interface plana

Como se sabe, a geração de SPP vem encontrando diversas aplicações de interesse científico e tecnológico, tais como a possibilidade de se projetar componentes ópticos com dimensões abaixo do limite de difração. Além disso, esse efeito é sensível à mudança de índice de refração do dielétrico, e também possibilita o realce do campo eletromagnético em uma dada região. Isso se constitui em um aspecto interessantíssimo para vários campos da ciência, como por exemplo, em biomédica, na análise de compostos químicos, na terapia de câncer, em microscopia óptica de alta resolução, litografia de resolução nanométrica, etc [49]. A título de ilustração, pode-se citar a terapia plasmônica contra o câncer [50], que são baseadas em partículas dielétricas banhadas em metal, quando essas partículas são injetadas na corrente sangüínea, elas alojariam num tumor em rápido crescimento. Se um laser de infravermelho próximo fosse apontado para aquela área, o feixe de laser atravessaria a pele e induziria oscilações ressonantes de elétrons, aquecendo e matando as células do tumor sem ferir o tecido saudável ao redor. Outro dispositivo que também vem ganhando grande atenção da comunidade científica é o guia de onda plasmônico. Esta estrutura possibilita um grande confinamento dos modos guiados, além de apresentar tamanho reduzido em relação aos guias de ondas ópticos dielétricos convencionais. Esses guias serão discutidos em profundidade no capítulo 3.

Para que esta quasipartícula (o SPP) se propague ao longo de uma superfície, é necessário que os campos elétricos estejam no mesmo plano de propagação, possibilitando a interação de fótons e elétrons. A seguir será realizado um estudo teórico do assunto partindo das equações de Maxwell,

$$\nabla \cdot D = \rho_{ext} \tag{2.1-1}$$

$$\nabla \cdot B = 0 \tag{2.1-2}$$

$$\nabla \times E = -\frac{\partial B}{\partial t} \tag{2.1-3}$$

$$\nabla \times H = J_{ext} + \frac{\partial D}{\partial t} \tag{2.1-4}$$

Será utilizada para este estudo a estrutura mais simples possível, ou seja, uma

interface formada pelo contado de um metal e um dielétrico, como ilustrado na Fig.2.1.1.

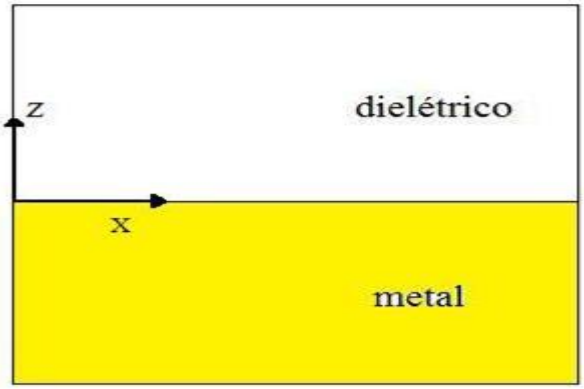



*Figura 2.1.1.* Geometria para propagação de SPPs em uma interface metal-dielétrico.

As equações (2.1-3) e (2.1-4) podem ser expandidas convenientemente de modo a se obter a seguinte equação de onda,

$$\nabla \times \nabla \times E = -\mu_0 \frac{\partial^2 D}{\partial t^2} \tag{2.1-5}$$

Usando as identidades vetoriais $\nabla \times \nabla \times E = \nabla(\nabla \cdot E) - \nabla^2 \cdot E$ e $\nabla \cdot (\varepsilon E) \equiv E \cdot \nabla\varepsilon + \varepsilon \nabla \cdot E$, e supondo ausência da carga externa, (2.1-1) reduz-se a $\nabla \cdot D = 0$. Com isso, pode-se obter a seguinte expressão:

$$\nabla\left(-\frac{1}{\varepsilon} E \cdot \nabla\varepsilon\right) - \nabla^2 E = -\frac{\varepsilon}{c^2}\frac{\partial^2 E}{\partial t^2} \tag{2.1-6}$$

Desprezando a variação espacial de $\varepsilon$ (solução escalar), tem-se:

$$\nabla^2 E - \frac{\varepsilon}{c^2}\frac{\partial^2 E}{\partial t^2} = 0 \tag{2.1-7}$$

Simplificando (2.1-7) um passo a mais, e sabendo que $\frac{\partial}{\partial t} = j\omega$, chega-se à equação de onda de Helmholtz:

$$\nabla^2 E - k_0^2 \varepsilon E = 0 \tag{2.1-8}$$

onde $k_0 = \frac{\omega}{c}$ é o vetor de propagação no vácuo. O problema definido na Fig. 2.1.1 pode ser resolvido de maneira unidimensional. Sendo assim, pode-se supor variação da permissividade apenas ao longo de $z$ ($\varepsilon = \varepsilon(z)$). O campo elétrico é suposto apresentar a seguinte variação $E(x, y, z) = E(z)e^{j\beta x}$, onde $\beta$ é a constante de propagação longitudinal.

Substituindo a dependência temporal $\frac{\partial}{\partial t} = j\omega$ em (2.1-3)-(2.1-4), e expandindo, tem-se:

$$\frac{\partial E_z}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial z} = j\omega\mu_0 H_x \tag{2.1-11a}$$

$$\frac{\partial E_x}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial x} = j\omega\mu_0 H_y \tag{2.1-11b}$$

$$\frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial y} = j\omega\mu_0 H_z \tag{2.1-11c}$$

$$\frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z} = -j\omega\varepsilon_0\varepsilon E_x \tag{2.1-11d}$$

$$\frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial x} = -j\omega\varepsilon_0\varepsilon E_y \tag{2.1-11e}$$

$$\frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} = -j\omega\varepsilon_0\varepsilon E_z \tag{2.1-11f}$$

Para a presente estrutura, a direção de propagação é ao longo da direção $x$, e por não haver confinamento ao longo da direção $y$, e portanto não há variação de campo, tem-se que $\frac{\partial}{\partial y} \equiv 0$. Dessa forma, de (2.1-11), obtém-se:

$$\frac{\partial E_y}{\partial z} = -j\omega\mu_0 H_x \tag{2.1-12a}$$

$$\frac{\partial E_x}{\partial z} - j\beta E_z = j\omega\mu_0 H_y \tag{2.1-12b}$$

$$j\beta E_y = j\omega\mu_0 H_z \tag{2.1-12c}$$

$$\frac{\partial H_y}{\partial z} = j\omega\varepsilon_0\varepsilon E_x \tag{2.1-12d}$$

$$\frac{\partial H_x}{\partial z} - j\beta H_z = -j\omega\varepsilon_0\varepsilon E_y \tag{2.1-12e}$$

$$j\beta H_y = -j\omega\varepsilon_0\varepsilon E_z \tag{2.1-12f}$$

É possível, agora, reescrever (2.1-12) para as polarizações $TM$ (campo magnético transversal, componentes $E_x, E_z$ e $H_y$) e $TE$ (campo elétrico transversal, componentes $H_x, H_z$ e $E_y$). Para modos $TM$, as Eq. (2.1-12) são reduzidas para:

$$E_x = -j\frac{1}{\omega\varepsilon_0\varepsilon}\frac{\partial H_y}{\partial z} \tag{2.1-13a}$$

$$E_z = -\frac{\beta}{\omega\varepsilon_0\varepsilon}H_y \tag{2.1-13b}$$

e a equação de onda para modos *TM* resulta em:

$$\frac{\partial^2 H_y}{\partial z^2} + (k_0^2\varepsilon - \beta^2)H_y = 0 \tag{2.1-13c}$$

Analogamente, para modos TE, tem-se:

$$H_x = j\frac{1}{\mu_0\omega}\frac{\partial E_y}{\partial z} \tag{2.1-14a}$$

$$H_z = \frac{\beta}{\mu_0\omega}E_y \tag{2.1-14b}$$

e a equação de onda para modos *TE* resulta em:

$$\frac{\partial^2 E_y}{\partial z^2} + (k_0^2\varepsilon - \beta^2)E_y = 0 \tag{2.1-14c}$$

A partir de agora será realizado o estudo da propagação de SPPs na estrutura ilustrada na Fig. 2.1.1, a qual apresenta um material dielétrico definido por uma constante dielétrica positiva $\varepsilon_2$ para $z > 0$, e um metal com constante dielétrica $\varepsilon_1\ (\omega)$ para $z < 0$. A constante dielétrica do metal pode ser definida por qualquer um dos modelos materiais apresentados nas seções anteriores. Dessa forma, utilizando-se a equação de onda para modos *TM*, resulta nas seguintes soluções:

$$H_y(z) = A_2 e^{j\beta x}\, e^{-k_2 z} \tag{2.1-15a}$$

$$E_x(z) = jA_2\frac{1}{\omega\varepsilon_0\varepsilon_2}k_2 e^{j\beta x}\, e^{-k_2 z} \tag{2.1-15b}$$

$$E_z(z) = -A_2\frac{\beta}{\omega\varepsilon_0\varepsilon_2}e^{j\beta x}\, e^{-k_2 z} \tag{2.1-15c}$$

para $z > 0$, e

$$H_y(z) = A_1 e^{j\beta x}\, e^{k_1 z} \tag{2.1-16a}$$

$$E_x(z) = -jA_1\frac{1}{\omega\varepsilon_0\varepsilon_1}k_1 e^{j\beta x}\, e^{k_1 z} \tag{2.1-16b}$$

$$E_z(z) = -A_1\frac{\beta}{\omega\varepsilon_0\varepsilon_1}e^{j\beta x}\, e^{k_1 z} \tag{2.1-16c}$$

para $z < 0$. $k_i \equiv k_{z,i}(i = 1,2)$ é a componente do vetor de onda perpendicular à interface dos dois meios. Seu valor recíproco, $\hat{z} = 1/|k_z|$, define o comprimento de decaimento dos campos perpendiculares à interface, o qual determina o confinamento da onda. A continuidade de $H_y$ e $\varepsilon_i E_z$ ao longo da interface requer que $A_1 = A_2$, conseqüentemente $k_1 = -k_2$, e portanto,

$$\frac{k_2}{k_1} = -\sqrt{\frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1}} \tag{2.1-17}$$

Nota que com a convenção de sinais nos expoentes das Eq. (2.1-15 e 2.1-16), a condição para que a onda de superfície seja confinada exige que $Re[\varepsilon_1] < 0$ e $\varepsilon_2 > 0$, ou seja, *a onda de superfície só existe na interface entre dois materiais contanto que estes*

*materiais apresentem a parte real de suas respectivas permissividades com sinais opostos.* As constantes de propagação nos meios são descritas da seguinte forma

$$k_1^2 = \beta^2 - k_0^2\varepsilon_1 \tag{2.1-18a}$$

$$k_2^2 = \beta^2 - k_0^2\varepsilon_2 \tag{2.1-18b}$$

Combinando (2.1-17) e (2.1-18), é obtida a relação de dispersão para *SPs* propagando-se em uma interface metal-dielétrico, ou seja,

$$k_{sp} = \beta = k_0\sqrt{\frac{\varepsilon_1\varepsilon_2}{\varepsilon_1+\varepsilon_2}} \tag{2.1-19}$$

Esta expressão é válida tanto para materiais com perdas quanto sem perdas.

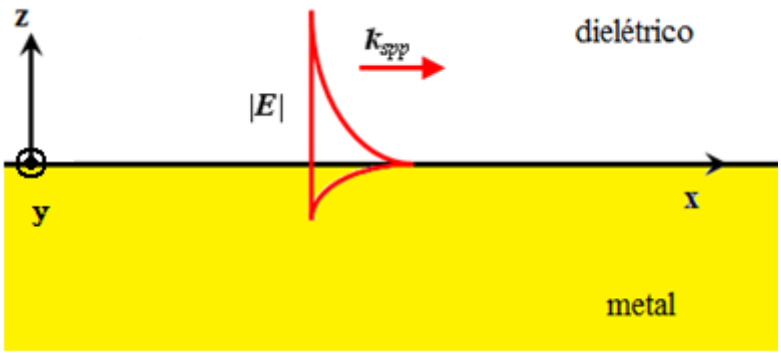



*Figura 2.1.2.* Propagação de SPPs em uma interface metal-dielétrico.

Analisando, agora, a propagação de modos *TE*, as soluções para os campos $E_y(z), H_x(z)$ *e* $H_z(z)$ nos dois meios são descritas da seguinte forma:

$$E_y(z) = A_2 e^{j\beta x}\, e^{-k_2 z} \tag{2.1-20a}$$

$$H_x(z) = -jA_2 \frac{1}{\omega\mu_0} k_2 e^{j\beta x}\, e^{-k_2 z} \tag{2.1-20b}$$

$$H_z(z) = A_2 \frac{\beta}{\omega\mu_0} e^{j\beta x}\, e^{-k_2 z} \tag{2.1-20c}$$

para $z > 0$, e

$$E_y(z) = A_1 e^{i\beta x}\, e^{k_1 z} \tag{2.1-21a}$$

$$H_x(z) = jA_1 \frac{1}{\omega\mu_0} k_1 e^{j\beta x}\, e^{k_1 z} \tag{2.1-21b}$$

$$H_z(z) = A_1 \frac{\beta}{\omega\mu_0} e^{j\beta x}\, e^{k_1 z} \tag{2.1-21c}$$

para $z < 0$. A relação de continuidade dos campos $E_y$ *e* $H_x$ na interface *z=0*, resulta em

$A_1 = A_2$, e

$$A_1(k_1 + k_2) = 0 \tag{2.1-22}$$

O confinamento de campo na superfície exige $Re[k_1] > 0\ e\ Re[k_2] > 0$. Essa condição só será satisfeita se $A_1 = 0$, de modo que $A_1 = A_2 = 0$. Assim, não existe modo de superfície para polarização *TE*. Dessa forma, pode-se concluir que para existência de modos de SPPs, é necessário que o campo magnético seja perpendicular à direção de propagação e paralelo a interface que separa metal e dielétrico.

Agora será analisada a relação de dispersão (2.1-19) e a distância de propagação, sendo esta última definida pela parte imaginária de $k_{sp}$, ou seja,

$$l_{sp} = \frac{1}{2Im[k_{sp}]}. \tag{2.1-23}$$

Para a função dielétrica do metal será utilizado o modelo de elétrons livres descrito anteriormente. Duas situações serão analisadas, 1) considerando a prata como o metal ($\varepsilon_1(\omega)$) e ar como o dielétrico ($\varepsilon_{2b} = 1.0$), e 2) considerando a prata como o metal ($\varepsilon_1(\omega)$) e sílica fundida como o dielétrico ($\varepsilon_{2b} = 2.25$). Os resultados são apresentados na Fig. 2.1.3, onde as linhas pontilhadas representam a propagação no dielétrico (linha de luz), e as linhas sólidas representam o efeito de *SPPs* ($k_{sp}$). Pode-se observar ainda nessa figura que existe uma freqüência máxima que o vetor de propagação pode atingir, e este valor varia de acordo com o tipo de dielétrico que está interagindo com o metal. Este valor de freqüência será denominado de freqüência de plásmon de superfície $\omega_{sp}$, a qual pode ser calculada utilizando a freqüência de plasma e o valor de $\varepsilon$ do dielétrico, ou seja,

$$\omega_{sp} = \frac{\omega_p}{\sqrt{1+\varepsilon_2}}. \tag{2.1-24}$$

Observe na Fig. 2.1.3 a linha de luz do ar (linha sólida azul) não coincide com a curva de dispersão de plásmon (linha azul tracejada), isso significa que não existe a oscilação coletiva entre elétrons e fótons. Logo, a luz que incide diretamente na superfície do metal não pode ser eficientemente acoplada ao plásmon de superfície. Uma maneira de se acoplar a luz na superfície de metal consiste em utilizar um prisma, geralmente de vidro, onde um filme metálico é depositado em sua base. Esta configuração é comumente conhecida como Kretschmann-Raether [10] e [11].

As faixas de freqüências $\omega_1$ e $\omega_2$ são as regiões proibidas de $k_{sp_Ar/Ag}$ e $k_{sp_Sílica/Ag}$, respectivamente. Nestas regiões o vetor de propagação é puramente imaginário e, conseqüentemente, não existe propagação para modos plasmônicos.

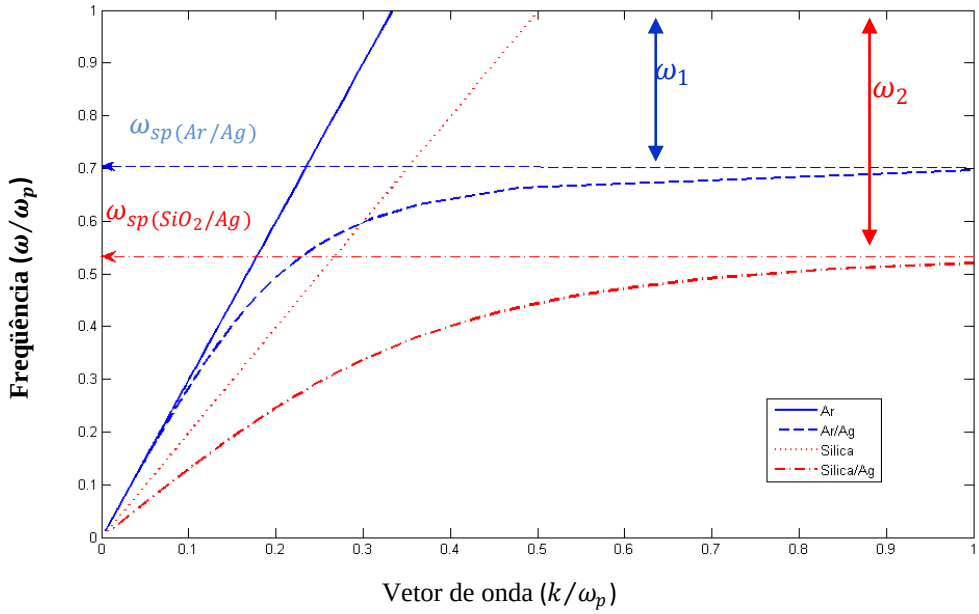



*Figura 2.1.3.* Relação de dispersão de SPPs em uma interface metal-dielétrico. O metal é representado pelo modelo de *Drude*, porém com o constante de amortecimento excluído. Linha de luz do ar (azul sólida), linha de luz da sílica (vermelha pontilhada), vetores de propagação de plásmon de superfície $k_{sp_Ar/Ag}$ (azul pontilhada) e $k_{sp_Sílica/Ag}$ (vermelha tracejada e pontilhada).

## 2.2 - Excitações de SPPs em nanopartículas

Nesta seção são discutidos alguns dos conceitos relativos à excitação de SPPs em partículas de dimensões nanométricas, ou nanopartículas. Em se tratando de nanopartículas isoladas, a excitação de plásmons nesta estrutura tem um caráter localizado, ou seja, não propagante. Isso produz um segundo tipo de excitação denominado plásmon de superfície localizado (LSP). Esses modos surgem naturalmente a partir do problema de espalhamento de nanopartículas condutoras com dimensões abaixo do comprimento de onda sujeitas a um campo eletromagnético oscilante. A superfície curva da partícula exerce uma efetiva força restauradora nos elétrons deslocados, de modo que a ressonância pode surgir levando à amplificação de campo tanto no interior da partícula quanto na região próxima ao exterior da partícula. Essa ressonância é denominada de plásmon de superfície localizada (LSP). Outra conseqüência da superfície curva é que a ressonância de plásmon pode ser excitada diretamente utilizando uma fonte luminosa, diferente da excitação dos modos de SPPs desenvolvido por Otto et al. [10] e [11], onde a técnica de casamento de fase tem que ser aplicada.

No presente trabalho será explorada a física de LSP estudando a interação de

nanopartículas metálicas com ondas eletromagnéticas com o objetivo de obter sua ressonância. Inicialmente, isso será feito com as partículas muito menores que o comprimento de onda a ser utilizado. Nesse caso, as oscilações dos elétrons superficiais da partícula de metal tornam-se mais coerentes e a freqüência de ressonância obedece à condição de Fröhlich definida mais adiante. A seguir será discutido o acoplamento entre plásmons localizados.

O fenômeno de LSP foi explorado mais de mil anos atrás, porém sem fundamento teórico, onde nanopartículas metálicas de ouro e prata eram utilizadas com o objetivo de se obter coloração de objetos tais como vitrais de igreja e, mais marcantemente, a taça de Licurgo (objeto de arte que se tornou famoso por apresentar coloração diferente quando iluminado por dentro ou por fora) [51]. Esses metais apresentam freqüências de ressonância na região visível do espectro eletromagnético produzindo, como resultado, cores brilhantes quando iluminados por uma fonte de luz. Pesquisas recentes vêm demonstrando novas aplicações para LSP, tais como intensificação de um sinal óptico local [52]-[54] e sensoriamento óptico [55].

A interação de uma partícula com diâmetro *2a* com onda eletromagnética pode ser analisada utilizando uma simples *aproximação quase-estática*, contanto que a dimensão da partícula seja muito menor que o comprimento de onda, isto é, $2a \ll \lambda$. Nesse caso, a fase do campo eletromagnético oscilando harmonicamente é praticamente constante sobre o volume da partícula. Assim, é possível calcular a distribuição espacial de campo considerando como um problema simplificado de partícula em um campo eletrostático. Esta aproximação de primeira-ordem (de uma expansão de espalhamento total) descreve as propriedades ópticas de nanopartículas suficientemente pequenas. Para facilitar a análise, as nanopartículas serão supostas como esféricas, com dimensões abaixo de $100nm$.

Como um tratamento analítico simples, considere uma esfera homogênea e isotrópica de raio $a$, localizada na origem de um meio no qual apresenta campo elétrico estático e uniforme $E = E_0\hat{z}$, como mostrado na Fig. 2.2.1. Suponha, ainda, que o meio externo seja isotrópico e sem perdas, com a constante dielétrica $\varepsilon_{sur}$, e que as linhas de campo sejam paralelas à direção $z$ e que estejam a uma distância suficiente da esfera. Nesta situação, a resposta dielétrica da esfera pode ser descrita pela função dielétrica $\varepsilon_m(\omega)$, da qual será utilizado simplesmente $\varepsilon_m$ como a permissividade complexa para facilitar a notação.

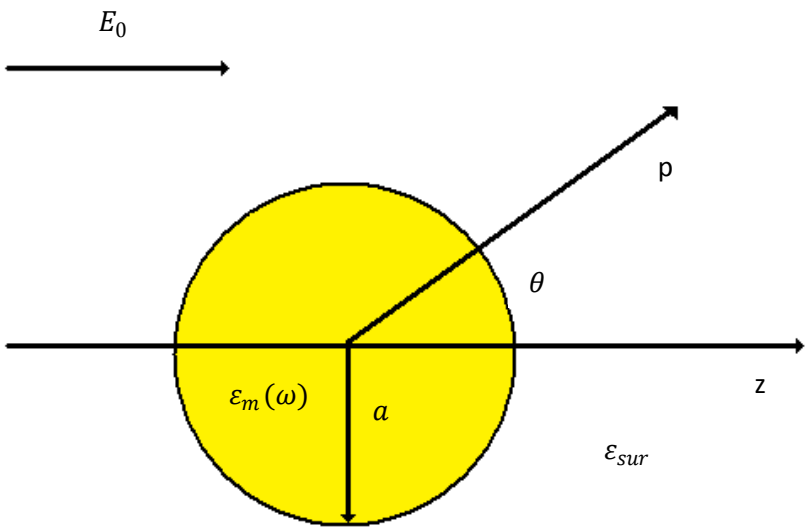



*Figura 2.2.1.* Esquema de uma esfera homogênea posicionada em um campo eletrostática no meio dielétrico.

Na aproximação eletrostática, busca-se uma solução da equação de Laplace para o potencial, $\nabla^2\Phi = 0$, que possibilite o cálculo de campo elétrico $E = -\nabla\Phi$. Devido à simetria azimutal do problema, a solução geral é escrita da seguinte forma:

$$\Phi(r,\theta) = \sum_{l=0}^{\infty}\left[A_l r^l + B_l r^{-(l+1)}\right] P_l(\cos\theta), \tag{2.2-1}$$

onde $P_l(\cos\theta)$ são polinomiais de Legendre [56] de ordem $l$ e $\theta$ é o ângulo entre a posição do vetor $P$ e o eixo $z$. Devido à exigência de que os potenciais eletrostáticos permaneçam finitos na origem, as soluções de potencial eletrostático interno $\Phi_{in}$ e externo $\Phi_{out}$ da esfera podem ser escritas como

$$\Phi_{in}(r,\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} A_l r^l P_l(\cos\theta) \text{ e} \tag{2.2-2}$$

$$\Phi_{out}(r,\theta) = \sum_{l=0}^{\infty}\left[B_l r^l + C_l r^{-(l+1)}\right] P_l(\cos\theta). \tag{2.2-3}$$

Os coeficientes $A_l$, $B_l$ e $C_l$ podem ser determinados utilizando-se as condições de contorno em $r \to \infty$ e na superfície da esfera em $r = a$. Para $\Phi_{out} \to -E_0 z = -E_0 r\cos\theta$ quando $r \to \infty$, $B_1 = -E_0$, e $B_l = 0$ para $l \neq 1$. Os demais coeficientes $A_l$ e $C_l$ são definidos utilizando a segunda condição de contorno, que é a continuidade das componentes tangenciais do campo elétrico, ou seja:

$$-\frac{1}{a}\frac{\partial\Phi_{in}}{\partial\theta}\bigg|_{r=a} = -\frac{1}{a}\frac{\partial\Phi_{out}}{\partial\theta}\bigg|_{r=a}. \tag{2.2-4}$$

Da igualdade entre as componentes normais do vetor deslocamento de campo, obtém-se:

$$-\varepsilon_0 \varepsilon_m \left.\frac{\partial \Phi_{in}}{\partial r}\right|_{r=a} = -\varepsilon_0 \varepsilon_{sur} \left.\frac{\partial \Phi_{out}}{\partial r}\right|_{r=a}. \tag{2.2-5}$$

Como a aproximação utilizada é de primeira-ordem, tem-se que $l$=1. Assim, $A_l = C_l = 0$ quando $l \neq 1$. Os coeficientes $A_1$ e $C_1$ são determinados resolvendo-se (2.2-4) e (2.2-5). Assim, são obtidas as equações de potencial eletrostático interno e externo,

$$\Phi_{in} = -\frac{3\varepsilon_{sur}}{\varepsilon_m + 2\varepsilon_{sur}} E_0 r \cos\theta \tag{2.2-6a}$$

$$\Phi_{out} = -E_0 r \cos\theta + \frac{\varepsilon_m - \varepsilon_{sur}}{\varepsilon_m + 2\varepsilon_{sur}} E_0 \frac{a^3}{r^2} \cos\theta \tag{2.2-6b}$$

A interpretação física de (2.2-6b) é muito interessante, porque o potencial eletrostático externo é descrito pela superposição de campo aplicado à esfera e de um dipolo localizado no centro da partícula. É possível reescrever $\Phi_{out}$ introduzindo-se o termo de momento de dipolo $p$, ou seja,

$$\Phi_{out} = -E_0 r \cos\theta + \frac{p \cdot \boldsymbol{r}}{4\pi\varepsilon_0 \varepsilon_{sur}\, r^3} \text{ e} \tag{2.2-7a}$$

$$p = 4\pi\varepsilon_0 \varepsilon_{sur}\, a^3 \frac{\varepsilon_m - \varepsilon_{sur}}{\varepsilon_m + 2\varepsilon_{sur}} E_0. \tag{2.2-7b}$$

Onde $\boldsymbol{r} = r\cos\theta$.

Portanto, pode-se observar que o campo aplicado induz um momento de dipolo com magnitude proporcional a $|E_0|$ no interior da esfera. Se for introduzido o termo polarizabilidade $\alpha$, de tal forma que $p = \varepsilon_0 \varepsilon_{sur}\, \alpha E_0$, a equação de polarizabilidade torna-se:

$$\alpha = 4\pi a^3 \frac{\varepsilon_m - \varepsilon_{sur}}{\varepsilon_m + 2\varepsilon_{sur}}. \tag{2.2-8}$$

A Eq. (2.2-8) representa a polarizabilidade de uma pequena esfera com diâmetro menor que o comprimento de onda utilizando a aproximação eletrostática. Por meio da equação de polarizabilidade, o realce máximo de campo ocorre quando a partícula está no estado de ressonância, o que pode ser observado quando $|\varepsilon_m + 2\varepsilon_{sur}|$ é mínimo. No caso da parte imaginária da permissividade do metal variar muito pouco, ou lentamente em torno da ressonância, (2.2-8) pode ser simplificada da seguinte forma,

$$Re[\varepsilon_m(\omega)] = -2\varepsilon_{sur}. \tag{2.2-9}$$

Esta relação é denominada de *condição de Fröhlich*, e é associada ao modo (em um campo oscilante) de dipolo do plásmon de superfície para uma nanopartícula metálica. Segundo o critério de Fröhlich, para uma esfera envolvida por ar e apresentando função dielétrica $\varepsilon_m(\omega)$ definida pelo modelo de Drude, com freqüência $\omega_0 = \omega_p/\sqrt{3}$. A Eq.

(2.2-9) manifesta ainda a forte dependência da freqüência de ressonância sobre o dielétrico ambiente: vale ressaltar que a freqüência de ressonância se deslocará para o vermelho quando a permissividade do meio externo aumentar. Nota-se que a magnitude de $\alpha$ na ressonância é limitada pelo denominador porque $Im[\varepsilon_m\ (\omega)] \neq 0$.

As equações de distribuições de campo elétrico $E = -\nabla\Phi$ podem ser desenvolvidas com base em (2.2-6), ou seja,

$$E_{in} = \frac{3\varepsilon_{sur}}{\varepsilon_m + 2\varepsilon_{sur}} E_0 \tag{2.2-10a}$$

$$E_{out} = E_0 + \frac{3n(n \cdot p) - p}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon_{sur}} \frac{1}{r^3}. \tag{2.2-10b}$$

Como é de se esperar, quando o denominador de (2.2-8) tende a zero (condição de Frölich), o que implica em $\alpha \to \infty$, haverá um realce ressonante tanto de campo interno quanto de campo produzido pelo dipolo. Este significante realce de campo na ressonância de plásmon é muito útil em aplicações de nanopartículas metálicas tais como desenvolvimento de dispositivos ópticos, sensores de alta precisão etc.

# Capítulo 3 – Resultados numéricos

Este capítulo apresenta de forma detalhada resultados numéricos de diversas estruturas baseadas nos conceitos discutidos no capítulo anterior. Será dado um especial enfoque na nomenclatura modal para guias plasmônicos, uma vez que isso irá afetar a interpretação de todos os resultados posteriores. Assim, este capítulo está organizado da seguinte forma. A seção 3.1 tem por objetivo apresentar a nomenclatura modal adotada, a qual baseia-se nas respectivas distribuições de campo. Em seguida, na seção 3.2, são tratados os guias plasmônicos (do tipo fendas e sulcos), assim como de guias plasmônicos multicamadas. Posteriormente, na seção 3.3, são discutidos os resultados obtidos para acopladores direcionais plasmônicos de grande interesse em chaveamento óptico. Finalmente, na seção 3.4, são apresentados os resultados obtidos para ressoadores em anéis. Os resultados apresentados neste capítulo foram obtidos por meio do software *COMSOL Multiphysics*.

## 3.1 - Guias plasmônicos planares

Em freqüências ópticas muitas metais podem ser modelados como um gás de elétrons, apresentando uma permissividade equivalente na qual as partes reais e imaginárias são negativas. Como discutido no capítulo 2, uma interface entre dois materiais cujas dimensões são semi-infinitas apresentando permissividades com sinais opostos entre si permitem o guiamento de ondas com polarização TM. Na prática, um filme de metal com uma dada espessura, delimitado por dielétricos tanto na parte superior quanto inferior, se constitui em uma estrutura apropriada para guiamento óptico planar. Se o dielétrico envolvendo o metal é o mesmo, tem-se uma estrutura simétrica em torno da direção de propagação. Vale salientar que estruturas simétricas são particularmente interessantes do ponto de vista de excitação de modos plásmons, como será discutido a seguir.

Quando o filme de metal possui espessura suficientemente fina, os modos SPPs guiados pelas interfaces tornam-se acoplados. Essa interação modal ocorre principalmente nos extremos do filme (quando o filme metálico apresenta largura finita), e também pela penetração de campo através do filme metálico. Essa interação dá origem aos denominados supermodos, que exibem dispersão em função da espessura de metal. Geralmente, apenas dois modos puramente TM podem ser guiados em uma estrutura

planar onde a largura do filme metálico é infinita. As componentes transversais de campo elétrico desses modos são normais às interfaces e apresentam uma distribuição espacial de campo simétrica (modos simétricos) ou anti-simétrica (modos anti-simétricos) através do guia de onda. Por esse motivo, estes modos são denominados de modos $s_b$ (simétricos) e $a_b$ (anti-simétricos). Modos $s_b$ apresentam pequena atenuação e, por isso, são chamados de modos Plásmon-Poláritons de superfície de longa distância (LRSPP). Modos $a_b$ apresentam, por sua vez, maior interação de campo dentro do filme metálico que os modos $s_b$, o que resulta em maiores perdas de propagação. Por outro lado, esta maior interação de campo com o metal também resulta em um considerável aumento do confinamento modal. Esse comportamento nos permite prever a existência de um importante compromisso entre distância de propagação (inversamente proporcional à parte imaginária da constante de propagação, ou seja, às perdas) e confinamento modal. Portanto, a escolha da excitação da estrutura (que modo será excitado pela fonte óptica) irá representar um importante papel no desempenho da estrutura. Dependendo do tipo de aplicação, particularmente quando grandes distâncias de propagação são requeridas, a opção mais adequada para excitação modal deverá recair por modos $s_b$. Isso é particularmente importante em dispositivos ópticos para telecomunicações, onde filmes metálicos são comumente empregados em polarizadores ópticos [57], e para transmissão de dados [58].

Embora guias metálicos de largura infinita venham sendo investigados intensamente na literatura [58]-[63], tal estrutura se mostra muito pouco eficiente do ponto de vista de confinamento modal, já que isso ocorre apenas no sentido normal à interface. Filmes metálicos de largura finita, por outro lado, são mais adequados para esse fim, pois permitem o confinamento em toda a seção transversal. Isso torna esse tipo de estrutura particularmente útil para aplicações de transmissão de dados e chaveamento [58] e [66], ou para a construção de componentes passivos tais como acopladores e ressoadores ópticos [31]-[32]. Na próxima seção são apresentados resultados numéricos para estruturas planares tendo como base o excelente trabalho publicado por Berini [37], onde foi sugerida a nomenclatura mais utilizada para modos plásmons em estruturas simétricas. Em se tratando de estruturas assimétricas, não há uma definição apropriada tendo em vista que o comportamento modal se torna muito imprevisível.

### 3.1.1 - Nomenclatura para modos em guias plasmônicos

A estrutura analisada nesta seção é ilustrada na Fig. 3.1.1. Ela é composta por um filme de metal de largura $w$ e espessura $t$, com permissividade $\varepsilon_{r,m}$, envolvida em um ambiente dielétrico de permissividade $\varepsilon_{r,2}$ puramente real. Como descrito em [37], esta estrutura apresenta quatro modos fundamentais, os quais são classificados de acordo com suas respectivas distribuições espaciais da seguinte forma: $\boldsymbol{ss_b^n}$, $\boldsymbol{sa_b^n}$, $\boldsymbol{as_b^n}$ e $\boldsymbol{aa_b^n}$, onde a letra $\boldsymbol{s}$ identifica modos simétricos e $\boldsymbol{a}$ anti-simétricos. Por exemplo, o modo $\boldsymbol{sa_b^n}$ é simétrico na direção *x* e assimétrico na direção *y*, com a letra $\boldsymbol{b}$ indicando que este modo é puramente confinado e $\boldsymbol{n}$ representando o número de máximos de campo ao longo da largura do filme. Neste tipo de estrutura, a denominação modal é feita com base na distribuição espacial da componente de campo $E_y$, por ser esta a que carrega mais energia. A seguir são apresentadas as distribuições de campo para os quatro modos fundamentais.

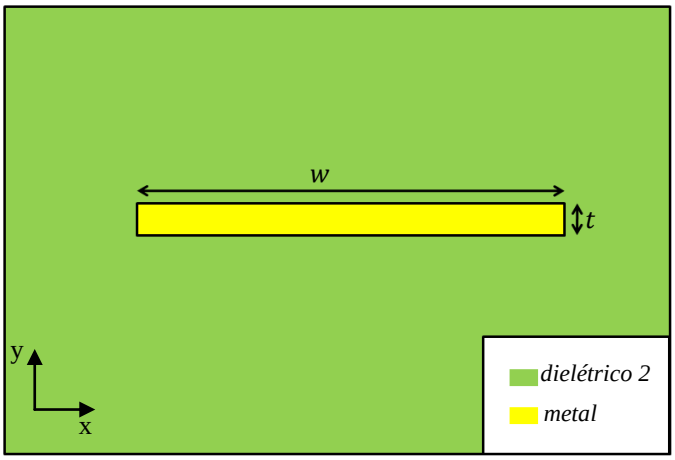



*Figura 3.1.1.* Estrutura de filme metálico considerada neste trabalho. O metal apresenta espessura *t*, largura *w*, e permissividade $\varepsilon_{r,m}$. O ambiente é um meio homogêneo com permissividade $\varepsilon_{r,2}$.

### 3.1.2 - Definição modal: modos simétricos e anti-simétricos

Nesta seção são apresentados resultados de simulação numérica obtidas com o software *COMSOL Multiphysics*. Este aplicativo baseado em elementos finitos permite simulações vetoriais dos mais variados tipos de estruturas para propagação eletromagnética.

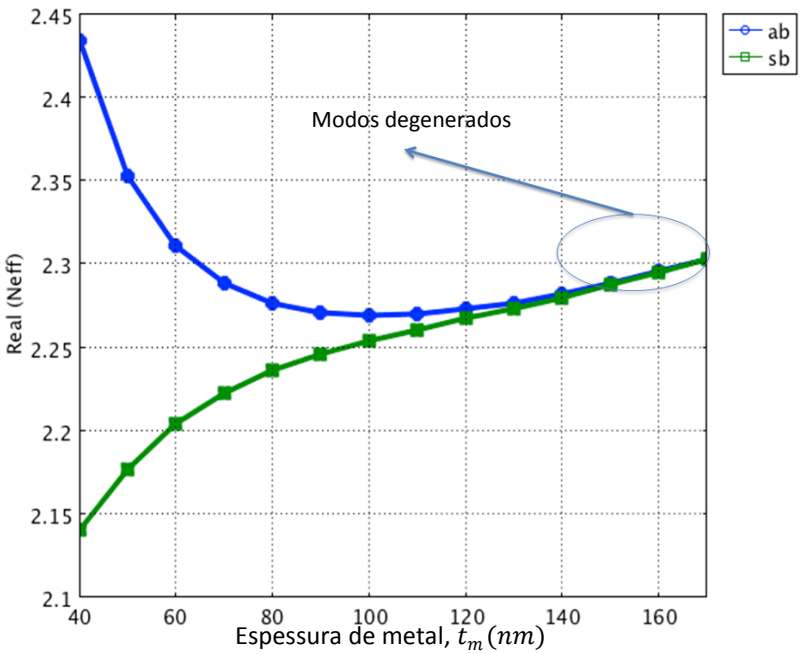
Por conveniência, considere inicialmente a estrutura ilustrada na Fig. 3.1.1, supondo que a largura do filme metálico (de prata, Ag) seja infinita, isto é, $w \to \infty$ [60]

Nesta situação, apenas dois modos ($s_b$ e $a_b$) puramente TM são suportados pela estrutura ($E_x = H_y = H_z = 0$, e componentes transversais $E_y$ e $H_x$ exibindo assimetria ou simetria em relação ao eixo *x*). As características de dispersão desses modos são mostradas na Fig. 3.1.2 em função da espessura do filme metálico, onde foi utilizado o comprimento de onda $\lambda_0 = 633nm$. A permissividade para o filme de prata é, demonstrada na [37], $\varepsilon_{r,m} = -19 - j0{,}53$, enquanto que para a região dielétrica é $\varepsilon_{r,2} = 4$. Os modos excitados nesta estrutura são criados pelo acoplamento dos plásmons nas interfaces superior e inferior do filme metálico. À medida que a espessura do metal aumenta, esses modos confinados tendem a se tornar modos degenerados (os índices efetivos dos modos $s_b$ e $a_b$ tendem a se tornar iguais) e, ao mesmo tempo, desacoplados. As partes reais e imaginárias dos índices efetivos modais descritos na Fig. 3.1.2, são obtidas a partir de suas respectivas constantes de propagação normalizadas pelo vetor de onda no espaço livre, $k_0$, ou seja,

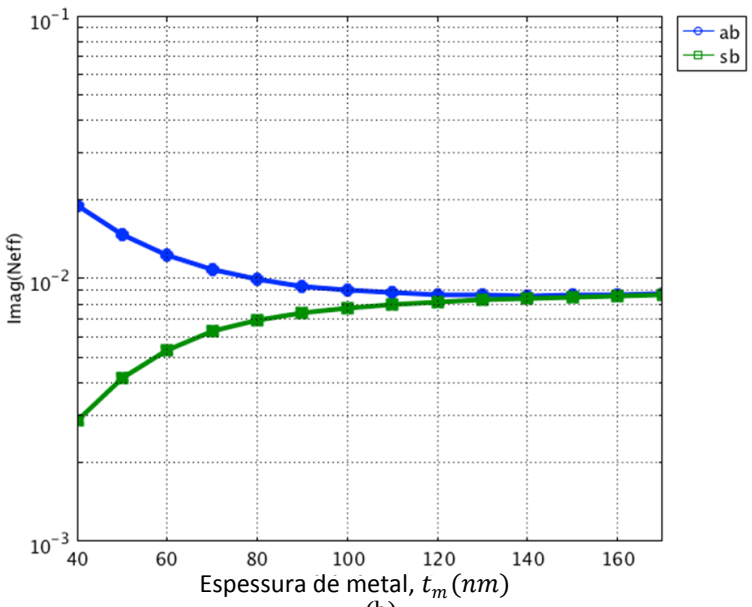
$$\frac{Re[k_{sp}]}{k_0} = Re[n_{eff}], \tag{3.1-1}$$

$$\frac{Im[k_{sp}]}{k_0} = -Im[n_{eff}]. \tag{3.1-2}$$

onde $k_0 = \omega / v_0$, $v_0$ representa velocidade da luz no vácuo.




(a)



(b)

*Figura 3.1.2.* Relação de dispersão para $w \to \infty$, (a) Parte real do índice efetivo, (b) parte imaginária do índice efetivo.

Observe que a parte real do índice efetivo ($\mathrm{Re}[n_{eff}]$) do modo $a_b$ diminui à medida que a espessura do metal aumenta (devido à maior penetração de campo dentro do metal para esses modos). No caso dos modos $s_b$, o efeito é exatamente o oposto, ou seja, o campo interage menos com o metal e se estende mais profundamente para dentro do dielétrico. Como resultado, a parte imaginária do índice efetivo desses modos ($\mathrm{Im}[n_{eff}]$) é reduzida, o que implica em menos perdas de propagação.

Considere, agora, a mesma estrutura ilustrada na Fig. 3.1.1, mas desta vez com largura $w$ finita. A largura será fixada em $w = 1\mu m$, enquanto que a espessura $t$ do metal será o parâmetro a ser variado. A janela computacional tem dimensão de $400nm \times 1400nm$.

Nas simulações com o *COMSOL Multiphysics* foi utilizada a excitação por modo híbrido, já que esta opção disponibiliza todas as componentes de campo. Para satisfazer a condição de existência de plásmon de superfície, a estrutura foi implementada de tal forma que a componente de campo magnético $H_z$ ficasse paralela ao plano da interface filme/dielétrico, e os campos elétricos $E_x$ e $E_y$ perpendiculares à mesma. Para a estrutura simétrica que apresenta a relação $w > t$, a componente de campo $E_y$ é dominante para quaisquer dos modos confinados. A intensidade de campo $E_x$ aumenta de acordo com o crescimento da espessura, e esta componente de campo passará a ser dominante quando $w < t$. No presente estudo será adotado $w \gg t$. As relações de dispersão e as

distribuições espaciais de campo para os quatro modos fundamentais e alguns modos de mais alta ordem são mostradas nas Fig. 3.1.3 e 3.1.4, respectivamente.

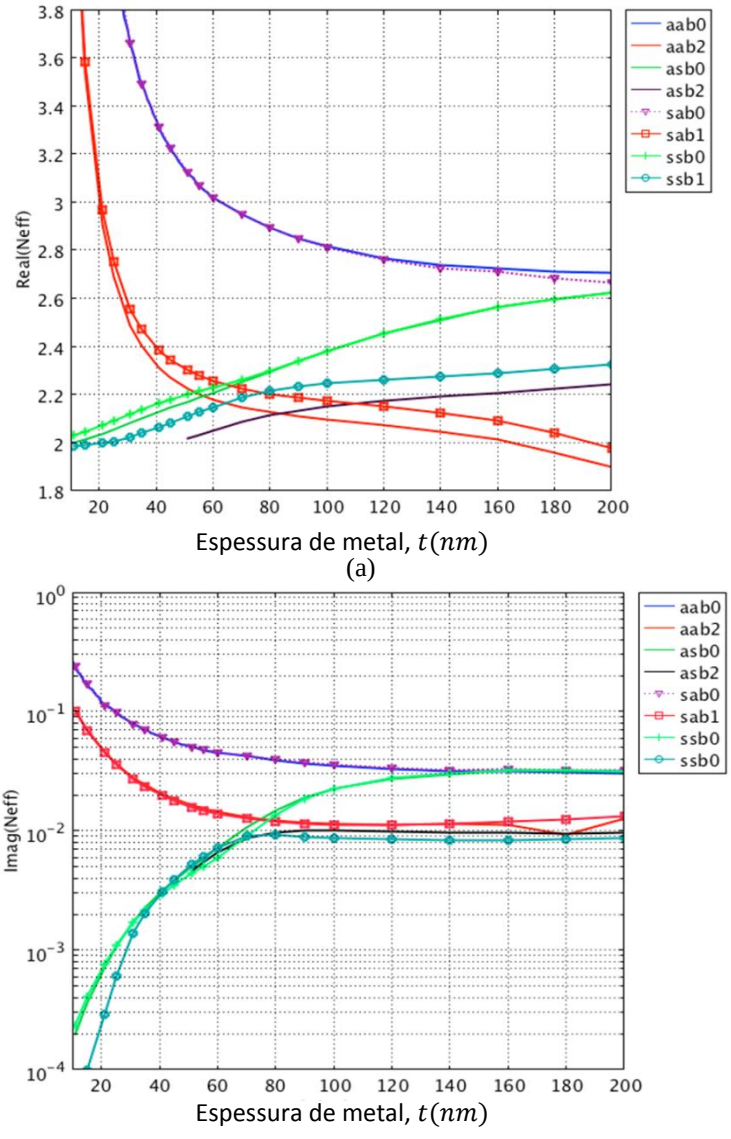



*Figura 3.1.3.* Relação de dispersão dos oito primeiros modos suportados pelo filme metálico de Ag com largura $w = 1\mu m$. (a) Parte real do índice efetivo, (b) parte imaginária do índice efetivo.

Nota-se que os modos $ss_b$ são bem mais interessantes do ponto de vista de projeto de componentes ópticos uma vez que suas perdas são consideravelmente menores quando comparadas às de outros modos. Uma das maneiras mais fáceis de se identificar um dado modo plasmônico (indicado pelo superscrito $n$) é contando o número de máximos de campo existentes ao longo do eixo dominante (ao longo da largura do filme, sem contar os campos nas bordas do filme). Por exemplo, o modo $as_b^0$ mostrado na Fig. 3.1.4 (b), não exibe nenhum máximo ao longo do eixo $x$ (entre os extremos do filme), portanto recebe a denominação $n$=0. Aplicando-se o mesmo raciocínio para a Fig. 3.1.4 (e), nota-se que existem dois máximos ao longo do eixo dominante, portanto tem-se $n$=2. Além

disso, a distribuição espacial de campo $E_y$ para esse caso apresenta assimetria tanto ao longo de $x$ quanto de $y$ e, por isso, esse modo é classificado como modo $aa_b^2$. Os modos $aa_b^0$, $as_b^0$, $ss_b^0$ e $sa_b^0$ são os primeiros modos puramente confinados (fundamentais), e pode-se observar por meio da Fig. 3.1.3 (a) que as partes reais de seus índices efetivos são maiores que as dos modos de mais alta ordem, o que se traduz em maior confinamento de campo. Conseqüentemente, esse maior confinamento irá também se refletir em maiores perdas de propagação (ou menores distâncias de propagação, já que esta é inversamente proporcional às perdas).

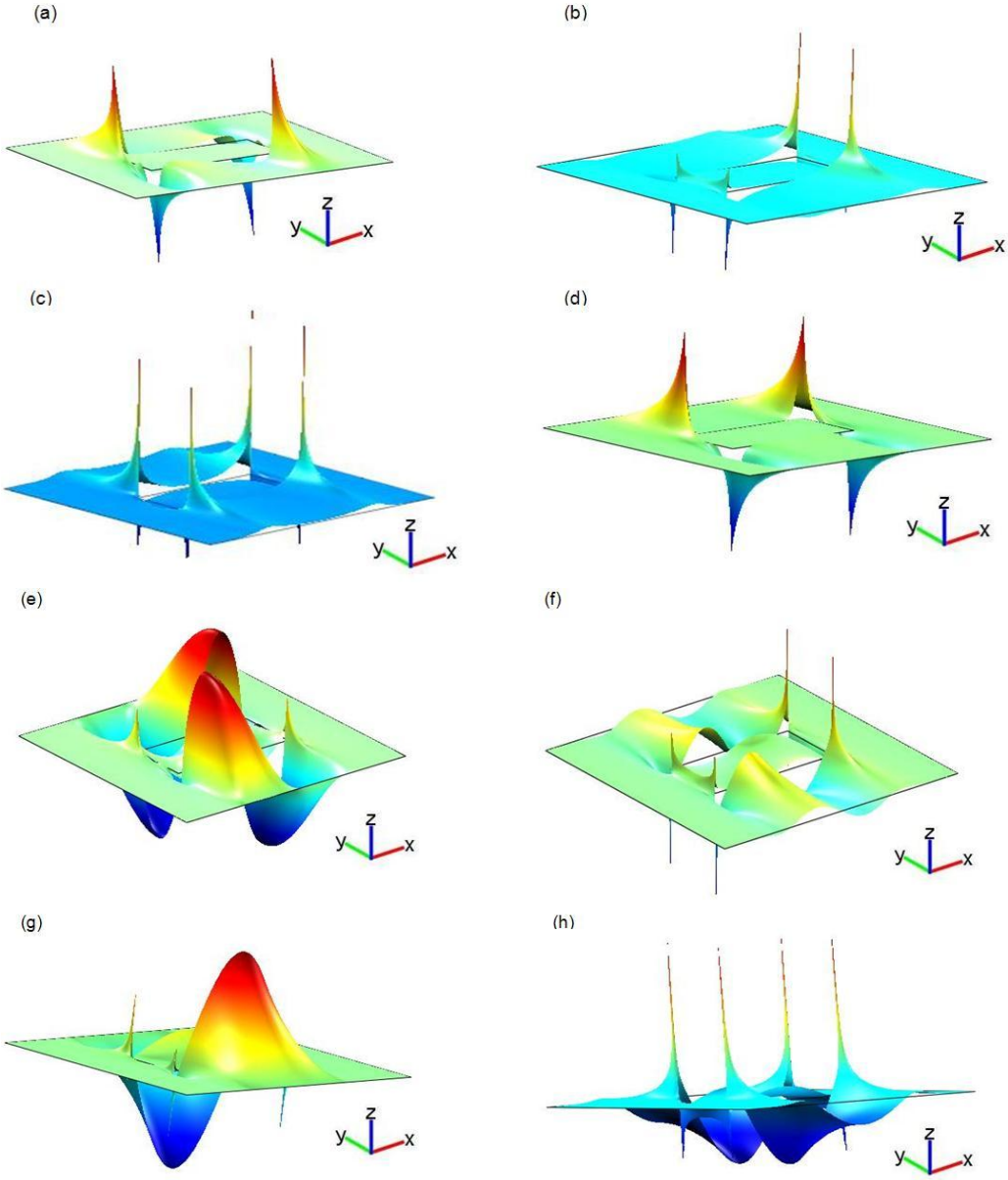



*Figura 3.1.4.* Campo elétrico $E_y$ dos dois primeiros modos plasmônicos obtidos para $w = 1\mu m$ e $t = 60nm$, (a) modo $aa_b^0$, (b) modo $as_b^0$, (c) $ss_b^0$, (d) $sa_b^0$, (e) $aa_b^2$, (f) $as_b^2$ ,(g) $sa_b^1$ e (h) $ss_b^1$.

A distância de propagação desses modos são ilustrados na Fig. 3.1.5, observe principalmente os modos $ss_b^i$, $i$ = 0 e 1, são chamados de modos LRSPP.

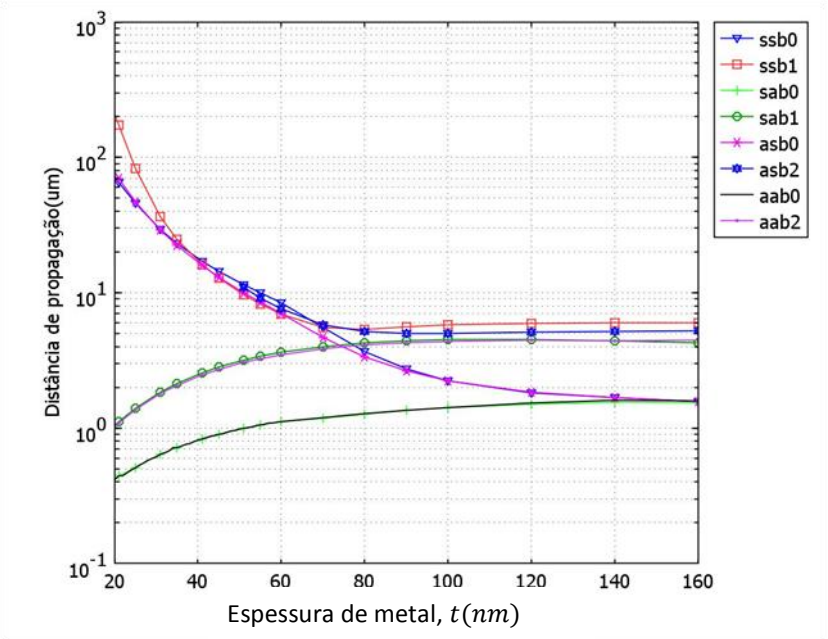



*Figura 3.1.5.* As distâncias de propagação dos modos apresentados nesta seção.

## 3.2 - Análises de guias de ondas plasmônicos tipo fenda

Nesta seção são apresentados resultados numéricos para diversas estruturas plasmônicas de interesse científico, quais sejam, guias tipo fenda quadrada e em V, guias tipo *rib*, acopladores plasmônicos, e ressoadores em anel. Inicialmente, serão analisados guias de onda do tipo fenda quadrada e fenda em V, ilustrados na Fig. 3.2.1 (a) e (b), respectivamente. Nestas simulações o metal adotado para o substrato é a prata (Ag), cuja permissividade é obtida segundo [37] descrito no Apêndice, ou seja, $\varepsilon_m = -19 - j0{,}53$ em $\lambda_0 = 633nm$. O superstrato é o ar, com $\varepsilon_{ar} = 1$.

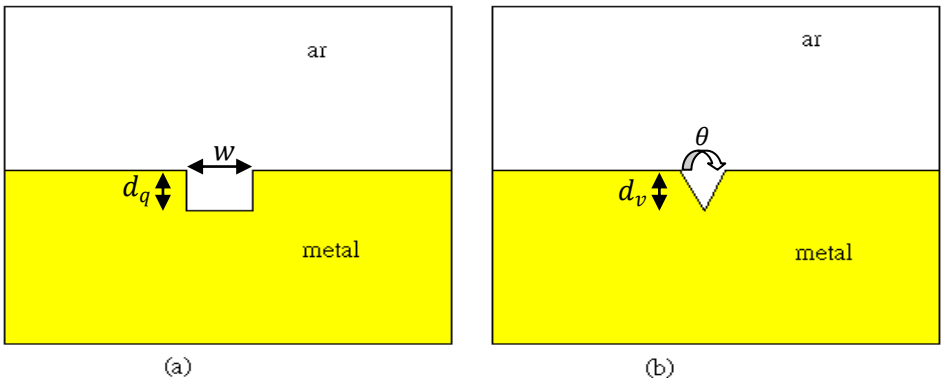



*Figura 3.2.1.* (a) guia de onda do tipo fenda quadrada, (b) guia de onda tipo fenda - V.

As Figs. 3.2.2(a)-(b) mostram a distribuição espacial de campo para a componente $H_y$, referente aos modos simétrico ($n_{eff} = 1{,}163156 - j0{,}004119$) e anti-simétrico ($n_{eff} = 1{,}019912 - j9{,}046657 \times 10^{-4}$), respectivamente. Estes campos foram obtidos para uma fenda quadrada com largura $w = 100nm$, profundidade $d_q = 300nm$. Já as Figs. 3.2.2(c)-(d) referem-se à distribuição de campo para a componente $H_y$, referente aos modos simétrico ($n_{eff} = 1{,}106526 - j0{,}005544$) e anti-simétrico ($n_{eff} = 1{,}034206 - j0{,}001165$), respectivamente. Esses resultados referem-se a uma fenda tipo V com ângulo de abertura $\theta = 30^{\circ}$ e profundidade $d_v = 1000nm$.

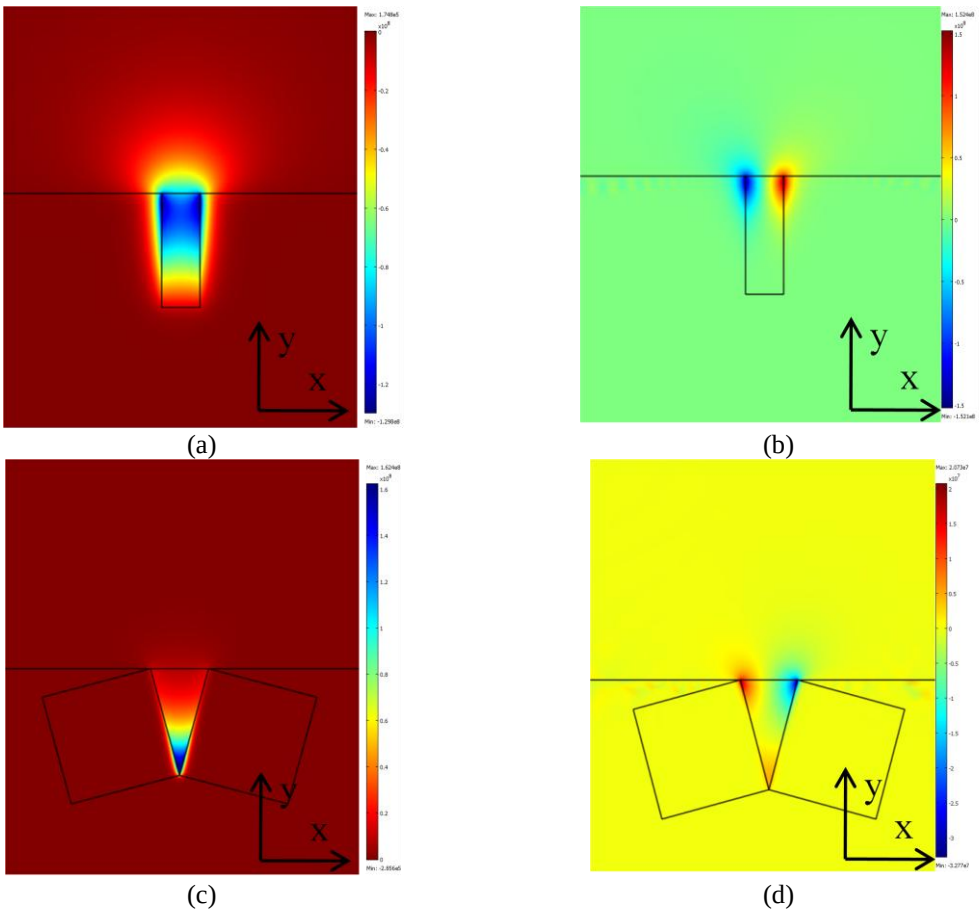



*Figura 3.2.2* Distribuição espacial de campo $H_y$ para (a) modo simétrico e (b) anti-simétrico em uma fenda quadrada, e (c) modo simétrico e (d) anti-simétrico em uma fenda tipo V.

A seguir, as Fig. 3.2.3 (a) e (b) apresentam as relações de dispersão associadas à estrutura tipo fenda quadrada obtidas para o modo $s_b$. Para uma profundidade $d_q$ não muito grande, os modos simétricos são cortados. Além disso, como pode ser vista na Fig. 3.2.2 (a), a interação de campo eletromagnético com o metal é muito intensa. Sendo assim, é esperado que modos com esta característica apresentem maior confinamento de campo e menor distância de propagação, como ilustrado na Fig. 3.2.3 (c) e (d).

Em se tratando de guias de ondas de plásmons, é interessante mostrar como o confinamento de campo e as distâncias de propagação se comportam em função dos parâmetros geométricos da fenda. Para isso, o confinamento de campo modal é calculado segundo [39]. O confinamento de campo pode ser relacionado à separação entre $Re[k_{sp}]$ e a linha de luz, definida como $k_0 = \frac{\omega}{c_0} n_{meio}$, onde $c_0$ é a velocidade de luz no vácuo, dividida pela constante de fase $Im[k_{sp}]$. A separação é então determinada como sendo $(Re[k_{sp}] - k_0)$ ou, em termos de índice efetivo, $(n_{eff} - n_{meio})$. Portanto, o parâmetro que mede o confinamento de campo é definido como uma relação de custo e benefício, assim (o denominador foi também dividido por $k_0$):

$$M_1 = -\frac{(Re[n_{eff}] - n_{meio})}{Im[n_{eff}]} \tag{3.2-1}$$

onde $M_1$ é adimensional. Esta relação é bem útil para comparação de guias de onda em aplicações tais como projetos de rede de Bragg [67]. Observe que o sinal negativo é adicionado na equação porque $Im[n_{eff}]$ é um termo negativo. Maiores detalhes sobre a escolha do cálculo do confinamento de campo é apresentada no apêndice B.

A equação utilizada para cálculo de distância de propagação de SPPs, $l_{sp}$, definida em (2.1-23). Esta é a distância que os SPPs conseguem viajar antes de serem atenuados devido ao amortecimento de oscilações dos elétrons. Este é um parâmetro crítico para o projeto de circuitos ópticos. A Fig. 3.2.3 apresenta os resultados obtidos para o modo $s_b$ propagando em uma fenda quadrada. As partes real e imaginária do índice efetivo são mostradas nas Figs. 3.2.3 (a)-(b), respectivamente. O confinamento de campo e a distância de propagação, por sua vez, são mostrados nas Fig. 3.2.3 (c) e (d) para este mesmo modo.

No caso do modo assimétrico $a_b$ os resultados são mostrados na Fig. 3.2.4. Da mesma forma que no caso anterior, as partes real e imaginária do índice efetivo são mostradas nas Fig. 3.2.4 (a) e (b), respectivamente. Já o confinamento de campo e a distância de propagação são mostrados nas Fig. 3.2.4 (c) e (d). Esses resultados confirmam que existe claramente um compromisso entre confinamento de campo e distância de propagação que deve, necessariamente, ser observado durante o projeto destes dispositivos.

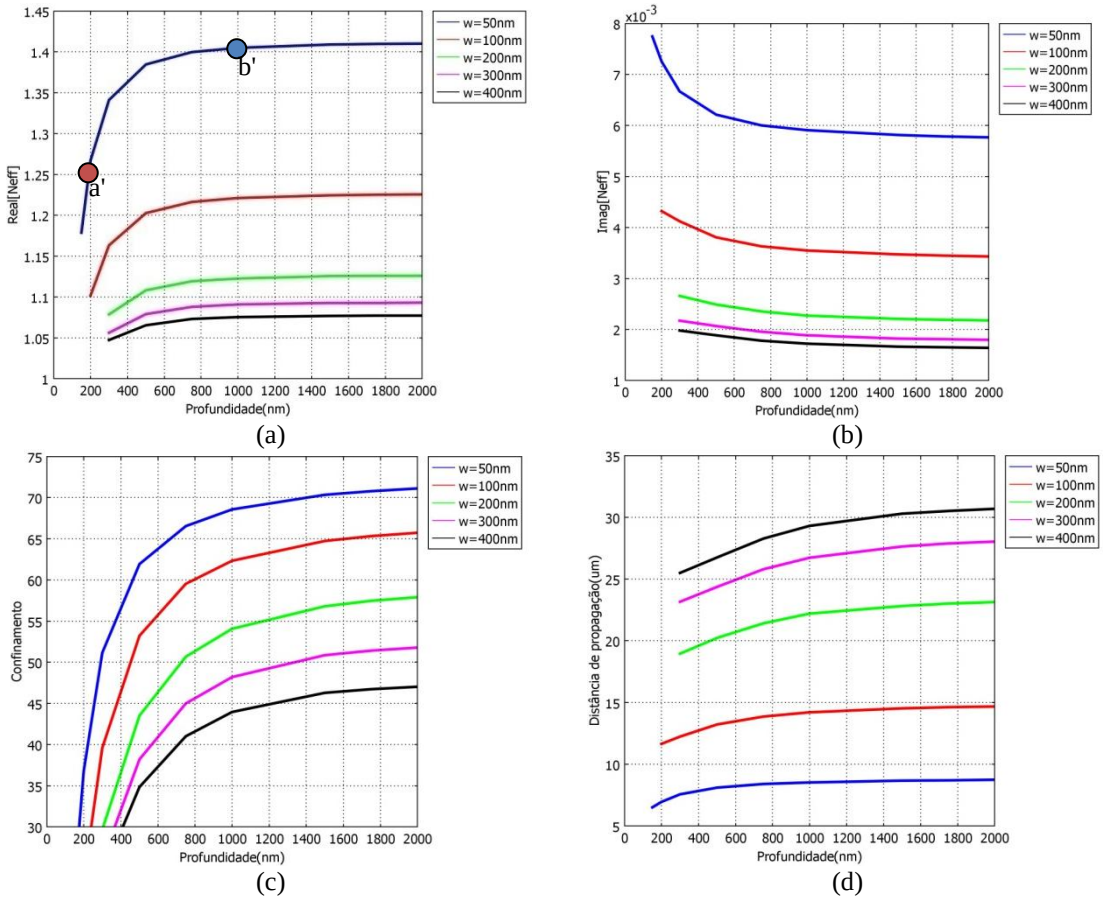



*Figura 3.2.3.* Modo $s_b$ (a) parte real de seu índice efetivo, (b) parte imaginária, (c) confinamento de campo, (d) distância de propagação.

Diferente do modo simétrico fundamental $s_b$, o modo $a_b$ apresenta como característica o fato de apresentar uma largura $w$ de corte menor. Pode-se observar que para estruturas com larguras pequenas (por exemplo, $w = 50nm$), não há variação significativa da parte real do índice efetivo com a profundidade $d_q$ da fenda. Isso ocorre porque o comprimento de onda aplicado é muito maior que $w$, o que faz com que o campo praticamente não interaja com a fenda (ou seja, a reposta tende à solução de uma interface planar metal/dielétrico). Portanto, a quantidade de campo confinado na região do vale é limitada mesmo que $d_q$ seja aumentado. Estruturas com larguras $w$ maiores, por sua vez, permitem que mais campo seja confinado em uma profundidade maior da fenda. Esse maior confinamento ocorre em virtude do acoplamento de campo em ambos os lados da fenda, fazendo com que o valor do índice efetivo e, como é de se esperar, das perdas, também aumentem.

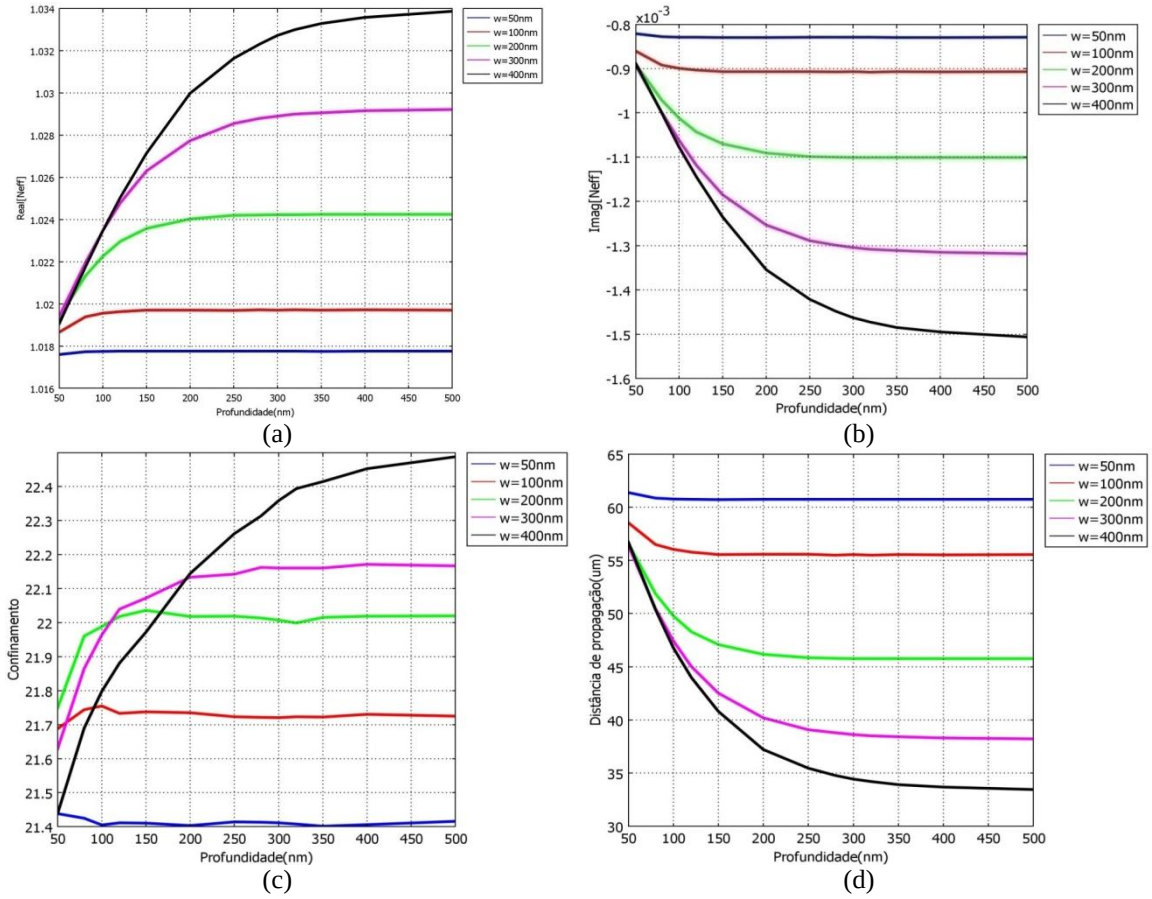
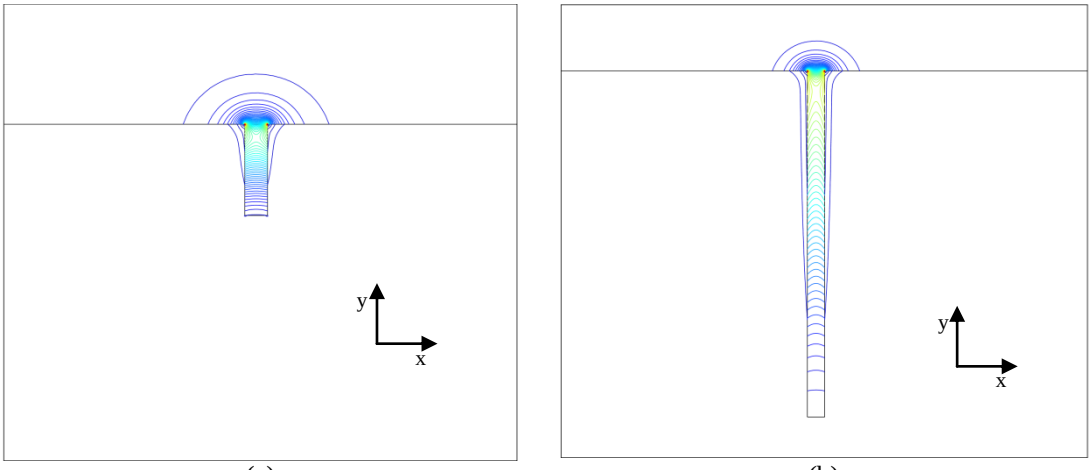



*Figura 3.2.4.* Relação de dispersão associada à guia plasmônico do tipo fenda quadrada. (a) $Re[n_{eff}]$, (b) $Im[n_{eff}]$, (c) confinamento de campo, (d) distância de propagação.

Para ilustrar melhor o efeito dos parâmetros geométricos da fenda sobre o confinamento de campo, foram selecionados dois pontos da Fig. 3.2.3 (a), pontos (a´) e (b´) referentes a $w = 50\,nm$, referentes ao modo simétrico. Os contornos de campo referentes a esses dois pontos são mostradas, respectivamente, na Fig. 3.2.5. Como pode ser observado na Fig. 3.2.5 (a), para a profundidade de $200nm$, o campo atinge com facilidade a base da fenda. Já para uma profundidade de $1000nm$, Fig. 3.2.5 (b), há pouco campo interagindo com a base da fenda, o que explica o comportamento plano da curva da Fig. 3.2.3 (a) para profundidades maiores.




(a) (b)

*Figura 3.2.5.* Contornos de campo referentes aos pontos a' e b' indicados na Fig. 3.2.3 (a), para $w = 50nm$. (a) $d_q = 200nm$, e (b) $d_q = 1000nm$.

Os resultados a seguir referem-se à fenda tipo V, obtidos para os modos $s_b$ e $a_b$, respectivamente. Em virtude do ângulo de abertura da fenda, sua relação de dispersão é aqui construída, por conveniência, fixando-se o ângulo $\theta$ e variando-se a profundidade $d_v$. Os resultados obtidos para as partes real e imaginária do índice efetivo, que descrevem a relação de dispersão para esta estrutura, são mostrados nas Fig. 3.2.6 para o modo $s_b$, e na Fig. 3.2.7 para o modo $a_b$, respectivamente. Em ambas, (a) e (b) referem-se à parte real e imaginária do índice efetivo, respectivamente, e (c) e (d) ao confinamento de campo e à distância de propagação, respectivamente. Observe que os resultados obtidos para a fenda em V são bastante diferentes daqueles obtidos para a fenda quadrada. No caso do modo $a_b$ da fenda em V, como foi fixado o ângulo $\theta$, torna-se necessário aumentar a largura da abertura da fenda sempre que a profundidade $d_v$ também for aumentada. Sendo assim, mais campo ficará confinado no interior da fenda à medida que $d_v$ aumenta, aumentando, assim, o acoplamento de campo entre as paredes da fenda. Como ocorre para o caso da fenda quadrada, também aqui esse aumento do acoplamento de campo nas paredes da fenda produz um aumento da interação com o metal e, conseqüentemente, maiores perdas de propagação. Diferente do modo anti-simétrico, no caso do comportamento do confinamento de campo do modo $s_b$ ocorre exatamente o contrário, porque quando $d_v$ aumenta, aumenta também a quantidade de campo vazado para o meio dielétrico. Conseqüentemente, isso causa uma redução no confinamento de campo. Como ocorre para o caso da fenda quadrada, também aqui esse aumento do acoplamento de campo nas paredes da fenda produz um aumento da interação com o metal e, conseqüentemente, maiores perdas de propagação.

A interpretação física dos resultados para esta geometria segue o mesmo padrão do caso anterior onde, mais uma vez, fica claro o compromisso com respeito ao confinamento de campo e distância de propagação.

Na próxima seção são apresentados os resultados referentes ao acoplador direcional plasmônico.

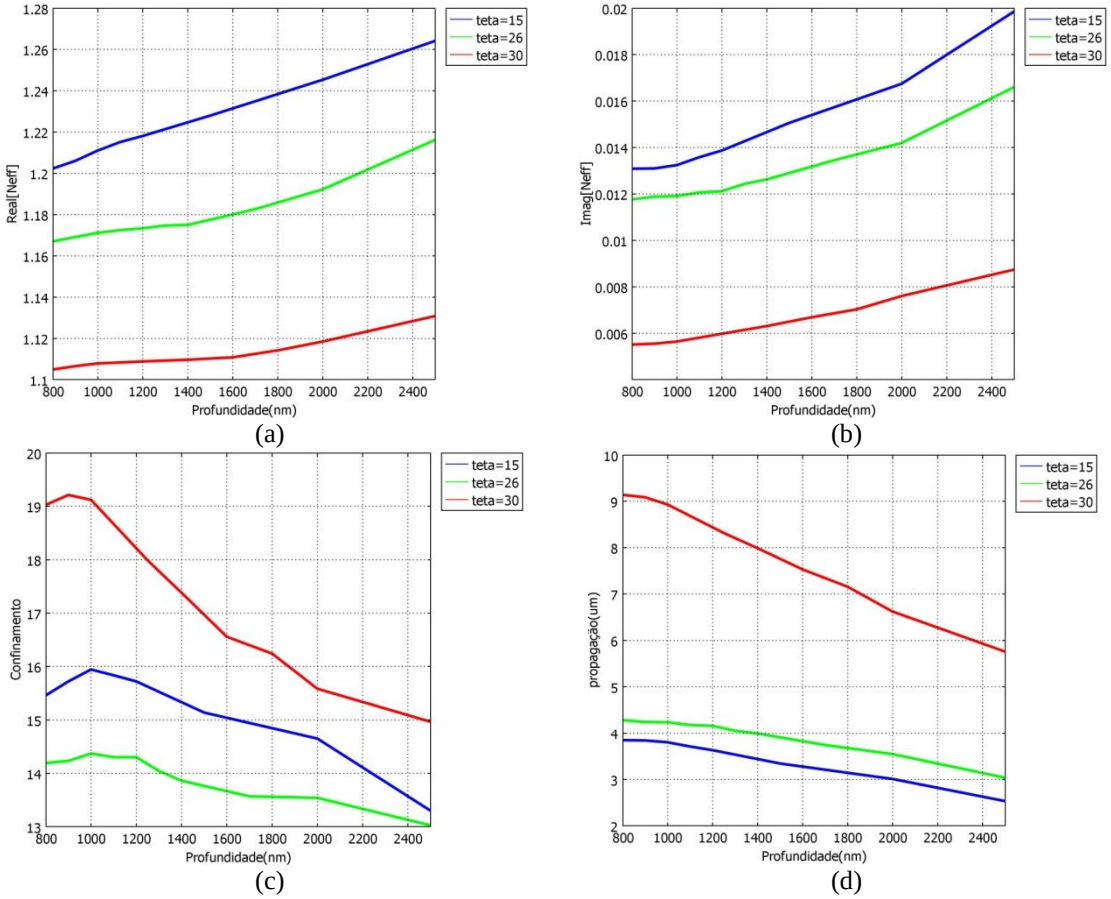



*Figura 3.2.6.* Modo $s_b$ do guia plasmônico do tipo V. (a) $Re[n_{eff}]$, (b) $Im[n_{eff}]$, (c) confinamento de campo, (d) distância de propagação.

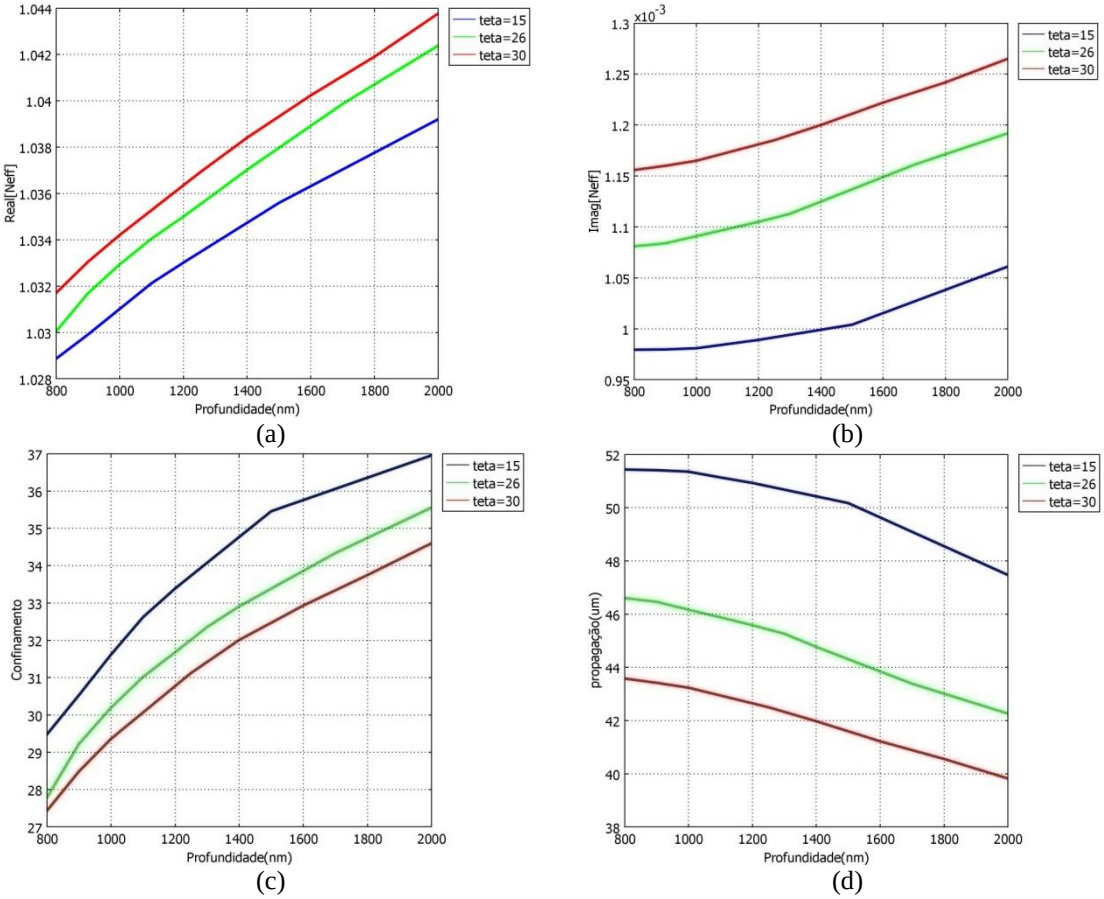



*Figura 3.2.7.* Modo $a_b$ do guia plasmônico do tipo V. (a) $Re[n_{eff}]$, (b) $Im[n_{eff}]$, (c) confinamento de campo, (d) distância de propagação.

## 3.3 - Acoplador direcional plasmônico

Nesta seção é analisado um acoplador direcional baseado no conceito de LRSPP, descrito anteriormente. A estrutura consiste em um fino filme metálico e dois canais dielétricos, sendo sua seção transversal ilustrada na Fig. 3.3.1. O comprimento de onda adotado é $\lambda = 633nm$, o que resulta em um valor de permissividade $\varepsilon_m = -19 - j0{,}53$, segundo [37]. Os índices de refração do guia dielétrico e da casca são, respectivamente, 2,0 e 1,45. A característica de LRSPP desta estrutura é garantida pelos guias dielétricos, que servem como "reservatório" de energia para o guia plasmônico definido pelo filme metálico [40]. Assim, esta estrutura consiste, na verdade, de três guias de ondas acoplados que são projetados de modo a existir um perfeito casamento de fase entre eles.

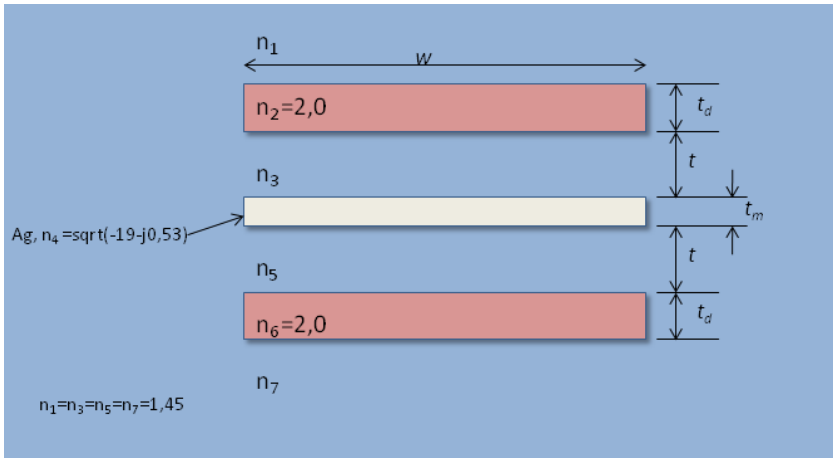



*Figura 3.3.1.* Acoplador plasmômico proposto vista na secção transversal, o metal e dielétrico *2* são colocados em um ambiente no qual o índice dielétrico é $n_1$, onde $(n_2 = n_6) \geq n_1$.

Uma vez que os dois guias dielétricos são idênticos, a estrutura apresenta total simetria em sua seção transversal. Isso garante as mesmas velocidades de fase para os modos guiados em cada um dos canais dielétricos, e também para o filme metálico (desde que sua espessura seja escolhida de modo a permitir esse casamento com os canais dielétricos). Assim, haverá transferência periódica de energia de um canal para outro. Para que a energia seja acoplada totalmente, é necessário que o modo selecionado propague-se por uma certa distância até que a energia seja transferida totalmente para outro canal. Esta distância, denominada de comprimento de acoplamento $L_\pi$, pode ser determinada para um acoplador direcional de *dois núcleos* da seguinte forma,

$$L_c = \frac{\pi}{2\kappa_c} \tag{3.3-1}$$

onde $\kappa_c$ é coeficiente de acoplamento calculado pela relação $\kappa_c = \pi\Delta n_{eff}/\lambda$. Porém, esta relação não se aplica ao acoplador direcional da Fig. 3.3.1 por este apresentar *três núcleos*. Por isso, o comprimento de acoplamento $L_\pi$ deve ser calculado utilizando-se da seguinte relação [68]

$$L_\pi = \frac{\pi}{2\sqrt{\kappa_1^2+\kappa_2^2}} \tag{3.3-2}$$

onde $\kappa_1$ e $\kappa_2$ são, respectivamente, os coeficientes de acoplamento entre os núcleos (2 e 4), desconsiderado-se o núcleo 6, e (4 e 6), desconsiderando-se o núcleo 2. Por simplicidade, o valor de $L_\pi$ é calculado considerando-se que o acoplador projetado é ideal, isto é, a estrutura construída apresenta perfeita simetria. Isso resulta em $\kappa = \kappa_1 = \kappa_2$, e a Eq. (3.3-2) torna-se:

$$L_\pi = \frac{\pi}{2\sqrt{2}\kappa} \tag{3.3-3}$$

onde: $\kappa = \frac{\pi}{\lambda}\Delta n_{eff}$ e

$\Delta n_{eff} = n_{eff_par} - n_{eff_ímpar}$ .

A espessura das camadas dielétricas, $t_d$, e do metal, $t_m$, é projetada de maneira similar ao definido nos passos de projeto do ressoador tipo *racetrack* que será visto a seguir. Como a presente estrutura é geometricamente diferente, um detalhamento das etapas se faz necessário. Portanto, os passos adotados para o acoplador direcional são os seguintes,

1. Determinar a largura e a espessura do metal supondo uma estrutura composta apenas pelo metal imerso em um ambiente dielétrico de índice de refração definido pela casca. É mais conveniente começar por aqui tendo em vista que a distância de propagação do modo plásmon pode ser diretamente obtida da parte imaginária de sua constante de propagação. O modo a ser escolhido aqui é $ss_b^1$, por ser mais fácil de ser excitado e, principalmente, por apresentar menores perdas que os modos fundamentais;
2. Como a largura dos guias dielétricos é a mesma do guia metálico, e sabendo que o índice de refração já foi definido *a priori*, resta apenas definir a espessura desta camada (que, por simetria, será a mesma para os dois guias dielétricos). Para isso, supõe-se um único canal dielétrico (um guia isolado) imerso em um ambiente também dielétrico cujo índice de refração é o da casca. O que deve ser feito nesse caso é variar a espessura até que o índice efetivo do guia dielétrico seja exatamente o mesmo da parte real do índice do guia metálico definido no primeiro passo;
3. Uma vez concluídos os passos anteriores, só resta definir a separação entre os guias dielétricos e o guia metálico. Isso é feito substituindo-se os parâmetros definidos nos passos 1 e 2 de volta na Fig. 3.3.1. A escolha da separação deve ser feita respeitando-se a limitação quanto à distância de propagação dos modos da estrutura completa. Isso porque quanto maior a separação entre os guias, maior será o comprimento de acoplamento $L_\pi$.
4. Para a obtenção do coeficiente de acoplamento entre os núcleos (2 e 4) e (4 e 6), basta simular a estrutura sem o núcleo 6 para se obter $\kappa_1$, e sem o núcleo 2 para se obter $\kappa_2$. Mas por conta da simetria, basta remover apenas um dos núcleos (2 ou 6), já que $\kappa_1 = \kappa_2$.

Aplicando-se os passos definidos acima à estrutura da Fig. 3.3.1, tem-se:

Características dos materiais (definidas *a priori*):

- Metal: prata

- Comprimento de onda $\lambda = 633nm$
- Permissividade do metal $\varepsilon_m = -19 - j0{,}53$
- Índice do substrato $n_1 = 1{,}45$
- Índice do canal dielétrico: $n_2 = n_6 = 2{,}0$

Segundo os passos 1 e 2, o parâmetro $t_m$ deve ser variado para se obter o índice efetivo do modo $ss_b^1$, ou seja, $n_{eff\,1}$, a espessura $t_d$. Os índices efetivos para os passos 1 e 2 são listados na TABELA 1.

TABELA 1. Dados físicos e geométricos do acoplador plasmônico. Para cada espessura adotada para o metal, associa-se uma espessura de dielétrico de tal forma que a estrutura permaneça casada*.

| $t_m$(nm) | $n_{eff1}$ | $t_d$(nm) | $n_{eff2}$ |
|---|---|---|---|
| **20** | $1{,}4567 - j1{,}0012 \times 10^{-4}$ | 40 | 1,45471 |
| **30** | $1{,}4689 - j3{,}2681 \times 10^{-4}$ | 60 | 1,46755 |
| **40** | $1{,}4827 - j6{,}6748 \times 10^{-4}$ | 75 | 1,482428 |
| **50** | $1{,}4950 - j0{,}001062$ | 85 | 1,494611 |
| **60** | $1{,}5051 - j0{,}001452$ | 92 | 1,504119 |
| **70** | $1{,}5129 - j0{,}001799$ | 97 | 1,511343 |
| **80** | $1{,}51887 - j0{,}002091$ | 99,3 | 1,514803 |

* A condição de casamento é Re[$n_{eff\,1}$] tem que ser a mais próximo possível de Re[$n_{eff\,2}$].

O passo 3 visa determinar qual a melhor separação entre os guias dielétricos e o guia metálico (ou seja, $t$). Para isso, torna-se necessário realizar um estudo mostrando como o índice efetivo é afetado pela variação desse parâmetro. Os resultados são mostrados nas Figs. 3.3.2 (a)-(d) que mostram, respectivamente, como a parte real de índice efetivo, a parte imaginária, o confinamento de campo, e a distância de propagação, variam em função da separação entre os guias ($t$). Esse estudo foi realizado tomando como referência o modo simétrico da estrutura completa. É importante ressaltar que para cada espessura $t_m$ adotada para o metal, os passos 1, 2 e 4 devem ser rigorosamente seguidos de modo a se garantir o casamento de fase entre os guias dielétricos e o guia metálico. Como é de se esperar, quanto menor a espessura do metal, menor a interação da luz com este material (e portanto menor a parte real de $n_{eff}$), e menores serão as perdas de propagação (relacionada à parte imaginária de $n_{eff}$).

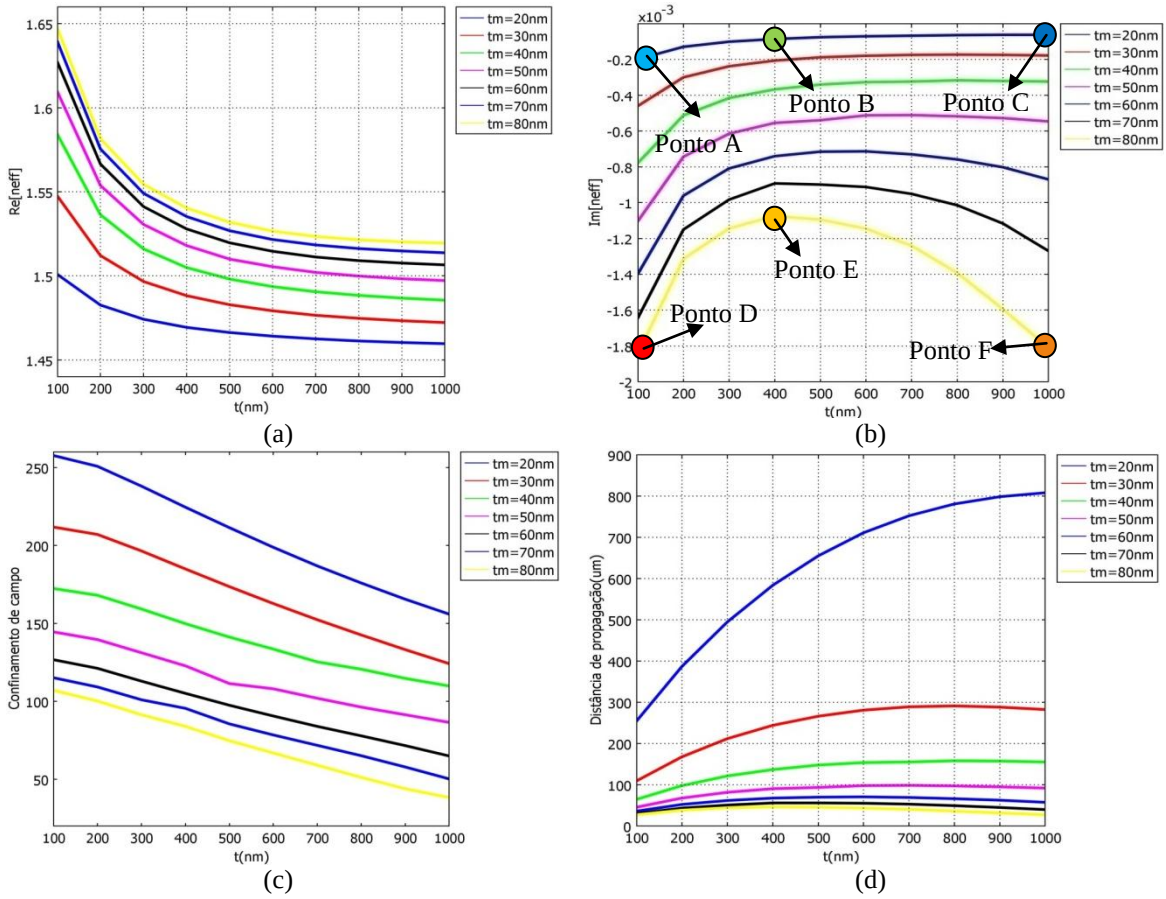



*Figura 3.3.2.* Relação de dispersão do acoplador plasmônico para modo $ss_b^1$, $t_m$ a espessura de metal e $t$ a distância que separa metal e canal dielétrico. (a) parte real do índice efetivo, (b) parte imaginária, (c) confinamento de campo e (d) distância de propagação. Os pontos de A a F representam casos extremos de confinamentos.

A seguir, são calculados o confinamento de campo e a distância de propagação, os quais são definidos, respectivamente, da seguinte forma

$$m_1 = \frac{Real\,[n_{eff}]-n_1}{Im[n_{eff}]} \tag{3.3-4}$$

$$\delta_d = \frac{1}{2k_0 Im[n_{eff}]} \tag{3.3-5}$$

onde $k_0$ é a constante de propagação no vácuo, definido como $2\pi/\lambda$. Os resultados para esses parâmetros são mostrados nas Fig. 3.3.2 (c) e (d) em função da separação $t$. Para cada curva, o valor da espessura do metal, $t_m$, foi mantido constante.

Observe na Fig. 3.3.2 (d) que o valor do confinamento de campo comporta-se como esperado. Como este parâmetro é inversamente proporcional à parte imaginária da constante de propagação (e esta tende a diminuir para espessuras menores de metal para o modo em questão), isso leva a um aumento fator de confinamento para espessuras $t_m$ mais finas. Por outro lado, à medida que a separação $t$ aumenta, há uma tendência de confinamento modal no filme metálico, contribuindo para uma diminuição do fator de

confinamento. Observe que o comportamento das curvas da Fig. 3.3.2 (b) e 3.3.2 (d) indicam que há um valor ótimo de separação segundo o qual as perdas são mínimas e, conseqüentemente, as distâncias de propagação são máximas. Nesse ponto ótimo, há uma maior concentração de campo nos guias dielétricos, que por serem sem perdas, contribuem para uma redução das perdas globais de propagação. A título de ilustração do efeito dos parâmetros geométricos sobre o confinamento de campo, foram selecionados seis pontos na Fig. 3.3.2 (b) representando seis casos extremos de confinamento. Os pontos $A$, $B$ $e$ $C$ localizados na curva de $t_m = 20nm$ para $t = 100nm$, $400nm$ e $1000nm$, e os pontos $D$, $E$ e $F$ na curva de $t_m = 80nm$ para $t = 100nm$, $400nm$ e $1000nm$. As distribuições de campo referentes à componente $E_y$ do modo $ss_b^1$ para esses pontos são mostradas na Fig. 3.3.3. Esses resultados mostram claramente que há um compromisso quanto à escolha dos parâmetros geométricos da estrutura. Essa escolha passa, necessariamente, pela restrição imposta pelas perdas modais, que limitam a máxima distância de propagação. Portanto, o comprimento de acoplamento (controlado pela separação $t$) deve ser menor que a máxima distância de propagação para que a estrutura opere adequadamente com potência óptica suficiente em sua saída.

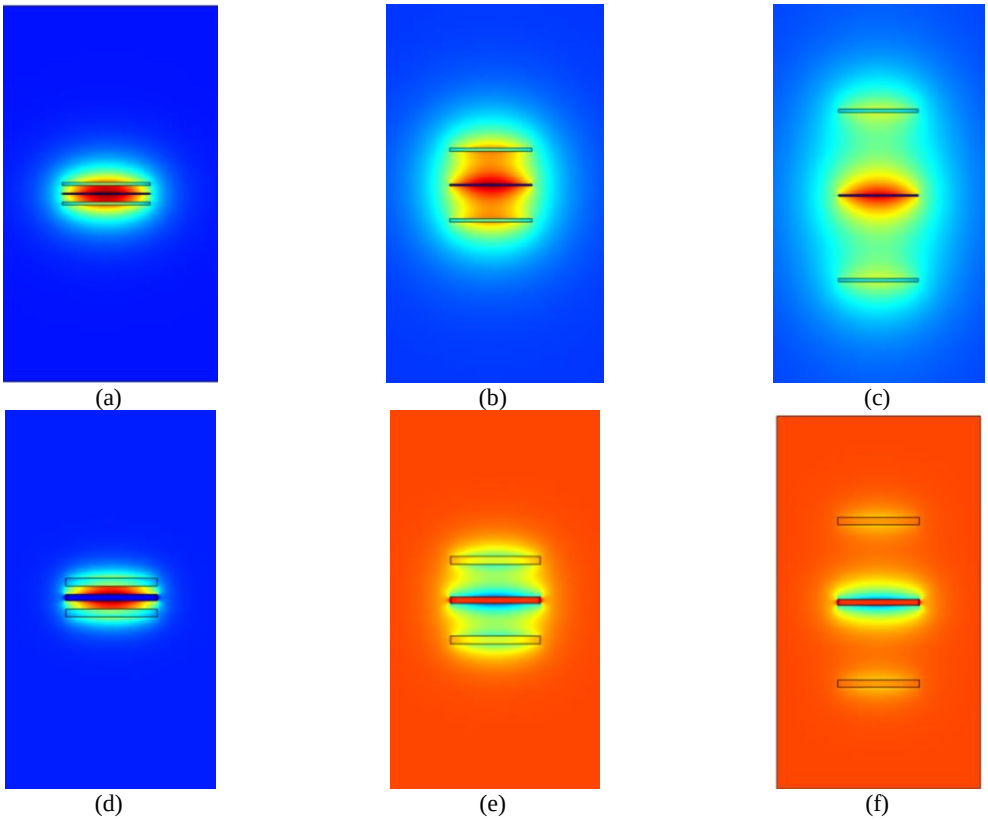



*Figura 3.3.3.* Distribuição de campo para a componente $E_y$, (a) referente ao ponto A, e (b) referente ao ponto B, (c) referente ao ponto C, para $t_m = 20nm$ e $t_d = 40nm$, (d) referente ao ponto D, e (e) referente ao ponto E. (f) referente ao ponto F, para $t_m = 80nm$ e $t_d = 99{,}3nm$. Os pontos são referentes à Fig. 3.3.2(b).

A seguir será feita a mesma análise para outros 3 modos plasmônicos de mais alta ordem para o acoplador direcional apresentado neste trabalho.

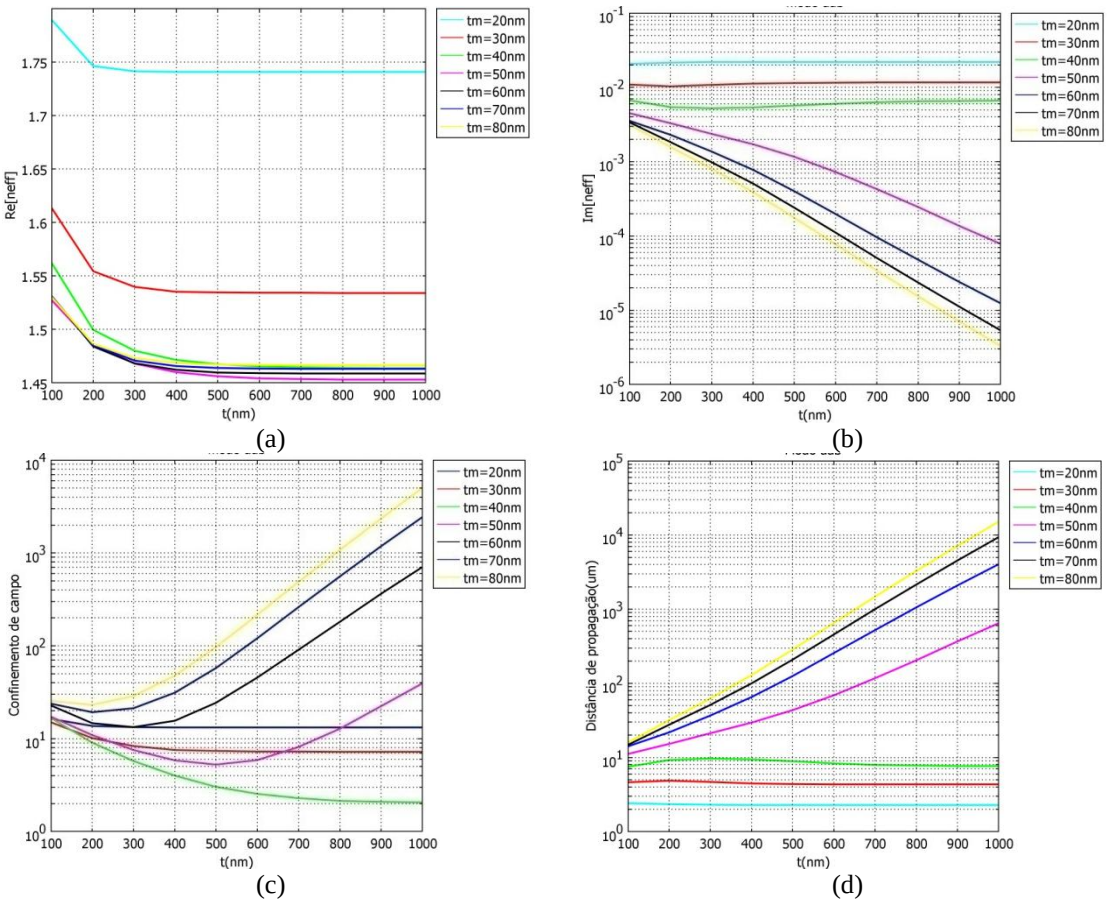



*Figura 3.3.4.* (a) parte real de $n_{eff}$, (b) parte imaginária de $n_{eff}$, (c) confinamento de campo e (d) distância de propagação do modo $aa_b^2$.

A dependência do modo $aa_b^2$ em relação à espessura $t$ (separação entre o guia dielétrico e o metal) é mostrada na Fig. 3.3.4. Assim como nos casos anteriores, (a) e (b) referem-se à parte real e imaginária do índice efetivo, respectivamente, e (c) e (d) ao confinamento de campo e à distância de propagação, respectivamente. Este modo apresenta como característica assimetria nos dois eixos. Além de ser mais difícil de ser excitado na prática, este modo apresenta mais interação com o metal e, conseqüentemente, maiores perdas e menor distância de propagação. Isso pode ser claramente observado nas curvas da Fig. 3.3.4 (b) e (d), quando a espessura de metal é menor que $30nm$. Para o caso de metal com sua espessura superior a $30nm$, em vez dos campos serem confinados nas superfícies do filme de metal, eles passam a ser confinados nos guias dielétricos. Apesar da redução da parte imaginária do índice efetivo e do aumento considerável da distância de propagação, este modo explora pouco o efeito de SPPs. Portanto, sua escolha não se mostra como a mais adequada para o projeto do

acoplador direcional.

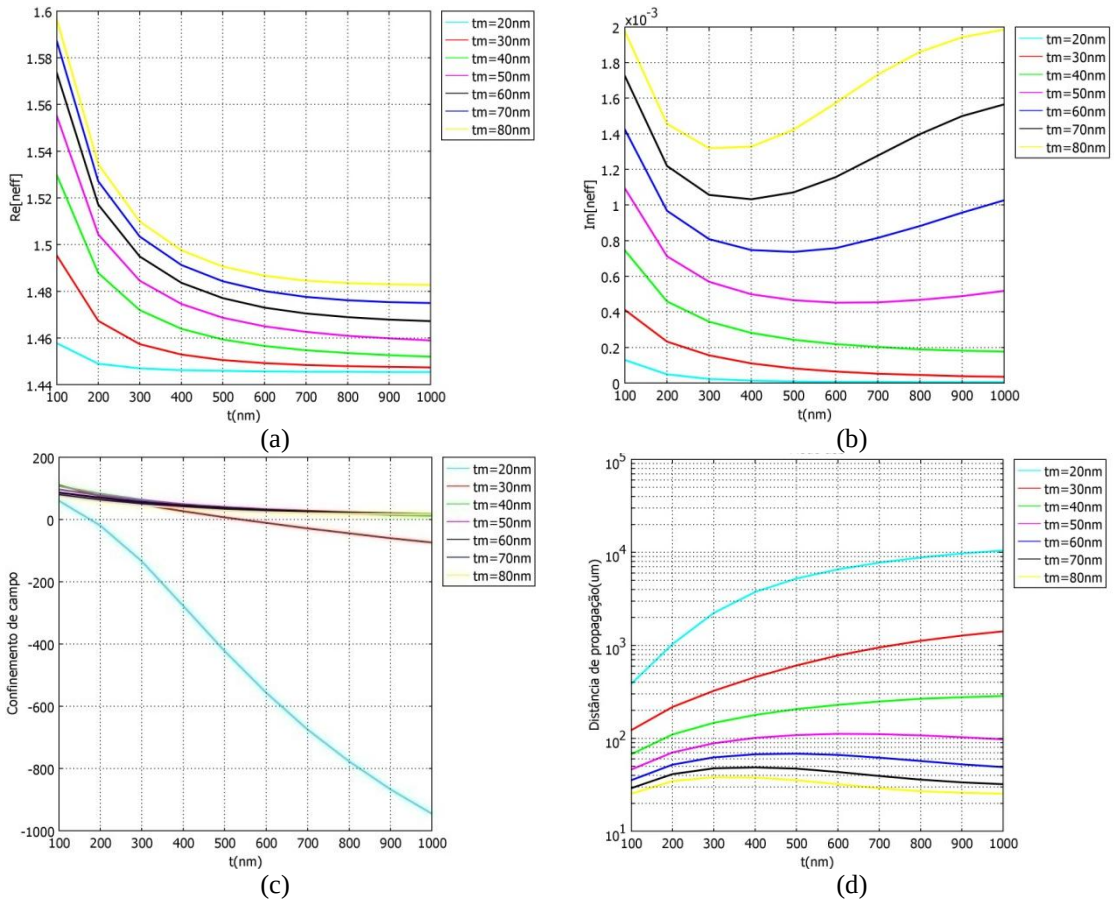



*Figura 3.3.5.* (a) parte real de $n_{eff}$, (b) parte imaginária de $n_{eff}$, (c) confinamento de campo e (d) distância de propagação do modo $as_b^2$.

A seguir será analisado o comportamento do modo $as_b^2$. Esse modo tem como característica sua assimetria no eixo principal e simetria no outro. Adicionalmente, ele apresenta baixo confinamento de campo para espessuras de metal superiores a $40nm$. Para o caso de $t_m = 20nm$ e separação entre guias $t > 200nm$ há uma perda de confinamento de campo, o que se traduz em valores negativos para este parâmetro (observe que o mesmo acontece para $t_m = 30nm$ e $t > 500nm$), conforme ilustrado na Fig. 3.3.5 (c). Os resultados obtidos para $Re[n_{eff}]$, $Im[n_{eff}]$, confinamento de campo, e distância de propagação são mostrados nas Fig. 3.3.5 (a)-(d). Por suas características de propagação, este modo não se mostra adequado para a modelagem do acoplador direcional.

Finalmente, os resultados referentes ao modo $sa_b^1$ podem ser observados nas Fig. 3.3.6 (a)-(d). Este modo tem como característica marcante o fato de apresentar uma elevada interação de seu campo eletromagnético com o metal. Isso resulta em grandes

perdas e curtas distâncias de propagação (mais precisamente, o máximo valor obtido foi $25{,}2\mu m$). O confinamento de campo é também reduzido nesse caso. Com isso, pode-se concluir que o modo $ss_b^1$ é o modo mais adequado para ser utilizado como modo 1 do acoplador direcional de três núcleos.

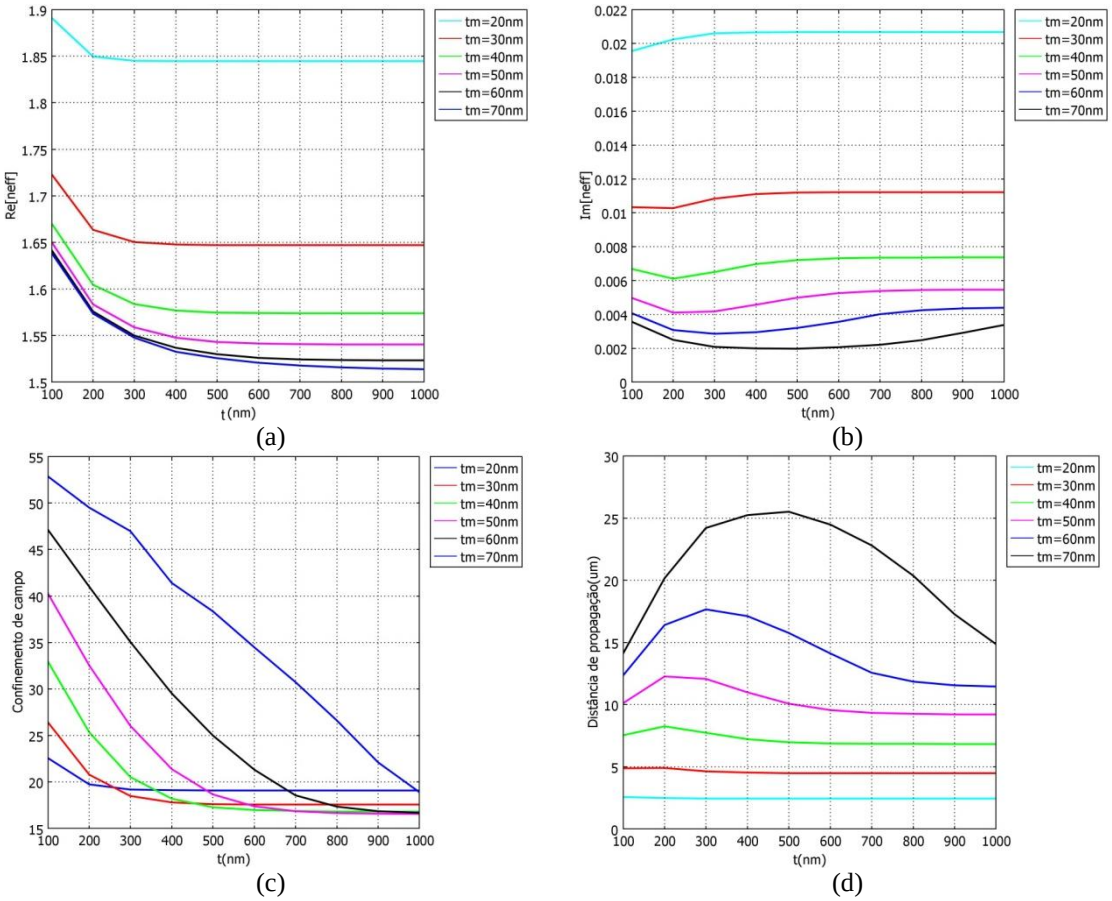



*Figura 3.3.6.* (a) parte real de $n_{eff}$, (b) parte imaginária de $n_{eff}$, (c) confinamento de campo e (d) distância de propagação do modo $sa_b^1$.

A seguir é apresentado o projeto de um acoplador direcional plasmônico seguindo os passos apresentados nesta seção. O guia metálico definido de acordo com o passo 1, pode ser facilmente projetado com base na Fig. 3.1.5. Assim, tem-se

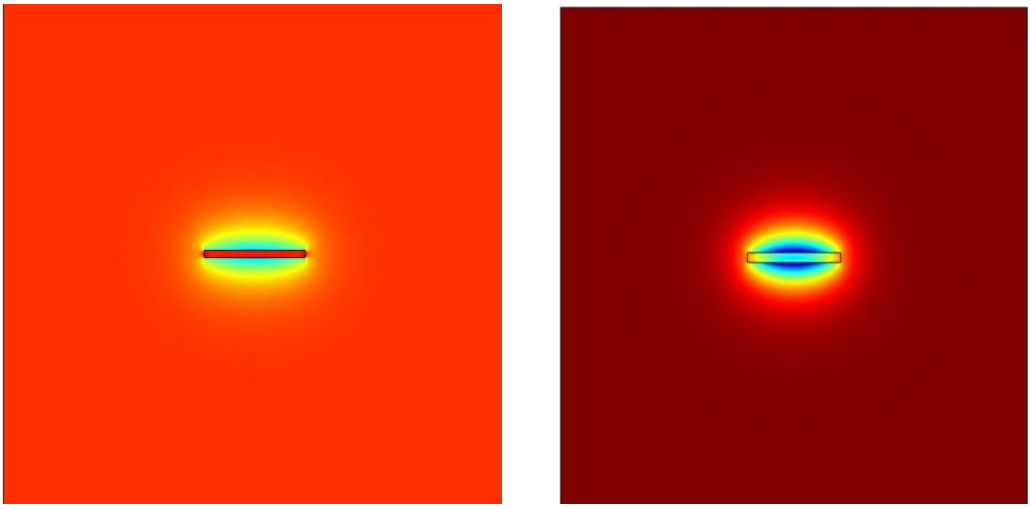
- $t_m = 20nm$
- $w_m = 1\mu m$
- $n_{eff}$ (metal/substrato) = $1{,}4567 - j1{,}0012 \times 10^{-4}$

A distribuição de campo da componente $E_y$ para o modo $ss_b^1$ para esse caso é mostrada na Fig. 3.3.7(a). No passo 2 os guias dielétricos são projetados de modo a apresentar o índice efetivo modal o mais próximo possível da parte imaginária do índice

efetivo do modo $ss_b^1$ projetado no passo 1. Logo,

- $t_d = 40nm$
- $w_d = 1\mu m$
- $n_{eff}$ (dielétrico / substrato)= 1,45471

A distribuição de campo da componente $E_y$ para este modo é apresentada na Fig. 3.3.7(b).



(a) (b)

*Figura 3.3.7.* (a) Distribuição de campo $E_y$ para metal/substrato. (b) Distribuição de campo $E_y$ para dielétrico/substrato, ambos utilizando modo híbrido como fonte de excitação.

No passo 3, os parâmetros definidos nos passos anteriores são substituídos de volta na Fig. 3.3.1, e a estrutura completa deve ser agora simulada. Adotando-se *a priori* uma separação $t = 1000nm$, para explorar a máxima distância de propagação oferecida pela estrutura, tem-se

- $n_{eff}$ para modo 1= $1{,}459724 - j6{,}238262 \times 10^{-5}$
- $n_{eff}$ para modo 2= $1{,}453885 - j1{,}044922 \times 10^{-5}$
- $n_{eff}$ para modo 3= $1{,}448665 - j4{,}570243 \times 10^{-5}$

As distâncias de propagação dos modos apresentados são

- $d_{pm\,1} = 807{,}477\mu m$,
- $d_{pm\,2} = 4820{,}698\mu m$ e
- $d_{pm\,3} = 1102{,}185\mu m$.

Observe que quando os três guias são colocados em proximidade (de modo que seus campos possam interagir entre si), deverão ser obtidos pelo menos três modos para que o mecanismo de transferência de energia possa existir. As distribuições de campo da componente $E_y$ para cada um desses modos são mostradas na Fig. 3.3.8.

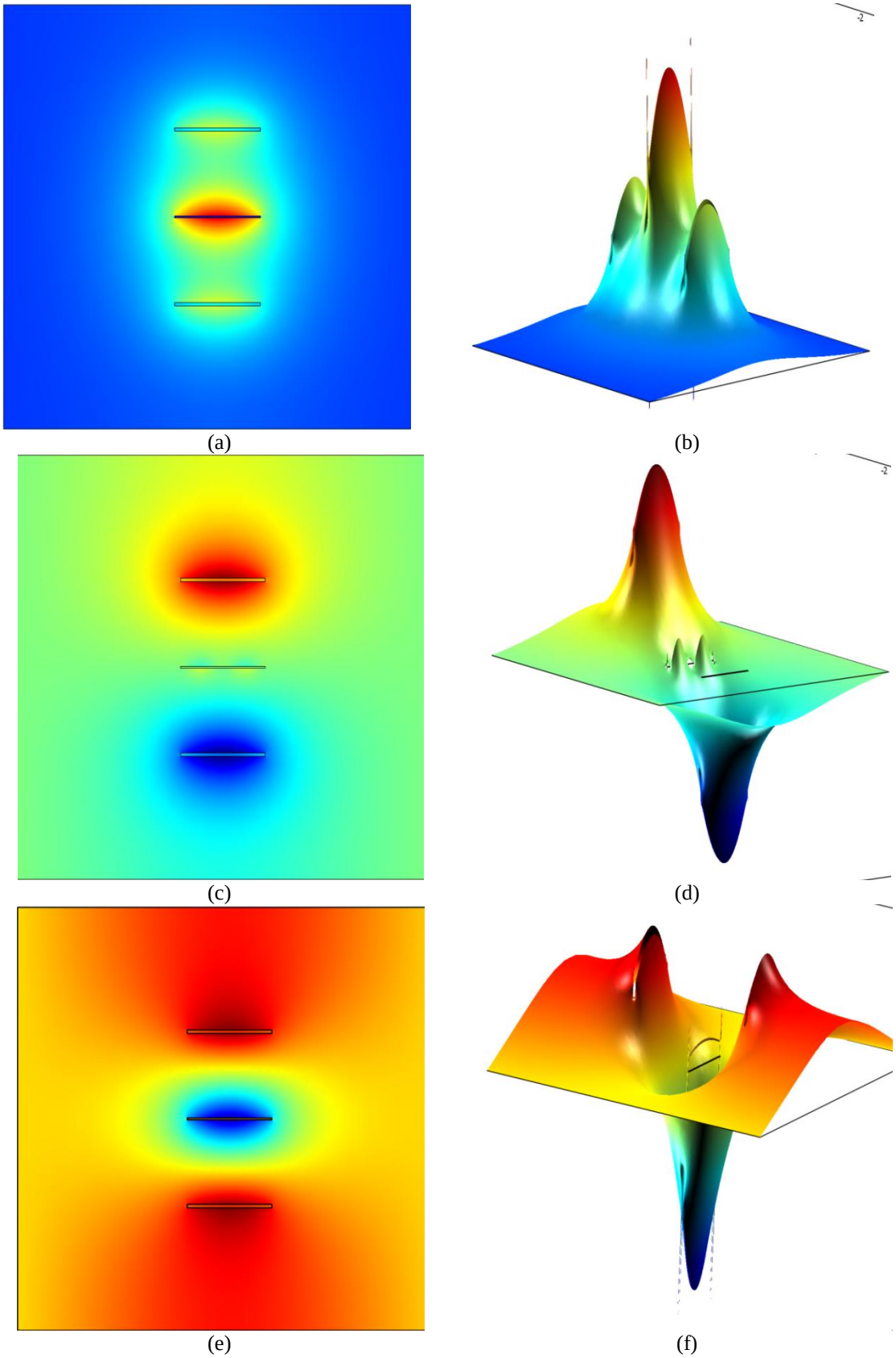
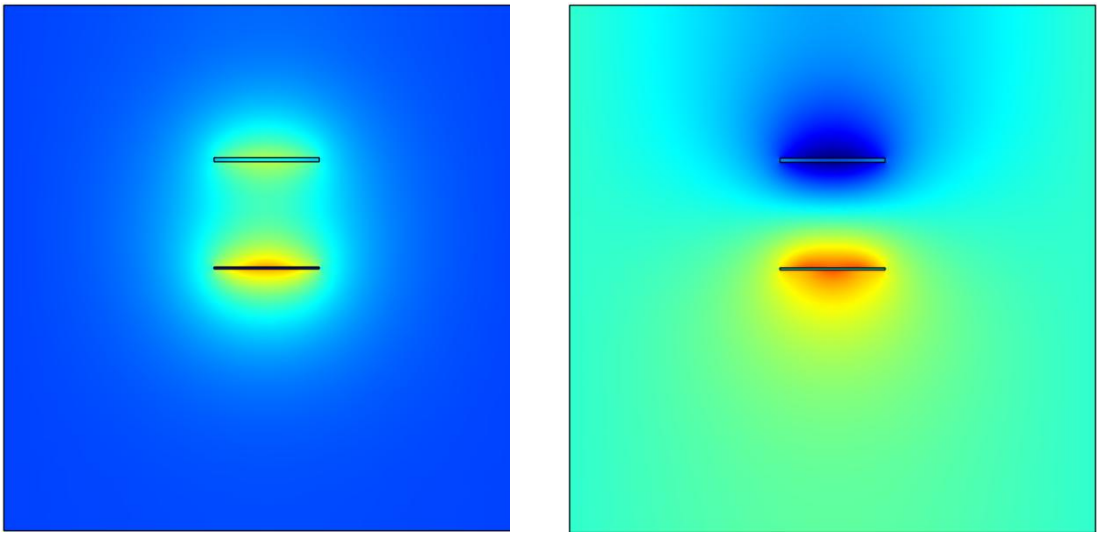



*Figura 3.3.8.* (a) Distribuição de campo $E_y$ para modo 1 com $t_m = 20nm$, $t_d = 40nm$, $w = 1\mu m$ e $t = 1000nm$, (b) campo $E_y$ em *3D*, (c) campo $E_y$ para modo 2, (d) modo 2 em *3D*, (c) e (d) são distribuição de campo $E_y$ para modo 3 e sua forma em *3D*, respectivamente.

A seguir, como definido no passo 4, determina-se o comprimento de acoplamento, $L_\pi$, calculado via Eq. (3.3-3). Como a presente estrutura é totalmente simétrica, o coeficiente de acoplamento pode ser obtido fazendo-se a simulação na qual estão presentes apenas os guias 2 e 4. Assim, os seguintes resultados são obtidos,

- $n_{eff_par} = 1{,}458639 - j7{,}033315 \times 10^{-5}$ ,
- $n_{eff_ímpar} = 1{,}450665 - j3{,}812367 \times 10^{-5}$, e
- $L_\pi = 28{,}066\mu m$ .

As distribuições de campo referentes aos modos pares e ímpares são apresentadas na Fig. 3.3.9.



(a) (b)

*Figura 3.3.9.* Distribuição de campo $E_y$ para estrutura com apenas guias 2 e 4, (a) modo par e (b) ímpar.

Repetindo o processo de obtenção de comprimento de acoplamento mencionado anteriormente, obtemos o gráfico de $L_\pi$ em função da separação entre o guia metálico e o guia dielétrico ($t$), ilustrada na Fig. 3.3.10. Pode ser observado que não foram apresentadas as curvas completas de $L_\pi$ para os casos da espessura de metal $\leq$ 20nm porque quando a distância de separação for reduzida, um dos três supermodos de mais baixa ordem da estrutura (ilustrada na Fig. 3.3.9) torna-se cortado. Os resultados mostrados nesta figura são muito convenientes em virtude de permitirem definir o comprimento da seção de interação do acoplador. Assim, caso se deseje uma estrutura mais curta, deve-se privilegiar uma maior interação de campo entre os guias (o que significa reduzir a separa entre os mesmos). O oposto deve acontecer para o caso de se desejar longas estruturas. Um comentário adicional com respeito ao último caso é que comprimentos mais longos podem ser obtidos definindo-se o comprimento total da estrutura em termos do comprimento de acoplamento, $L_\pi$ (lembrando que esse parâmetro

refere-se à distância para máxima transferência entre os guias).

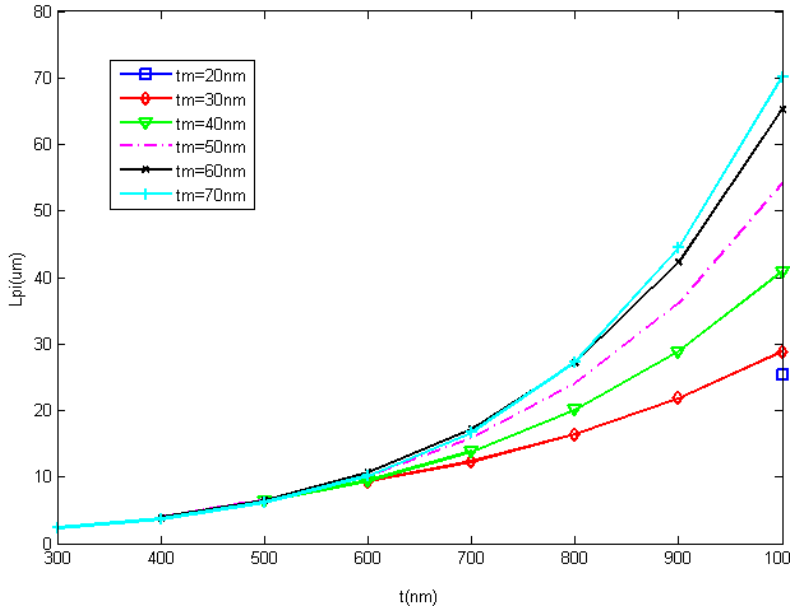



*Figura 3.3.10.* Comprimento de acoplamento de acoplador direcional de três núcleos.

Tendo vista a possibilidade de fabricação desta estrutura, torna-se necessário realizar um estudo de sensibilidade de seus parâmetros físicos e geométricos. Isso permite inferir sobre como pequenas variações de parâmetros durante a fabricação do dispositivo podem interferir no desempenho global do dispositivo. Essa análise é realizada a seguir.

### 3.3.1 – Análise de sensibilidade

Os dispositivos ópticos são em geral fabricados através dos processos de deposição de camadas, litografia, etc. Estes processos, embora muito precisos, estão sujeitos a variações que muitas vezes necessitam ser antecipadas durante a etapa de modelagem.

Nesta seção, será realizada a análise de sensitividade das estruturas projetadas. Para o acoplador direcional de três núcleos, será estudado como o seu parâmetro essencial, ou seja, o comprimento de acoplamento ($L_\pi$) é influenciado por pequenas imprecisões nas espessuras de suas camadas. Será apresentada a seguir a dependência de $L_\pi$ quando parâmetros tais como largura da estrutura, separação entre guias, espessura de guia dielétrico e espessura de metal (ou seja, $w$, $t$, $t_d$ e $t_m$, respectivamente) forem variados.

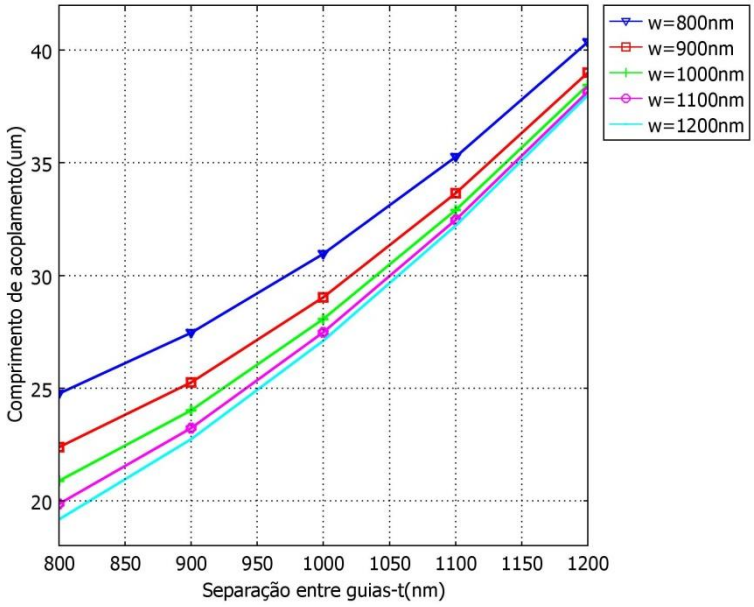
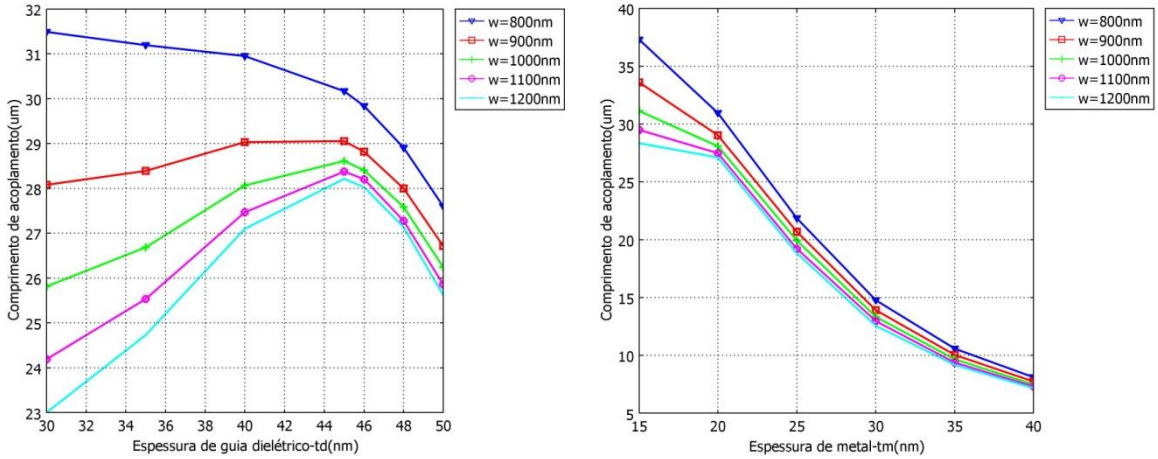



*Figura 3.3.11.* Comprimento de acoplamento $L_\pi$ quando varia a largura da estrutura *w* e a separação entre guias, *t*.

A dependência de $L_\pi$ com a separação entre os guias, *t*, é mostrada na Fig. 3.3.11. Fazendo-se a distância de separação entre guias variar em torno de 20% (estrutura foi projetada originalmente para uma distância de separação $t = 1000nm$), foi observado uma grande variação do comprimento de acoplamento. Para o caso de largura $w = 800nm$, a variação de $L_\pi$ foi maior que 21%, o que representa uma variação considerável.

Aplicando o mesmo raciocínio para os parâmetros $t_d$ (espessura do guia dielétrico) e $t_m$ (espessura do metal), pode-se obter a variação de $L_\pi$ como mostrada na Fig. 3.3.12(a) e (b), respectivamente. Como se pode ver, variações na espessura da camada referente ao guia dielétrico podem causar grandes variações em $L_\pi$. O mesmo não ocorre em relação ao metal em virtude deste apresentar normalmente um maior confinamento de campo em relação ao guia dielétrico.




(a) (b)

*Figura 3.3.12.* Comprimento de acoplamento, (a) variando a espessura de guia dielétrico, e (b) variando a espessura do metal.

Outro importante parâmetro investigado nesta seção refere-se à escolha do modelo material para o filme metálico. Nos exemplos das Figs. 3.3.11 e 3.3.12 foram adotados valores para a permissividade elétrica para a prata (Ag) obtida de [37]. Já para os resultados mostrados nas Fig. 3.3.13 a permissividade da Ag foi obtida via modelo HOM [64]. Nesse caso, para $\lambda = 633nm$ obtém-se $\varepsilon_{m_HOM} = -15{,}8581 + j1.4921$. O que pode ser observado nestas figuras é que as variações em relação ao modelo material de [37] são bastante aceitáveis. No caso de um acoplador direcional, estas variações não devem comprometer o desempenho global do dispositivo.

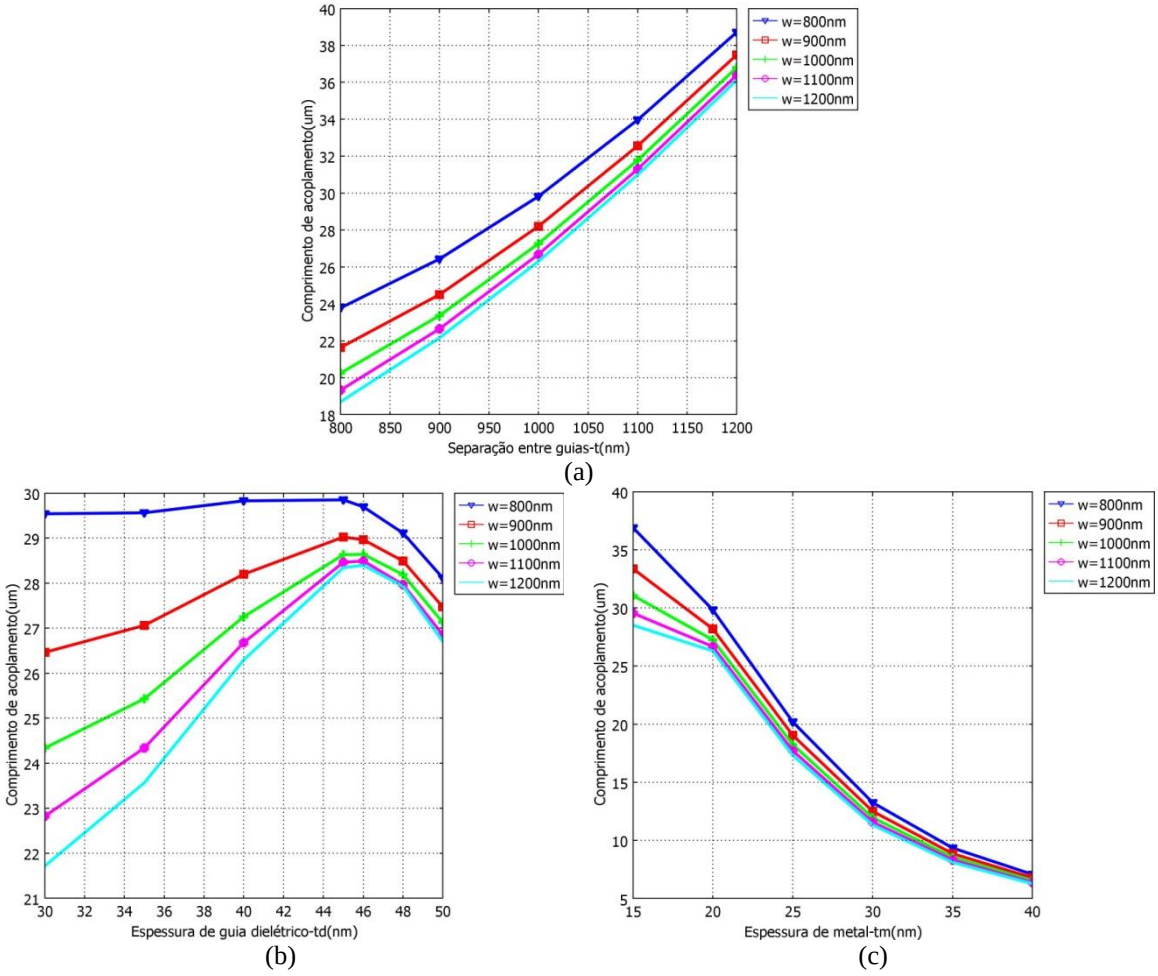



*Figura 3.3.13.* Comprimento de acoplamento obtido utilizando HOM [64], (a) varia a distância de separação entre guias, (b) varia a espessura de guia dielétrico e (c) varia a espessura de metal.

Como conclusão desta seção, é possível afirmar que o acoplador direcional plasmônico projetado neste trabalho é uma estrutura bastante promissora do ponto de vista de aplicações em telecomunicações. Os resultados indicam que mesmo variações de parâmetros decorrentes de imprecisões durante o processo de fabricações não apresentam grandes influências no desempenho global da estrutura.

## 3.4 - Ressoadores em anel

Nesta seção são apresentados resultados de simulação numérica para uma das mais clássicas geometrias em comunicações ópticas, ou seja, ressoador óptico em anel. No presente caso, esta estrutura será adaptada para aplicações que requeiram a propagação de SPPs, notadamente em sensores e dispositivos ópticos para telecomunicações. Vale salientar que a abordagem adotada aqui é ainda inédita na literatura, e permite sua rápida utilização em filtros ópticos de comprimentos de onda para aplicações WDM (multiplexação em comprimento de onda), (bio) sensores, etc. Adicionalmente, o roteiro de projeto adotado aqui pode ser aplicado com sucesso não apenas em estruturas do tipo *race-track*, objeto de estudo aqui, mas também em anéis circulares.

Ressoadores em anel são componentes ópticos que funcionam como filtros de comprimentos de onda. Neste tipo de dispositivo, quando vários comprimentos de onda são acoplados na porta "*in*" (entrada), apenas o comprimento de onda para o qual o dispositivo foi projetado, $\lambda_i$, passará para a porta de saída "*drop*", como ilustrado na Fig. 3.4.1. Em aplicações onde apenas um comprimento de onda é utilizado, como no caso de sensores, a intensidade de saída na porta *drop* será afetada pela ação do mensurando, que altera a condição de ressonância da estrutura.

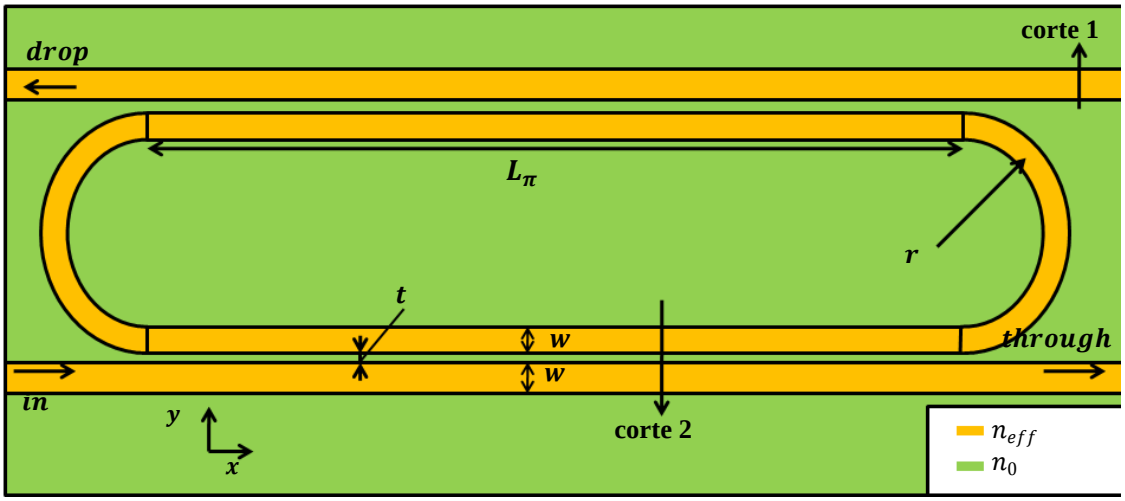



*Figura 3.4.1.* Ressoador de anel, com largura de canal $w$, raio $r$, comprimento de acoplamento $L_\pi$, e separação $t$.

Em se tratando de um ressoador baseado em SPP, a sistemática de projeto segue os mesmos passos adotados em ressoadores puramente dielétricos. No entanto, cuidados adicionais devem ser tomados com o objetivo de reduzir as perdas de propagação (e assim maximizar a distância de propagação), como ficará claro mais adiante. Por ser uma

estrutura que utiliza guias curvos, o confinamento lateral de campo passa a ser um elemento crucial a fim de se evitar perdas por radiação. Uma maneira elegante de se obter elevado confinamento lateral é pela adoção da geometria "*rib*", como ilustrado na Fig. 3.4.2 (a). No caso de guias envolvendo SPP, é esperado que o confinamento de campo seja ainda mais elevado tendo em vista as características de forte localização de campo oferecida pelo efeito de geração de plásmons. O projeto deste ressoador apresenta um complicador adicional em virtude de sua dimensão e também das razões de aspecto das diversas camadas de materiais empregadas, o que acaba por exigir uma elevada densidade de pontos em sua discretização. Isso representa um enorme desafio computacional mesmo nos dias de hoje. Felizmente, este problema pode ser minimizado satisfatoriamente contanto que a estrutura seja reduzida para duas dimensões. Uma maneira de se realizar esta tarefa consiste na adoção do método do índice efetivo, descrito a seguir.

Como discutido no capítulo anterior, uma alternativa para se reduzir as perdas de propagação em guias plasmônicos consiste na utilização de estruturas multicamadas. Outro mecanismo de perda a ser considerado são as perdas por radiação em curvaturas, que podem ser consideravelmente reduzidas com a utilização da estrutura *rib* e também com elevados contrastes de índice de refração (contraste de índice de refração refere-se à diferença de índices entre dois materiais distintos). Assim, a secção transversal a ser adotada nesta análise é ilustrada na Fig. 3.4.2, e pode ser entendida como o corte 1 indicado na Fig. 3.4.1. Um aspecto importante da estrutura multicamada a ser modelada aqui é a presença de uma camada de isolamento (*buffer*) de baixo índice de refração $n_d$ colocada imediatamente acima e abaixo da camada de metal. A finalidade desta camada é reduzir a interação do campo com o metal reduzindo, assim, as perdas de propagação. Esse artifício foi sugerido originalmente por Kou et al. [40] para a modelagem de guias de ondas plasmônicos de longo alcance (LRSPP).

Por se tratar de uma estrutura acoplada, já que há uma região de interação entre dois guias paralelos, é necessário projetar esta estrutura levando este aspecto em consideração. Isso requer uma definição adequada tanto dos parâmetros geométricos, como largura $w$, e as espessuras $t_{g1}$, $t_{g2}$, $t_{g3}$, $t_d$ e $t_m$, assim como dos parâmetros físicos, como os índices de refração dos materiais. Como uma simulação 3D desta estrutura é inviável, tendo em vista a elevada densidade de pontos de discretização, uma alternativa passa a ser a redução da mesma para uma geometria 2D. É exatamente aqui que entra em cena o método do índice efetivo. Para isso, os seguintes passos devem ser seguidos:

1. Projetar um guia *rib* isolado, como mostrado na Fig. 3.4.2(a). Isso passa pela determinação de todos os parâmetros físicos e geométricos. Lembrando que nesta etapa deve ser seguido rigorosamente todo o procedimento de otimização visando a minimização das perdas de propagação, o que pode ser também traduzido como minimizar a parte imaginária do índice efetivo, $n_{eff}$. Este índice efetivo será utilizado como o índice de refração da região guia de onda da estrutura 2D ilustrada na Fig. 3.3.1 (região de largura *w*);
2. As duas regiões localizadas à esquerda e direita do *rib*, por não constituírem um guia de onda de fato, podem ser interpretadas simplesmente como o ar, cujo índice de refração é $n_0 = 1{,}0$. Com isso, tem-se um guia cuja casca é $n_0$ e núcleo é $n_{eff}$, como ilustrado na Fig. 3.4.2(c);
3. No caso de ser necessária a variação do comprimento de onda, o passo 1 deverá ser repetido tantas vezes quantas forem necessárias de modo a se obter a dependência de $n_{eff}$ com $\lambda$ (tendo em vista a presença do metal, o índice efetivo será, necessariamente, complexo). É aconselhável, portanto, descrever $n_{eff}(\lambda)$ como uma função polinomial para facilitar o inclusão da dispersão nos cálculos modais;
4. O comprimento de interação é crucial nesta estrutura, sendo obtido da seguinte forma:

$$L_\pi = \frac{\pi}{\beta_1 - \beta_2} = \frac{\pi}{\Delta\beta} \tag{3.4.1}$$

   onde $\beta_1$ e $\beta_2$ são as constantes de propagação dos modos do guia acoplado (Fig. 3.4.2(b). A opção pelo cálculo de $L_\pi$ da maneira descrita aqui permite uma maior precisão em comparação ao cálculo diretamente da estrutura 2D de um guia de cinco camadas (vide corte 2 na Fig. 3.4.1). O parâmetro $\Delta\beta$ pode ainda ser definido como

   $\Delta\beta = \Delta k_{sp} = \frac{2\pi}{\lambda_i}\left(n_{eff\,1} - n_{eff\,2}\right)$, onde

   $n_{eff\,1}$ - o índice efetivo do modo par e

   $n_{eff\,2}$ - do modo ímpar.

   $\lambda_i$ - o comprimento de onda a ser filtrado.
5. Passa-se agora à definição da separação $t$, que é o parâmetro que controla a intensidade de acoplamento entre os dois guias. Como as perdas de propagação em guias de plásmons são um fator limitante crucial, a redução do comprimento de interação passa a ser uma escolha interessante. Assim, a escolha de $t$ deve levar não apenas aspectos práticos relativos ao processo de fabricação, mas também a máxima

distância de propagação possível para que o sinal entre na porta *in* e saia na porta *drop* em níveis aceitáveis.

6. Finalmente, o cálculo do raio do anel ($r$) é realizado de modo que a estrutura como um todo (isso inclui o comprimento das seções retas) esteja em fase, ou seja,

$$2\pi r + 2 \cdot L_{\pi} = m\frac{\lambda_i}{n_{eff}}, \tag{3.4-2}$$

onde $m$ é um número positivo inteiro e $\lambda_i$ é o comprimento de onda de interesse. Ou seja, o comprimento total que o sinal percorre deve ser um múltiplo inteiro ($m$) do comprimento de onda ressonante.

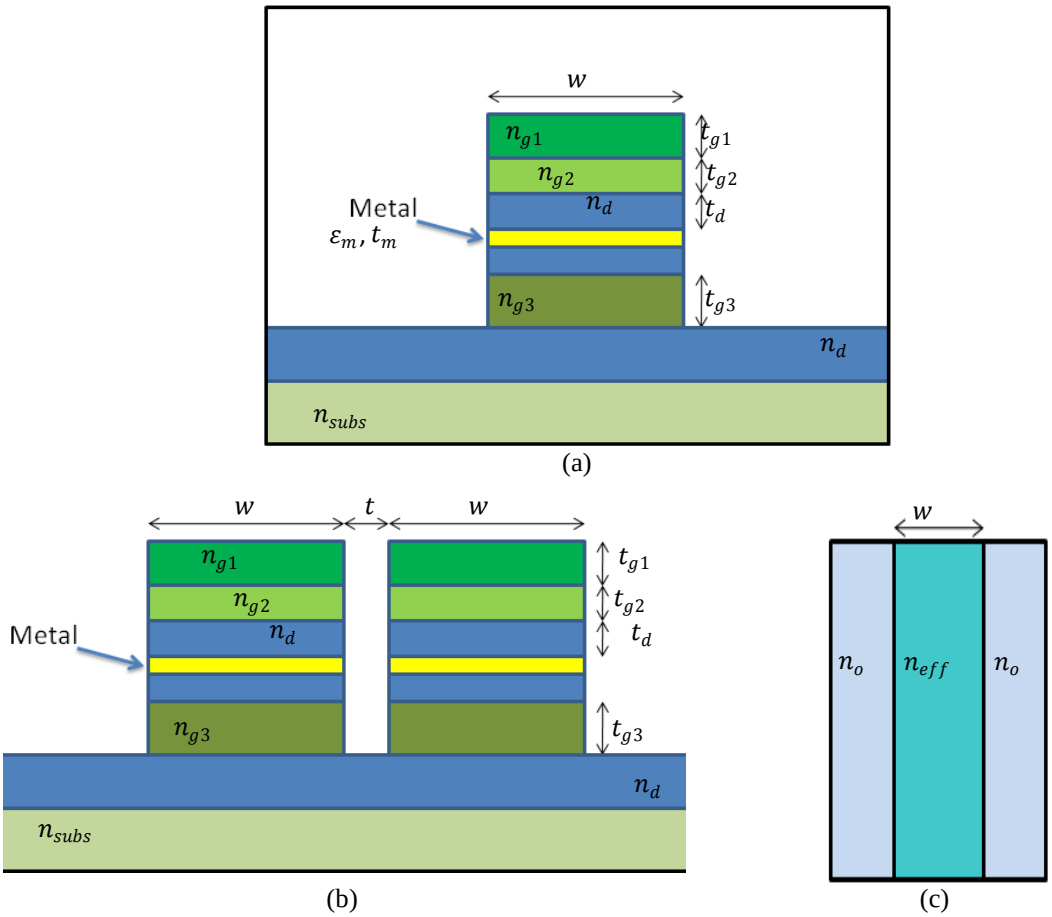



*Figura 3.4.2.* (a) Corte 1, seção transversal do ressoador de anel, (b) corte 2 e (c) Estrutura de ressoador final com seu respectivos valores de índice efetivo.

Inicialmente, é preciso definir o projeto do guia de onda *rib* isolado ilustrado na Fig. 3.4.2(a), o que inclui seus materiais e respectivas espessuras. A espessura da camada de isolamento foi escolhida de acordo com os gráficos de dispersão, confinamento de campo e distância de propagação, mostrados na Fig. 3.4.3(a)-(d). A espessura do metal deve ser selecionada de modo que o modo SPP apresente uma distância de propagação superior ao comprimento físico total do ressoador em anel.

Os índices de refração, e espessuras, das camadas $n_{g1}$, $n_{g2}$ e $n_{g3}$ foram devidamente escolhidos para que o modo a ser guiado ($ss_b^1$) possa ser totalmente confinado e que apresente baixa perda por radiação. Uma das técnicas utilizada para amenizar esse efeito é utilização de um guia dielétrico localizado na parte superior do *rib*. Adicionalmente, esta estrutura é projetada de modo a tornar a distribuição modal da estrutura (que engloba o guia metálico e o guia dielétrico $n_{g1}$) a mais equalizada possível. Isso faz com que o modo confinado seja mais o simétrico possível, o que além de favorecer a excitação da estrutura permite um maior controle da interação com o metal via confinamento modal. É importante ressaltar que tanto o guia dielétrico quanto o guia metálico são projetados de modo a apresentar casamento de fase, exatamente nos moldes do acoplador direcional projetado na seção anterior.

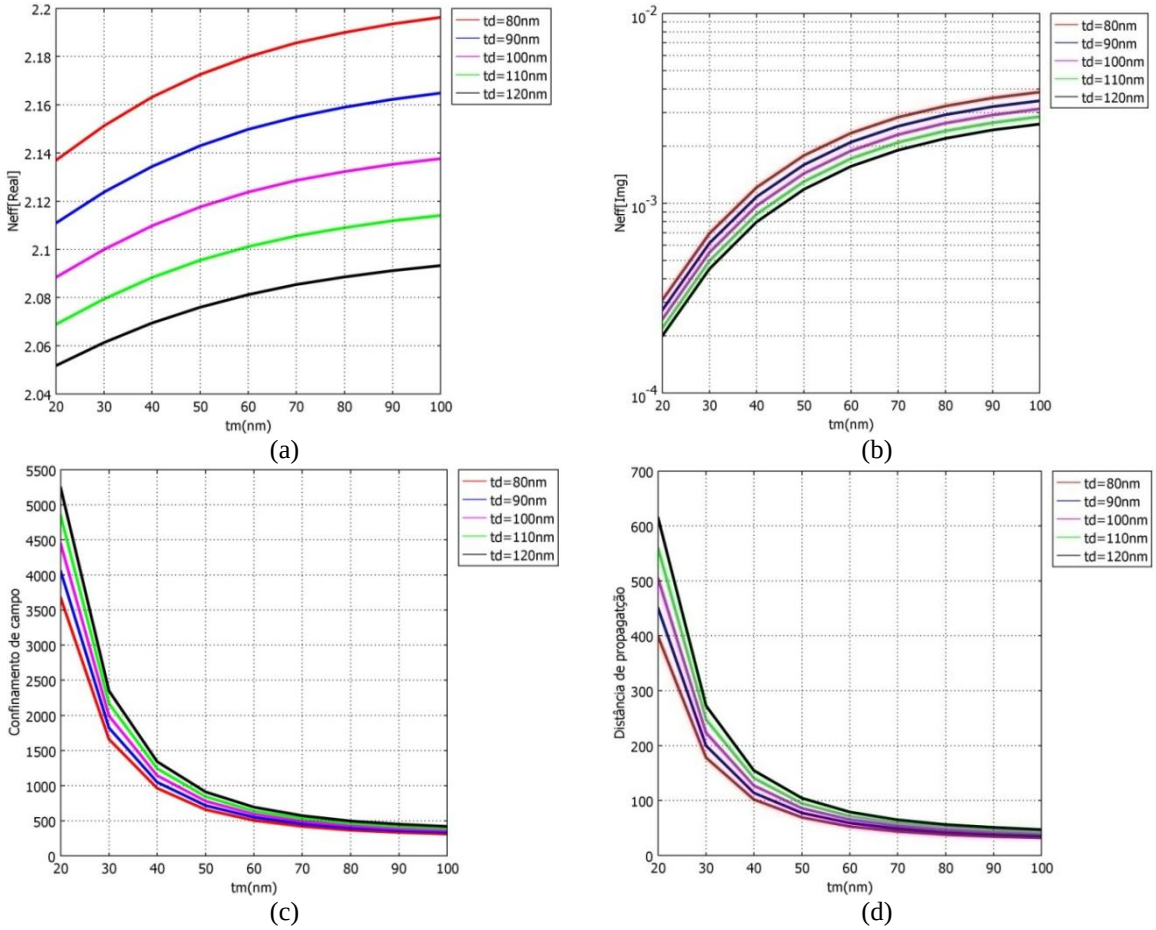



*Figura 3.4.3.* Relação de dispersão de um guia *rib* isolado, (a) $Re[n_{eff}]$, (b) $Im[n_{eff}]$, (c) confinamento de campo e (d) distância de propagação.

Em seguida, passou-se ao projeto do ressoador em anel seguindo os passos apresentados anteriormente. Por conveniência, o ressoador em questão operará na freqüência de telecomunicações, ou seja, $\lambda_i = 1550nm$. Os parâmetros físicos e

geométricos adotados são listados na TABELA 2. Vale lembrar que a definição desses parâmetros foi feita de modo a minimizar as perdas.

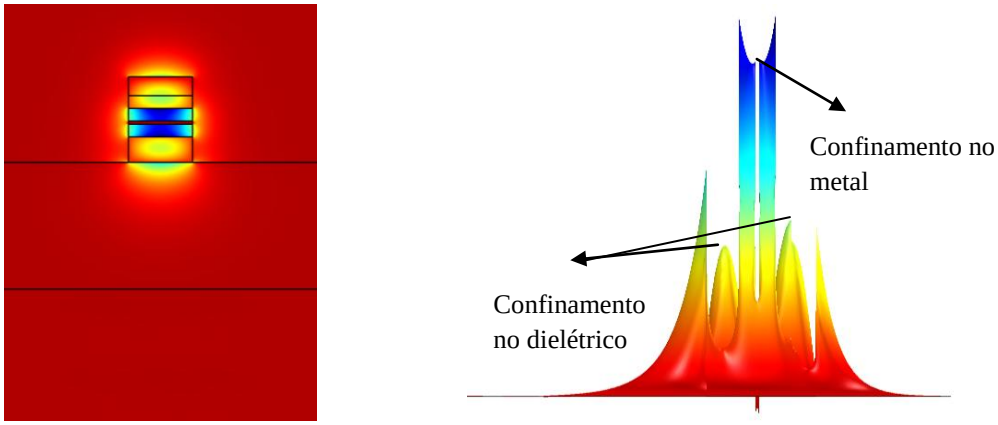
TABELA 2. Dados do ressoador em anel vistam da seção transversal.

| | Espessura | Índice |
|---|---|---|
| **Metal - ouro** | $t_m = 25nm$ | $n_m = 0{,}4974 + j10{,}687$ [64] |
| **Buffer e casca** | $t_d = 100nm$ | $n_d = 1.76$ |
| **C1-Material 1** | $t_{g2} = 100nm$ | $n_{g2} = 3.2$ |
| **C2-Material 2** | $t_{g1} = 150nm$ | $n_{g1} = 3.41$ |
| **C3-Material 3** | $t_{g3} = 200nm$ | $n_{g3} = 3.437$ |
| **Substrato** | - | $n_{subs} = 3.45$ |
| **Espessura** | $w = 500nm$ | - |

Com base nos dados da TABELA 2, foi obtida a distribuição espacial de campo do modo LRSPP do guia isolado (passo 1), como mostrado na Fig. 3.4.4, cujo índice efetivo $n_{eff} = 2{,}0944 + 3{,}8168 \times 10^{-4}$ (este será o índice de refração da região guia de onda de largura *w* da estrutura 2D). A distância de propagação deste modo é $d_p = 323{,}16\mu m$. Para o passo 2 tem-se que o índice $n_0 = 1{,}0$, já que não há estrutura multicamada nos lados do *rib*. Tendo em vista que será investigada a resposta em freqüência desta estrutura, o passo 3 teve que ser obedecido. Os polinômios resultantes desta análise de dispersão dos dois modos acoplados são dados abaixo (sendo um para parte real de $n_{eff}$ e outro para parte imaginária):

$Re[n_{eff}(\lambda)] = 4{,}08098604512 \times 10^{11} \times \lambda^2 - 0{,}00196487390031 \times 10^9 \times \lambda + 4{,}15956050618517$, e

$Im[n_{eff}(\lambda)] = 2{,}99211942021 \times 10^9 \times \lambda^2 - 8{,}86405785132 \times 10^3 \times \lambda + 0{,}00693170795655$.




(a) (b)

*Figura 3.4.4.* Distribuição de campo $E_y$ do modo simétrico do guia *rib* isolado, (a) vista na direção *xy* e (b) vista na direção *yz*.

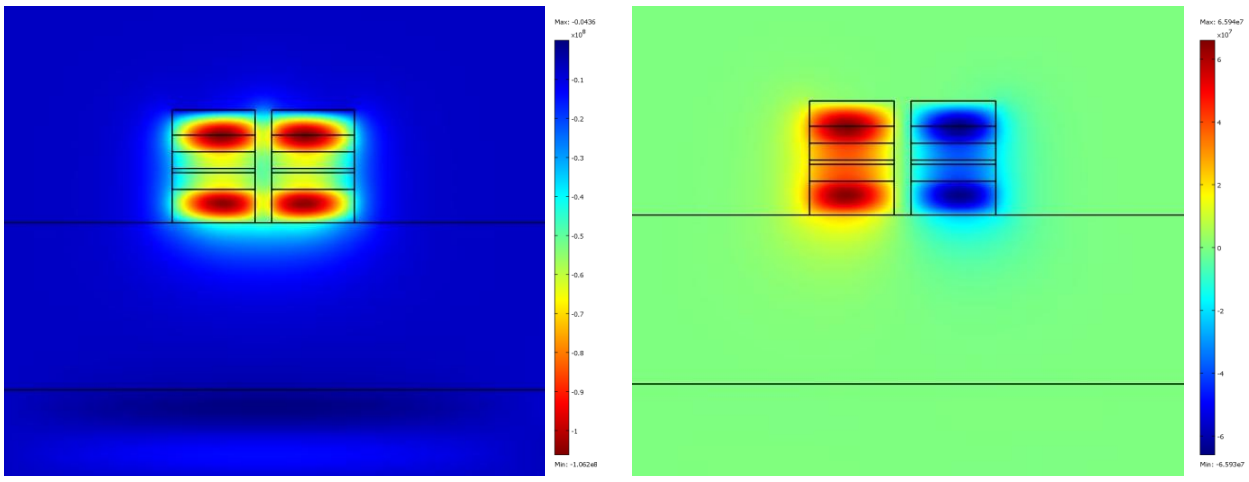
Uma vez projetado o guia de multicamadas e obtido seu índice efetivo, passa-se agora à simulação para o caso ilustrado na Fig. 3.4.2 (b), guia *rib* acoplado. O objetivo é determinar qual o comprimento de acoplamento desta estrutura, referente aos passos 4 e

5. Como os dois guias acoplados são idênticos no presente caso, a separação $t$ deve ser escolhida de modo a satisfazer os requisitos do passo 5. Supondo $t = 100\ nm$, passível de ser obtido com a litografia atual, obtém-se os dois modos de interesse cujos índices efetivos são dados por:

- $n_{eff\,1}(par) = 2{,}1655 + j3{,}5161 \times 10^{-4}$, e
- $n_{eff\,2}(ímpar) = 2{,}0328 + j4{,}1078 \times 10^{-4}$.

onde as respectivas distâncias de propagação são $d_{p1} = 350{,}80\mu m$ e $d_{p1} = 300{,}27\mu m$. As distribuições de campo para esses dois modos são mostradas nas Fig. 3.4.5 (a) e (b), respectivamente. Assim, o comprimento de acoplamento para a estrutura, $L_\pi$, é calculado como sendo

$$L_\pi = \frac{1550 \times 10^{-9}}{2 \times (Re[n_{eff\,1}] - Re[n_{eff\,2}])} = 5{,}84\mu m.$$



(a) (b)

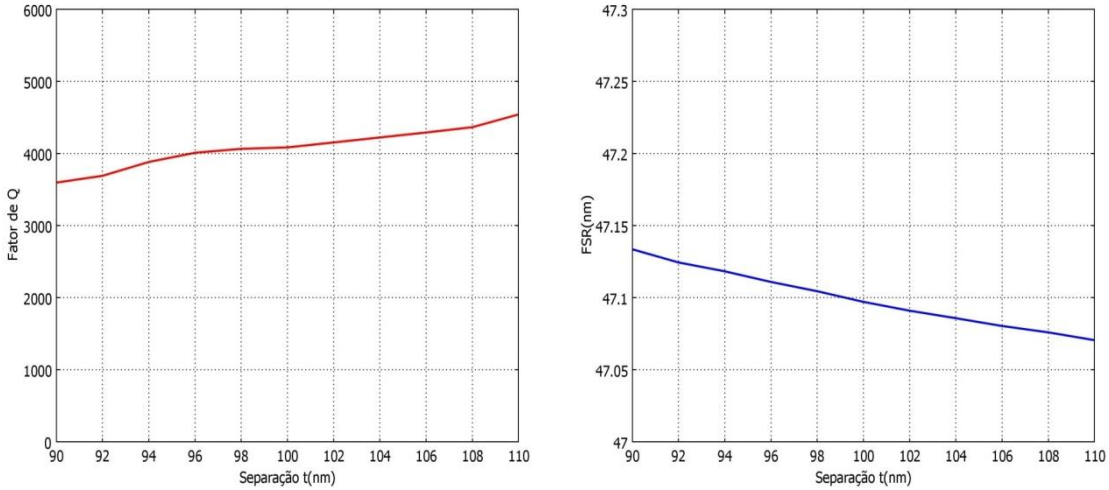
*Figura 3.4.5.* Distribuições de campos $H_x$ para dois guias multicamadas e seus índices efetivos são: (a) modo par com $n_{eff\,1}$ e (b) modo ímpar com $n_{eff\,2}$.

Uma vez calculado o comprimento de acoplamento, passa-se à determinação do raio do anel, o qual é obtido da seguinte forma (passo 6),

$$r = \frac{1}{2\pi}\left(33\,\frac{1550 \times 10^{-9}}{2{,}0944} - 2 \cdot 5{,}84 \times 10^{-6}\right) = 2{,}028\mu m$$

por conveniência, adotou-se aqui $m = 33$. Tendo em vista que a largura $w = 500\ nm$, o raio externo pode ser aproximado por $r_{out} = 2{,}278\mu m$ e o raio interno por $r_{in} = 1{,}778\mu m$. O comprimento total do anel é de $24{,}42\mu m$, o que é maior que a distância de propagação permitida para os modos par e ímpar. Isso garante a esta estrutura um funcionamento adequado, com um fator de qualidade $Q \approx 4084{,}47$ e $FSR \approx 47{,}097nm$. Mantendo os parâmetros do projeto e variando apenas o parâmetro $t$, que é a distância

que separa os guias, são obtidos os gráficos de variação do fator de qualidade e *Free Spectral Range*, ilustrados nas Figs. 3.4.6(a) e (b), respectivamente. Observe na Fig. 3.4.6(a) que o fator de qualidade aumenta com o aumento de $t$. Isso ocorre porque à medida que a separação aumenta, a interação entre os guias diminui, tornando-os fracamente acoplados.




(a) (b)

*Figura 3.4.6.* Resposta em freqüência (a) fator de qualidade *Q* e (b) *FRS – Free Spectral Range*.

A seguir, a estrutura ilustrada na Fig. 3.4.1 foi simulada de acordo com os parâmetros definidos nos passos de projeto. A excitação foi inserida na porta *in*, sendo definidas as portas *Drop* e *Through* como portas da corte e passagem, respectivamente. Na porta de excitação, o comprimento de onda foi variado de $1500nm$ a $1600nm$. Assim, foi obtido o gráfico de $atenuação \times comprimento\ de\ onda$ mostrado na Fig. 3.4.7. As distribuições espaciais de campo no comprimento de onda de corte e passagem são mostradas nas Fig. 3.4.8(a) e (b), respectivamente. Como pode ser visto na Fig. 3.4.7, o corte ocorre nos comprimentos de onda $1524nm$, $1552nm$ e $1581nm$, nos quais apresentam a atenuação de $-23dB$, $-18dB$ e $-7dB$, respectivamente.

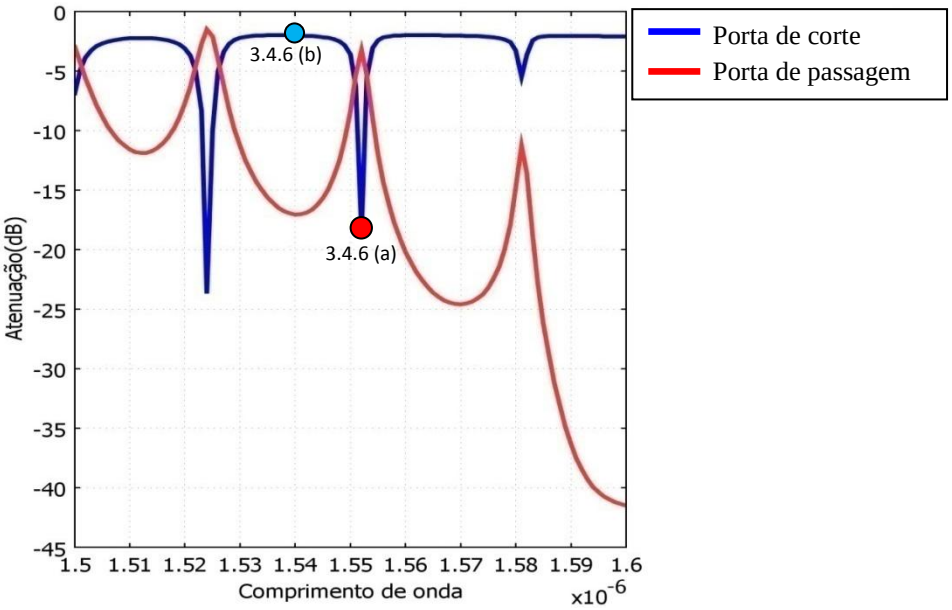
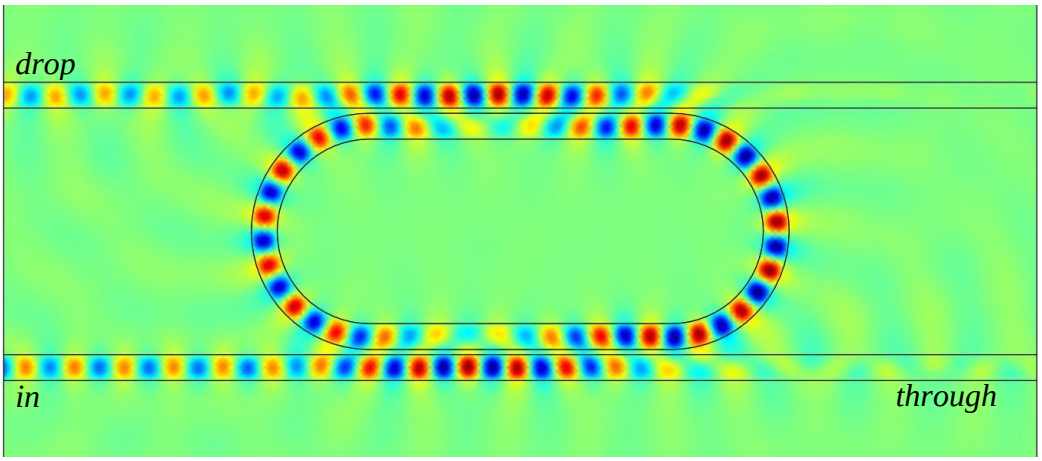
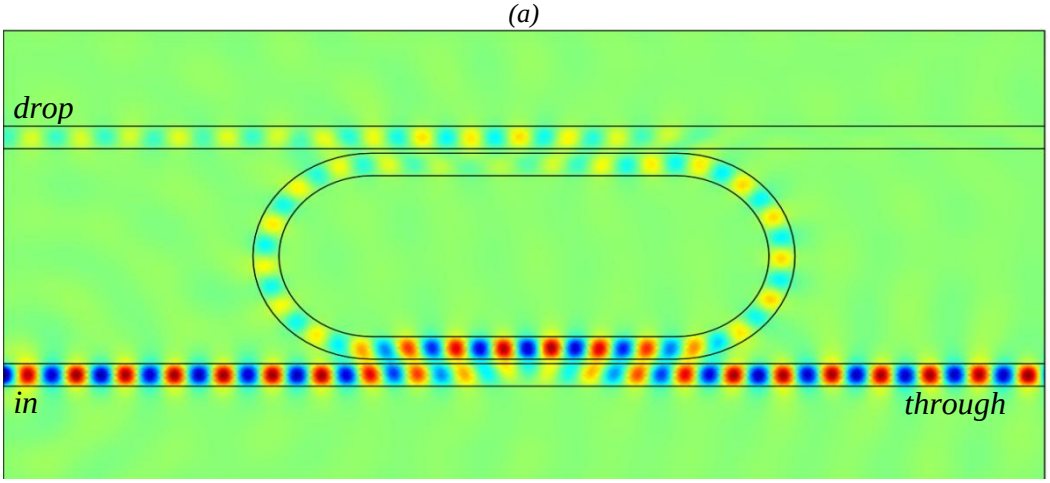



*Figura 3.4.7.* Resposta em freqüência, o gráfico de atenuação para porta de corte - *Drop* (curva azul) e porta de passagem - *Through* (curva vermelha).




*(a)*




*(b)*

*Figura 3.4.8.* (a) Distribuição de campo $H_z$ em $\lambda = 1552nm$. (b). Distribuição de campo $H_z$ em $\lambda = 1540nm$.

Como se pode observar nos resultados da Fig. 3.4.8, tanto para situação de corte quanto para a de passagem, a transferência de energia não foi total. Diversos fatores contribuem para isso, como por exemplo: 1) a aproximação feita pelo método do índice efetivo (redução para 2D), que acaba por não produzir um casamento perfeito, 2) aproximações quanto ao comprimento do anel, e 3) definição do comprimento de acoplamento. Outro ponto a ser observado é a perda de energia por radiação na região curva da estrutura, que é devida à perda de confinamento modal. A perda por radiação pode ser minimizada aumentando-se o parâmetro de confinamento de campo, onde as seguintes opções serão exploradas:

1. Redução da espessura da camada buffer,
2. Aumento da espessura do metal, ou
3. Redefinição da estrutura, aumentando-se os índices dos materiais dielétricos.

Embora a supressão da onda (quando desejada) não tenha ocorrido totalmente, os valores obtidos, principalmente para $1524\ nm$ e $1552\ nm$, são satisfatórios para diversas aplicações de interesse prático, como em sensoriamento, por exemplo. Adicionalmente, mesmo em vista das aproximações necessárias para a simulação desta estrutura, o erro obtido em relação ao comprimento de onda de projeto ($1550\ nm$) foi de apenas $2nm$, o que é bastante aceitável.

### 3.4.1 – Análise de sensitividade

Nesta seção será realizada uma análise de sensitividade similar à aplicada para a estrutura de acoplador direcional de três núcleos. Para o ressoador tipo *Racetrack*, os parâmetros $n_d$, $n_{g1}$, $n_{g2}$, $n_{g3}$, $t$, $t_m$ e $w$ são variados para obtenção da relação de dispersão, do confinamento de campo, da distância de propagação, do comprimento de acoplamento, e da resposta em freqüência em função da espessura do metal.

Iniciou-se a análise fixando todos os parâmetros exceto $n_d$ e $t_m$. O índice do *buffer*, $n_d$, foi variado de 1,6 a 2,0. Já a espessura do metal foi variada de *20nm* a *100nm*. Os resultados obtidos são mostrados nas Fig. 3.4.9 (a)-(e).

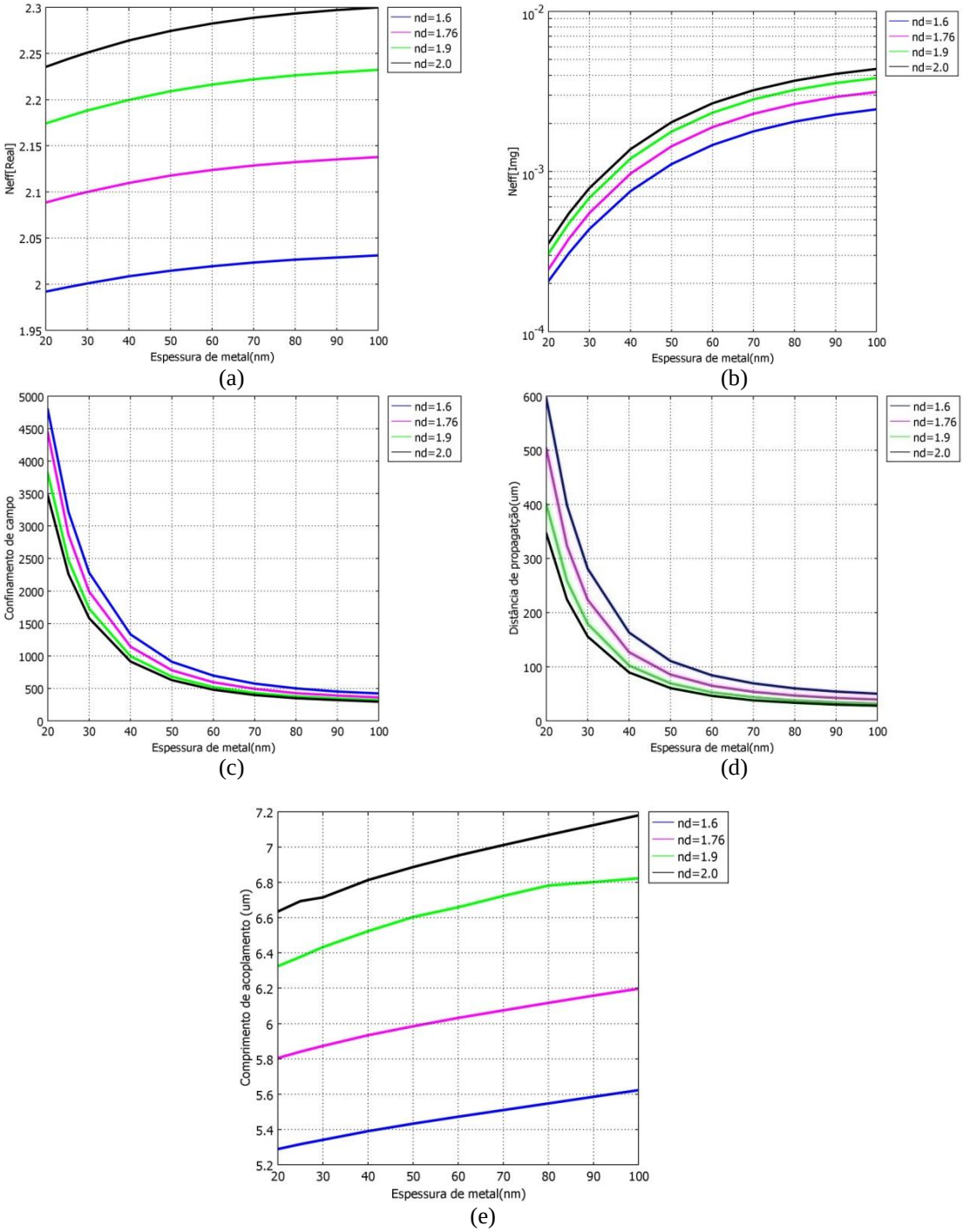



*Figura 3.4.9.* (a) Parte real de índice efetivo, (b) parte imaginária, (c) confinamento de campo, (d) distância de propagação, e (e) comprimento de acoplamento em função da espessura do metal. O índice do *buffer*, $n_d$, é usado como parâmetro.

A seguir, o mesmo raciocínio é aplicado desta vez para os parâmetros $n_{g1}$, $n_{g2}$ e $n_{g3}$. Novamente, figuras de mérito tais como a relação de dispersão, confinamento de campo, distância de propagação e comprimento de acoplamento são obtidas em função da espessura do metal. Estas figuras de mérito obtidas em função da espessura do metal, tendo $n_{g1}$ como parâmetro, são mostradas nas Figs. 3.4.10(a)-(e), respectivamente. Pode-

se ver nestes resultados que variações em $n_{g1}$ causam maiores efeitos sobre o confinamento de campo, a distância de propagação, e o comprimento de acoplamento que para o caso descrito na Fig. 3.4.9. Isso se justifica tendo em vista que $n_{g1}$ representa o índice do guia dielétrico desta estrutura. Variações neste parâmetro influenciam mais substancialmente o casamento de fase entre os guias da estrutura.

O mesmo raciocínio é aplicado a seguir, mas desta vez tendo o índice $n_{g2}$ como parâmetro. Os resultados são mostrados na Fig. 3.4.11 para as mesmas figuras de mérito anteriores, obtidas em função da espessura do metal. Para uma variação de $n_{g2}$ menor que 6,25% ($n_{g2} = 3{,}2 \pm 0{,}2$), o comportamento das curvas ilustradas nas Fig. 3.4.11 (a)-(e) apresentam características similares ao caso ilustrado na Fig. 3.4.10. Isso porque esta camada concentra igualmente bastante campo eletromagnético. Como o confinamento de campo é ligeiramente inferior ao caso anterior, as variações observadas em $L_\pi$ não são tão significativas.

A seguir, as figuras de mérito anteriores são investigadas novamente em função da espessura do metal, $t_m$, mas desta vez tendo a variação do índice $n_{g3}$ como parâmetro. Os resultados são mostrados nas Fig. 3.4.12 (a)-(e). Como esta camada também apresenta um confinamento de campo bastante razoável, variações de índice (ou mesmo de espessura) tendem a causar variações razoáveis no confinamento de campo, distância de propagação, e comprimento de acoplamento.

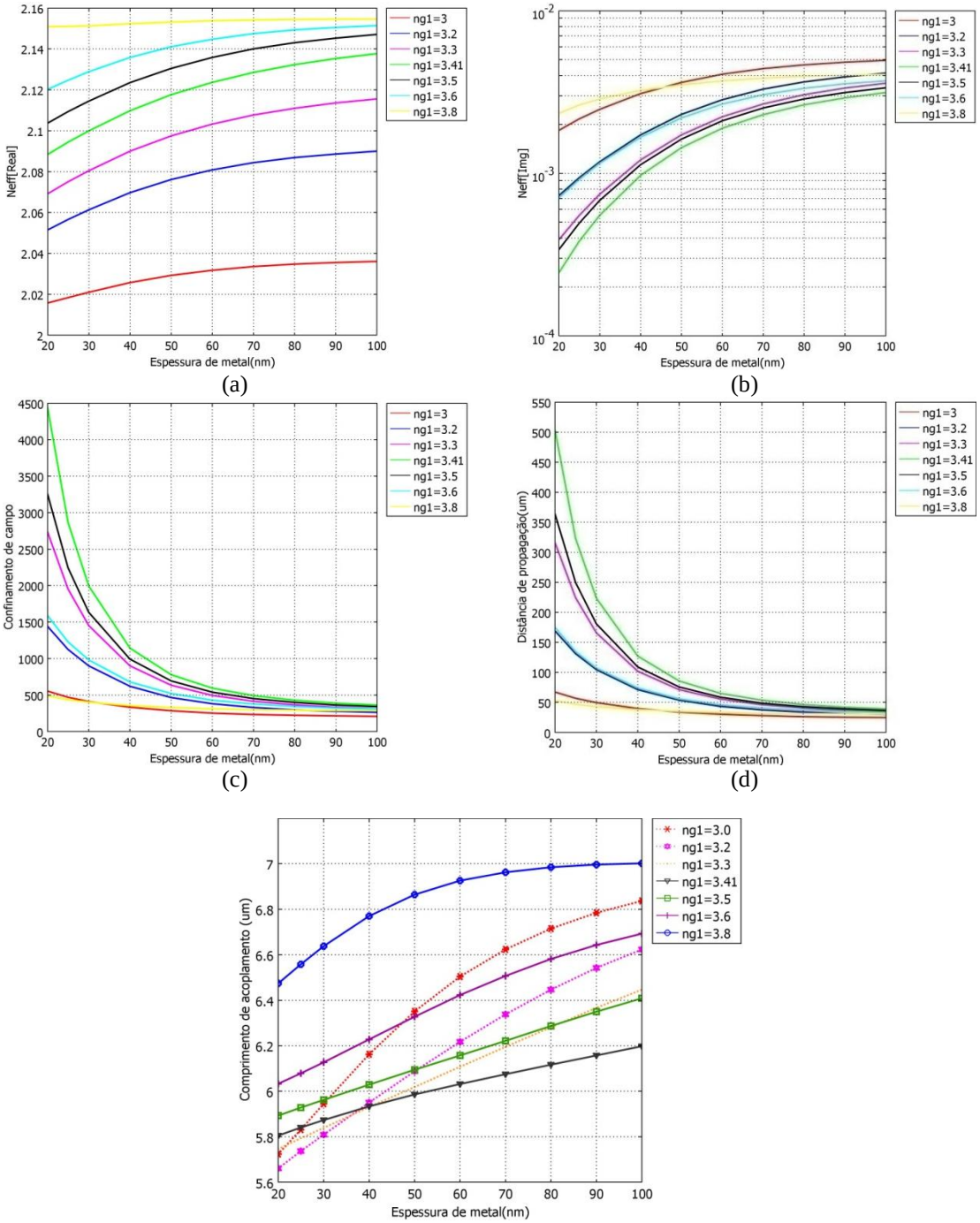



*Figura 3.4.10.* Os parâmetros são fixos exceto $t_m$ e $n_{g1}$. (a) parte real do índice efetivo, (b) parte imaginária, (c) confinamento de campo, (d) distância de propagação, e (e) comprimento de acoplamento em função da espessura do metal. O índice do guia dielétrico, $n_{g1}$, é usado como parâmetro.

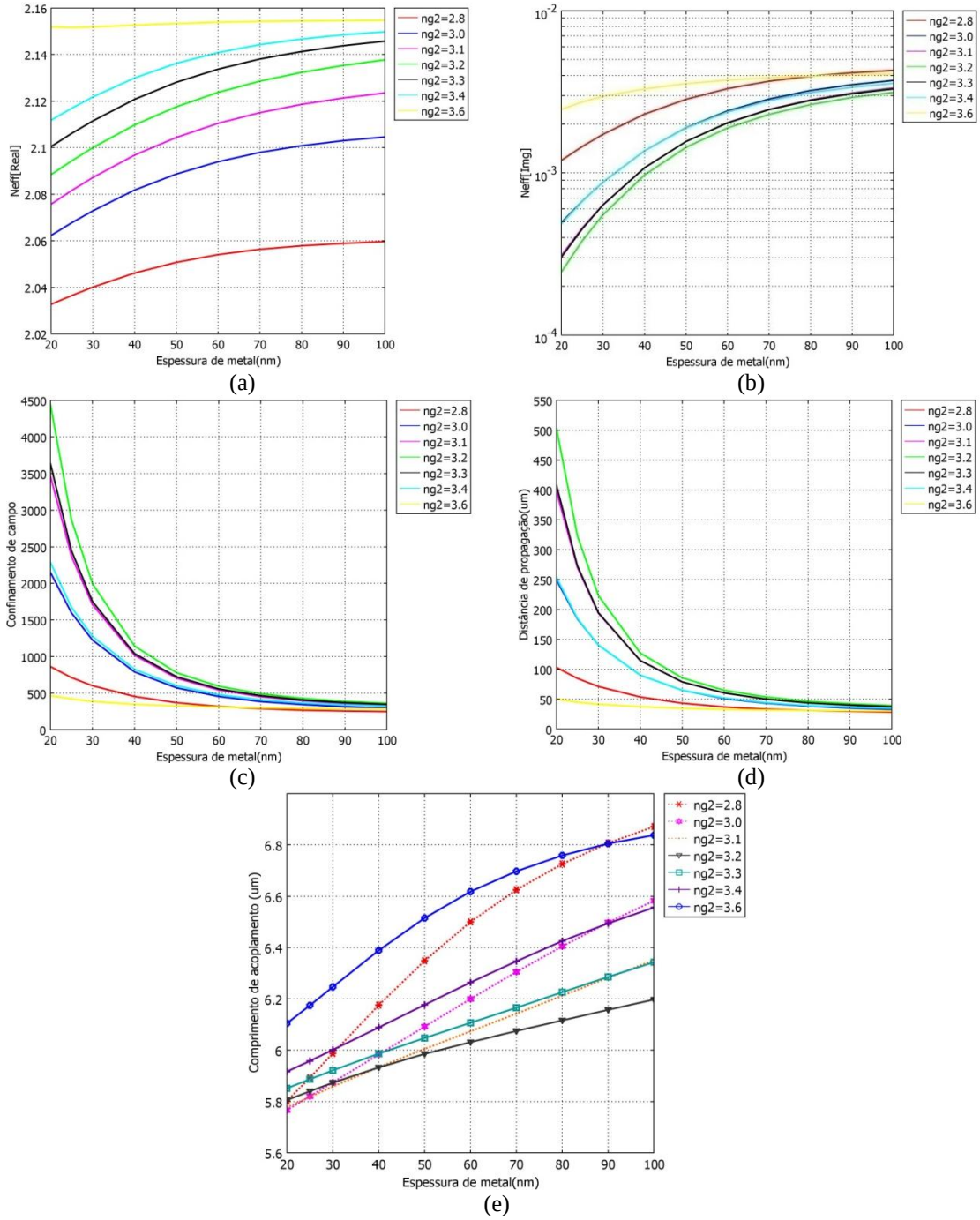



*Figura 3.4.11.* Os parâmetros são fixos exceto $t_m$ e $n_{g2}$, (a) parte real de índice efetivo, (b) parte imaginária, (c) confinamento de campo, (d) distância de propagação, e (e) comprimento de acoplamento em função da espessura do metal. O índice $n_{g2}$ é usado como parâmetro.

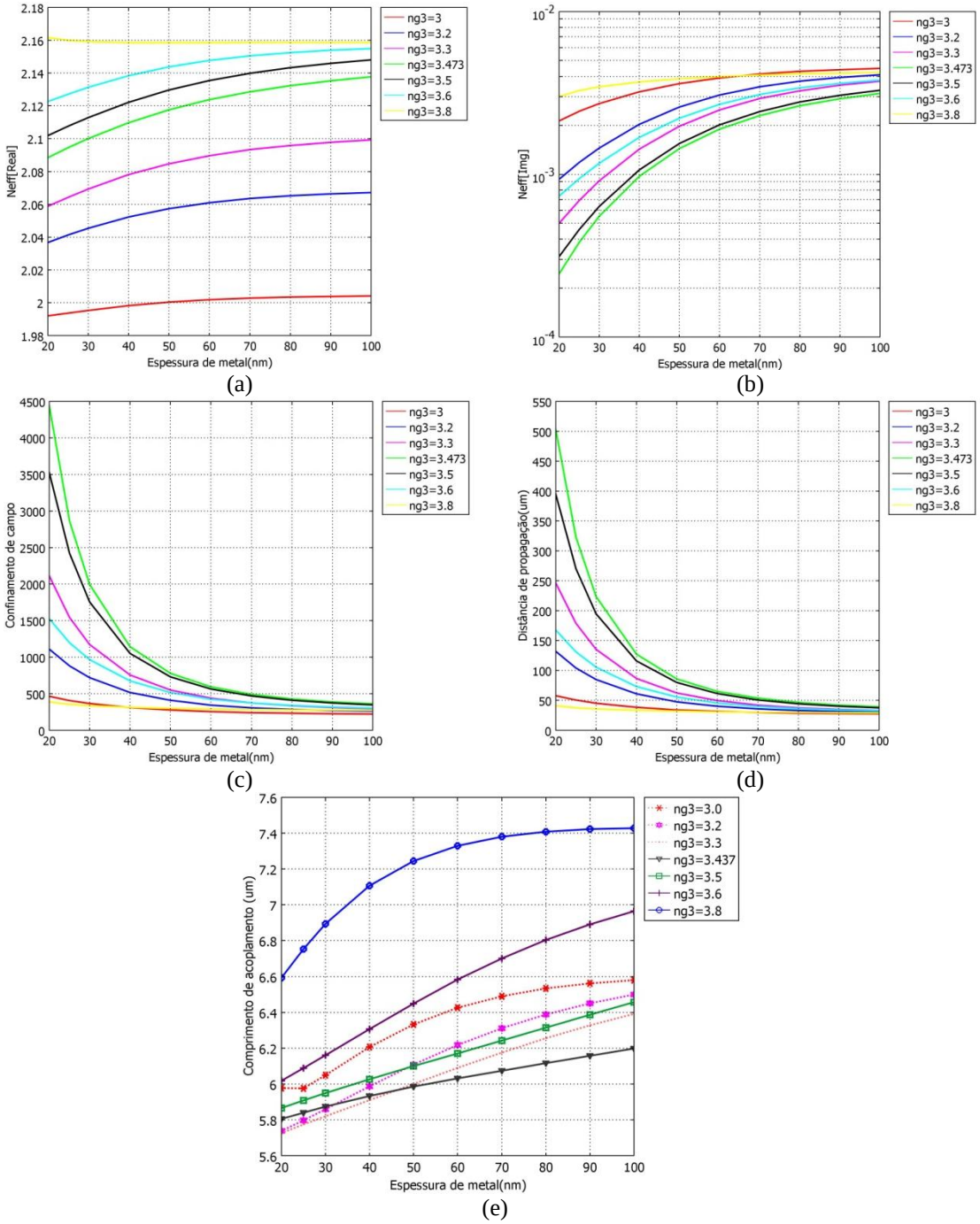



*Figura 3.4.12.* Os parâmetros são fixos exceto $t_m$ e $n_{g3}$, (a) parte real de índice efetivo, (b) parte imaginária, (c) confinamento de campo, (d) distância de propagação, e (e) comprimento de acoplamento em função da espessura do metal. O índice $n_{g3}$ é usado como parâmetro.

As análises realizadas até este ponto foram realizadas tendo a seção transversal da estrutura do ressoador *racetrack*, ilustrada nas Fig. 3.4.2 (a) e (b), como base. A seguir será apresentado um estudo de como pequenas variações de largura de guia *w* e separação entre guias *t* influenciam na resposta em freqüência da estrutura. Nesta análise, será permitida uma variação de 10% no valor de *w*. E para cada valor de *w*, vários valores de *t* serão analisados. Os resultados obtidos são mostrados na Fig. 3.4.13. Assim como nos

resultados anteriores, são mostrados nos gráficos a seguir as curvas referentes à estrutura original para efeito de comparação. O que se pode ver nesses resultados é que, como esperado, a largura *w* e a separação *t* influenciam consideravelmente a definição da freqüência de ressonância e a magnitude da atenuação do dispositivo. Isso sugere que esses parâmetros devem ser escolhidos adequadamente levando-se me conta a resolução obtida durante a etapa de fabricação destas estruturas.

Ao mesmo tempo, os resultados mostrados na Fig. 3.4.13 também sugerem que mesmo que as variações não intencionais venham a ocorrer durante a fabricação do dispositivo, o desempenho pode ainda ser bastante satisfatório, com elevado fator de qualidade *Q* e boa FSR.

Em resumo, a estrutura do ressoador em anel proposta neste trabalho é, sem dúvida nenhuma, um excelente candidato para aplicações em sensoriamento e telecomunicações.

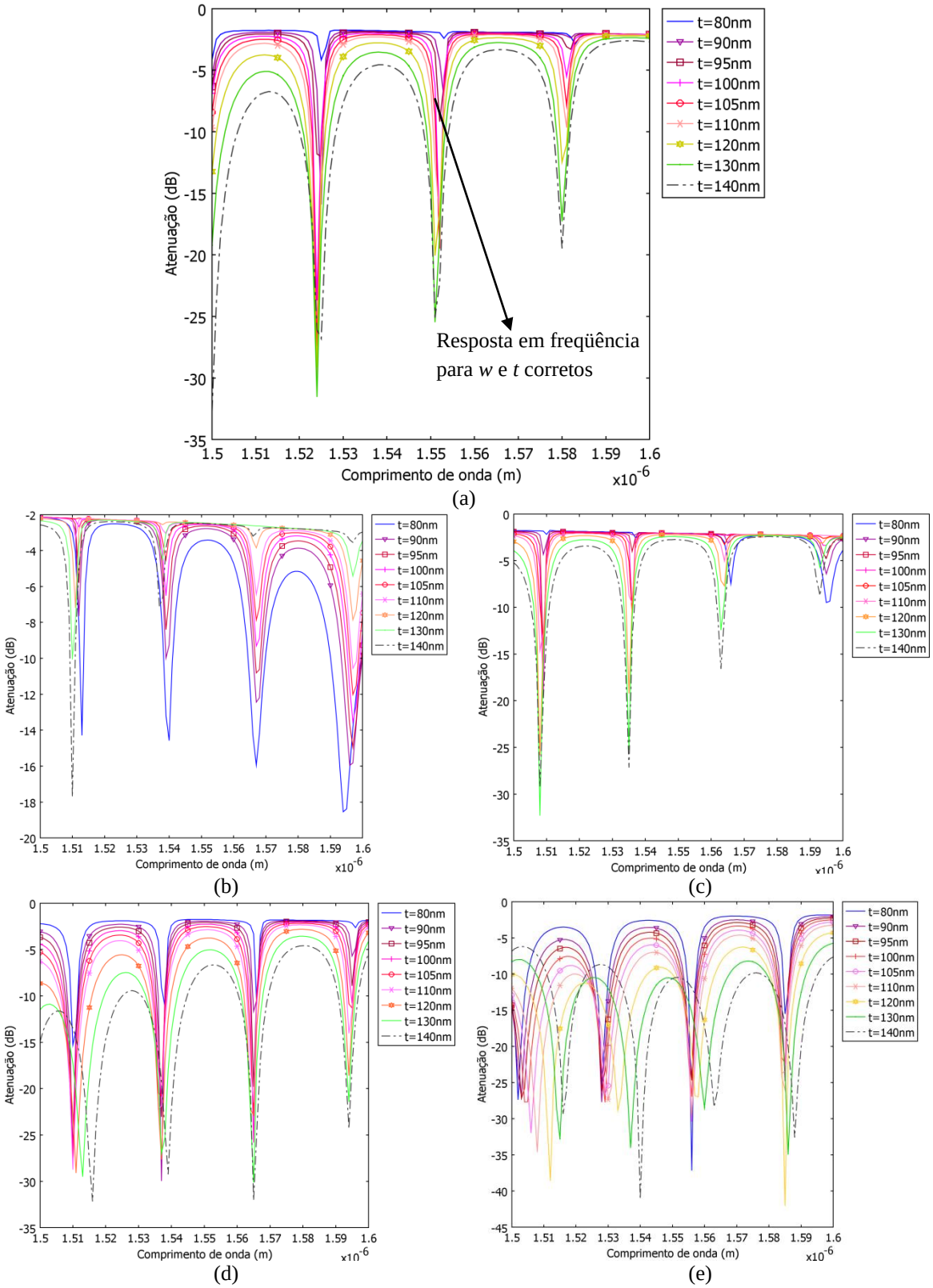



*Figura 3.4.13.* Resposta em freqüência de ressoador para: (a) *w=500nm*, (b) *w=450nm*, (c) *w=480nm*, (d) *w=520nm* e (e) *w=550nm*. A separação entre guias é usada como parâmetro.

# Capítulo 4 - Conclusões

Neste trabalho foi realizado um estudo de guias de ondas SPP para aplicações de longa distância de propagação (LRSPP). As simulações foram realizadas por meio do aplicativo *COMSOL Mutliphysics*, por ser este um dos mais utilizados mundialmente para esse fim.

Foram propostas duas estruturas de elevado interesse científico e tecnológico, ou seja, um acoplador direcional voltado para chaveamento óptico, e um ressoador óptico para aplicações em sensoriamento e também de filtragem óptica em redes WDM. A primeira baseou-se em uma geometria de três núcleos guia de ondas (dois dielétricos e um metálico), o que possibilitou um aumento considerável na distância de propagação dos modos SPP. A estrutura foi projetada de modo a garantir transferência total de energia entre os guias no comprimento de onda projetado, tendo apresentado mínima distância de propagação de $807{,}477\mu m$, já o comprimento de acoplamento da estrutura foi de $29{,}019\mu m$. Os resultados obtidos demonstraram o grande potencial desta estrutura. Por isso, está sendo considerada agora a possibilidade de sua fabricação em colaboração com a POLI/USP e o Instituto de Física de São Carlos, no âmbito do Instituto Nacional de Óptica e Fotônica (INOF). A caracterização óptica da mesma será realizada nos Laboratórios de Óptica deste Depto. de Engenharia Elétrica.

No caso do ressoador, foi adotada uma geometria em anel, mais precisamente um *race-track*. Esta estrutura apresentou como seção transversal uma geometria tipo *rib*, em virtude do melhor confinamento lateral de campo produzido pela mesma. O confinamento lateral foi um aspecto crucial no projeto desta estrutura tendo em vista a presença de seções curvas de raio muito reduzido requerendo, não apenas uma minimização das perdas de propagação modal, mas também das perdas por radiação. Com o objetivo de reduzir as perdas de propagação foram utilizadas as camadas de isolação (ou *buffer*) de baixo índice de refração envolvendo o filme metálico. A redução do confinamento modal causada pelos *buffers* foi compensada em parte pela utilização de materiais dielétricos com índices de refração mais altos para as camadas restantes. Esse aumento foi positivo também para a redução das perdas por radiação, uma vez que o modo tornou-se mais confinado. Um grande problema observado no projeto desta estrutura foi a elevada carga computacional demandada para sua modelagem tri-dimensional (3D). Isso deveu-se não apenas ao comprimento do dispositivo, mas principalmente à diferentes razões de aspectos das camadas dielétricas (várias centenas

de nanômetros) e o filme metálico (dezenas de nanômetros). Assim, optou-se pela sua redução, a partir da estrutura 3D, para uma estrutura bi-dimensional (2D) utilizando o método do índice efetivo. Os resultados obtidos com essa aproximação se mostraram ainda assim muito precisos, com um erro de apenas $2nm$ em torno do comprimento de onda de projeto ($1550\,nm$). O fator de qualidade do ressoador foi $Q \approx 3100$, elevado para uma estrutura SPP.

## 4.1 Trabalhos futuros

Nesta seção são apresentadas sugestões para trabalhos futuros:

- Análise da influência dos modelos materiais para o cálculo da permissividade dos metais utilizados para projeto de componentes ópticos plasmônicos sensíveis.
- Minimização das perdas devido a efeitos de absorção do metal;
- Projeto de dispositivos ópticos mais robustos utilizando LRSPPs.
- Reformulação da equação para cálculo de confinamento de campo.
- Análise da intensidade de campo nas saídas dos acopladores direcionais quando variam seus parâmetros de projeto, utilizando a teoria de modos acoplados.
- Projeto de ressoadores em anel ou tipo *racetrack* para aplicações em biosensores.
- Projeto de ressoadores em anéis concêntricos.

# Referências Bibliográficas


[1] Ebbesen, T. W., Lezec, H. J., Ghaemi, H. F., Thio, T., and Wolf, P. A. “Extraordinary optical transmission through sub-wavelength hole arrays,” *Nature*, v. 391, p. 667-669, 1998.

[2] Treacy, M. M. J. "Dynamical diffraction explanation of the anomalous transmission of light through metallic gratings", *Phy. Rev. B* v. 66, pp. 195105-1-195105-12, 2002.

[3] Pines, D. and Bohm, D. "A Collective Description of Electron Interactions: II. Collective vs Individual Particle Aspects of the Interactions," *Phys. Rev.* v. 85, pp. 338-353, 1952.

[4] Pines, D. “Collective Energy Losses in Solids," *Rev. Mod. Phys.* v. 28, pp. 184-198, 1956.

[5] Wood, R. W. "On a remarkable case of uneven distribution of light in a diffraction grating spectrum," *Phy. Soc. of London*, v. 18, Issue 1, pp. 269-275, 1902.

[6] Maxwell Garnett, J. C. "Colours in metal glasses and in metallic films," *Philos. Trans. R. Soc. London*, v. 203, 385-420, 1904.

[7] Mie, G. "Beiträge zur Optik trüber Medien, speziell kolloidaler Metallösungen," *Ann. Phys.* v. 330, Issue 3, pp.377-445, 1908.

[8] Fano, U. "Atomic Theory of electromagnetic interactions in dense materials," *Phys. Rev.* v. 103, pp. 1202-1218, 1956.

[9] Ritchie, R.H., "Plasma losses by fast electrons in thin films," *Phys. Rev.* v. 106, 874-881, 1957.

[10] Otto, A. "Excitation of nonradiative surface plasma waves in silver by the method of frustrated total reflection," *Z. Phys.* v. 216, pp. 398-410, 1968.

[11] Kretschmann, E. and Raether, H. "Radiative decay of non-radiative surface plasmons excited by light," *Z. Naturf.* v.23A, pp. 2135-2136, (1968).

[12] Kreibig, U. and Zacharias, P. "Surface plasma resonances in small spherical silver and gold particles," *Z. Physik.* v. 231, pp. 128-143, 1970.

[13] Cunningham, S. L., Maradudin, A. A. and Wallis, R. F. "Effect of a charge layer on the surface-plasmon-polariton dispersion curve," *Phys. Rev. B* v. 10, pp. 3342-3355, 1974.

[14] Fleischmann, M., Hendra, P. J. and McQuillan, A. J. "Raman spectra of pyridine adsorbed at a silver electrode," *Chem. Phys. Lett.* v.26, pp. 163-166, 1974.

[15] Frederix, F., Bonroy, K., Laureyn, W., Reekmans, G., Campitelli, A., Dehaen, W. and Maes, G. "Enchanced performance of an affinity biosensor interface based onmixed self-assembled monolayers of thiols on gold," *Langmuir* v. 19, 4351-4357, 2003.

[16] Chinowsky, T. M., Quinn, J. G., Bartholomew, D. U., Kaiser R. and Elkind J.L. "Performance of the Spreeta 2000 integrated surface plasmon resonance affinity sensor," *Sensors Actuat*. B v. 91, pp. 266-274, 2003.

[17] Srituravanich, W., Fang, N., Sun, C., Luo, Q. and Zhang, X. "Sub-100 nm lithography using ultrashort wavelength of surface plasmons," *J. Vac. Sci. Technol. B* v. 22, issue 6, p. 3475-3478, 2004.

[18] Liu, Z., Wei, Q.-H., Zhang, X. "Surface plasmon interference nanolithography," *Nano Lett.* v. 5, pp. 957-961, 2005.

[19] Szabo, A., Stolz, L. and Granzow R. "Surface plasmon resonance and its use in biomolecular interaction analysis (BIA)," *Current Opinion in Structural Biology*, v. 5, num. 5, pp. 699-705, 1995.

[20] Hendrix, M., Priestley, E. S., Joyce, G. F. and Wong, C. H. "Direct Observation of Aminoglycoside−RNA Interactions by Surface Plasmon Resonance," *J. Am. Chem. Soc.* v. 119, pp. 3641-3648, 1997.

[21] Myszka, D. G. and Rich R. L., “Implementing surface plasmon resonance biosensors in drug discovery," *Pharmaceutical science & technology today*, v. 3, num. 9, pp. 310-317, 2000.

[22] El-Sayed, I. H., Huang, X. and El-Sayed, M. A. "Selective laser photo-thermal therapy of epithelial carcinoma using anti-EGFR antibody conjugated gold nanoparticles," *Cancer Lett.* v. 239, pp. 129-135, 2006.

[23] Naimushin, A. N., Soelberg, S. D., Nguyen, D. K., Dunlapa, L., Bartholomewb, D., Elkindb, J., Melendezb, J. and Furlong, C. E. " Detection of Staphylococcus aureus enterotoxin B at femtomolar levels with a miniature integrated two-channel surface plasmon resonance (SPR) sensor," *Biosensors and Bioelectronics*, v. 17, pp. 573-584, 2002.

[24] Thirstrup, C., Zong, W., Borre, M., Neff, H., Pedersen, H. C. and Holzhueter, G. "Diffractive optical coupling element for surface plasmon resonance sensors," *Sensors & Actuators: B, Chemical*, v. 100, pp. 298-308, 2004.

[25] Alferness, R. C. "Waveguide electro-optic modulators," *IEEE Trans. Microwave Theory Tech.*, v. MTT-30, pp. 1121-1137, 1982.

[26] Bozhevolnyi, S. I. "Effective-index modeling of channel plasmon polaritons," *Opt. Express,* v. 14, 9467-9476, 2006.

[27] Berini, P. "Air gaps in metal stripe waveguides supporting long-range surface plasmon polaritons," *J. Appl. Phys.*, v. 102, pp. 033112-033112-8, 2007.

[28] Dragoman, M. and Dragoman, D. "Plasmonics: Applications to nanoscale terahertz and optical devices," *Prog. Quantum. Electron.*, v. 32, pp. 1-41, 2008.

[29] Gramotnev, D. K., Vernon, K. C. and Pile, D. F. P. "Directional coupler using gap plasmon waveguides," *Appl Phys B: Lasers and Optics*, v. 93, pp. 99-106, 2008.

[30] Boltasseva, A., Nikolajsen, T., Leosson, K., Kjaer, K., Larsen, M. S. and Bozhevolnyi, S. I. "Integrated optical components utilizing long-range surface plasmon polaritons," *J. Lightwave Technol.*, v. 23, pp. 413-422, 2005.

[31] Boltasseva, A. and Bozhevolnyi, S. I. "Directional couplers using long-range surface plasmon polariton waveguides," *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics*, v. 12, pp. 1233-1241, 2006.

[32] Xiao, S., Liu, L. and Qiu, M. "Resonator channel drop filters in a plasmon-polaritons metal," *Opt. Express*, v. 14, pp. 2932-2937, 2006.

[33] Bozhevolnyi, S. I., Volkov, V. S., Devaux, E., Laluet, J.-Y. and T. W. Ebbesen, "Channel plasmon subwavelength waveguide components including interferometers and ring resonators," *Nature* v. 440, pp. 508-511, 2006.

[34] Hosseini, A. and Massoud, Y. "Nanoscale surface plasmon based resonator using rectangular geometry," *Appl. Phys. Lett.*, v. 90, pp. 181102-181102-3, 2007.

[35] Barnes, W. L., Dereux, A. and Ebbesen, T. W. "Surface Plasmon Subwavelength optics", *Nature* v. 424, pp. 824-830, 2003.

[36] Berini, P., Charbonneau, R., Lahoud, N. and Mattiussi, G. "Characterization of long-range surface-plasmon-polariton waveguides," *J. Appl. Phys.*, v. 98, pp. 043109-043109-12, 2005.

[37] Berini, P. "Plasmon polariton waves guided by thin lossy metal films of finite width: bound modes of symmetric structures," *Phys. Rev. B*, v. 61, pp. 10484-10503, 2000.

[38] Charbonneau, R., Berini, P., Berolo, E. and Lisicka-Shrzek, E. "Experimental observation of plasmon polariton waves supported by a thin metal film of finite width," *Opt. Lett.*, v. 25, pp. 844-846, 2000.

[39] Berini, P. "Figures of merit for surface plasmon waveguides," *Opt. Express*, v. 14, pp. 13030–13042, 2006.

[40] Kou, F. Y. and Tamir, T. "Range extension of surface plasmons by dielectric layers," *Opt. Lett.* v. 12, pp. 367-369, 1987.

[41] Guo, J. and Adato, R. "Control of 2D plasmon-polariton mode with dielectric nanolayers," *Opt. Express*, v. 16, pp. 1232-1237, 2008.

[42] Ozbay, E. "Plasmonics: Merging photonics and electronics at nanoscale dimensions," *Science*, v. 311, pp. 189-193, 2006.

[43] Zia, R., Schuller, A., Chandran, A. and Brongersma, M. L. " Plasmonics: the next chip-scale technology," *Mater. Today*, v. 9, pp. 20-27, 2006.

[44] Tonks, L. and Langmuir, I. "Oscillations in Ionized Gases," *Phys. Rev.*, v. 33, pp. 195-210, 1929.

[45] Stern, E. A. and Ferrell, R. A. "Surface Plasma Oscillations of a Degenerate Electron Gas," *Phys. Rev.*, v. 120, pp. 130-136, 1960.

[46] Powell, C. J. and Swan, J. B. "Origin of the Characteristic Electron Energy Losses in Aluminum," *Phys. Rev.*, v. 115, pp. 869-875, 1959.

[47] Powell, C. J. and Swan, J. B. "Origin of the Characteristic Electron Energy Losses in Magnesium," *Phys. Rev.*, v. 116, pp. 81-83, 1959.

[48] Bohren, F. and Huffman, D. R. "Absorption and Scattering of Light by Small Particles," *Wiley, New York*, 541p, 1983.

[49] Shao, D. B. and Chen, S. C. "Surface-plasmon-assisted nanoscale photolithography by polarized light," *Appl. Phys. Lett.*, v. 86, pp. 253107-253107-3, 2005.

[50] Maksimova, I. L., Akchurin, G. G., Khlebtsov, B. N., Terentyuk, G. S., Akchurin Jr. G. G., Ermolaev, I. A., Skaptsov, A. A., Soboleva, E. P., Khlebtsov, N. G. and Tuchin, V. V. "Near-infrared laser photothermal therapy of cancer by using gold nanoparticles: computer simulations and experiment," *Med. Laser Appl.*, v. 22, pp. 199-206, 2007.

[51] Wagner, F. E., Haslbeck, S., Stievano, L., Calogero, S., Pankhurst Q. A. and Martinek, K.-P. "Before striking gold in gold-ruby glass," *Nature*, v. 407, pp. 691-692, 2000.

[52] Antosiewicz, T. J. and Szoplik, T. "Corrugated metal-coated tapered tip for scanning near-field optical microscope," *Opt. Express*, v. 15, pp. 10920–10928, 2007.

[53] Antosiewicz, T. J. and Szoplik, T. "Corrugated SNOM probe with enhanced energy throughput," *Opto-Electron. Rev.*, v. 16, pp. 451-457, 2008.

[54] Baida, F. I. and Belkhir, A. "Superfocusing and light confinement by surface plasmon excitation through radially polarized beam," *Plasmonics*, v. 4, pp. 51-59, 2009.

[55] Kano, H. and Kawata, S. "Surface-plasmon sensor for absorption-sensitivity enhancement," *Appl. Opt.*, v. 33, pp. 5166–5170, 1994.

[56] Abramowitz, M. and Stegun, I. A., "Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables," Chapter 8, New York, eds., 1965.

[57] Johnstone, W., Stewart, G., Hart, T. and Culshaw, B. "Surface Plasmon Polaritons in Thin Metal Films and Their Role in Fiber Optic Polarizing Devices," *J. Lightwave Technol.*, v. 8, pp. 538-544, 1990.

[58] Wendler, L. and Haupt, R. "Long-range surface plasmon-polaritons in asymmetric layer structures," *J. Appl. Phys.*, v. 59, pp**.** 3289-3291, 1986.

[59] Economou, E. N. “Surface Plasmons in Thin Films," *Phys. Rev.*, v. 182, pp. 539-554, 1969.

[60] Burke, J. J., Stegeman, G. I. and Tamir, T. “Surface-polariton-like waves guided by thin, lossy metal films," *Phys. Rev. B*, v. 33, pp. 5186-5201, 1986.

[61] Burton, F. A. and Cassidy, S. A. “A complete description of the dispersion relation for thin metal film plasmon-polaritons," *J. Lightwave Technol.*, v. 8, pp. 1843-1849, 1990.

[62] Prade, B., Vinet, J. Y. and Mysyrowicz, A. “Guided optical waves in planar heterostructures with negative dielectric constant," *Phys. Rev. B*, v. 44, pp. 13556-13572, 1991.

[63] Tournois, P. and Laude, V. “Negative group velocities in metal-film optical waveguides," *Opt. Commun.*, v. 137, pp. 41-45, 1997.

[64] Weiner, J. and Nunes, F. D. "High-frequency response of subwavelength-structured metals in the petahertz domain," *Opt. Express*, v. 16 pp. 21256-21270, 2008.

[65] Nikolajsen, T., Leosson, K. and Bozhevolnyi, S. I. "Surface plasmon polariton based modulators and switches operating at telecom wavelengths," *Appl. Phys. Lett.*, v. 85, pp. 5833-5836, 2004.

[66] Charbonneau, R., Lahoud, N., Mattiussi, G. and Berini, P. “Demonstration of integrated optics elements based on long-ranging surface plasmon polaritons,” *Opt. Express*, v. 13, pp. 977-984, 2005.

[67] Jetté-Charbonneau, S., Charbonneau, R., Lahoud, N., Mattiussi, G. and Berini, P. "Demonstration of Bragg gratings based on long-ranging surface plasmon polariton waveguides," *Opt. Express*, v. 13, pp. 4674-4682, 2005.

[68] Yan, Y., Toulouse, J., Velchev, I. and Rotkin, S. V. "Decoupling and asymmetric coupling in triple-core photonic crystal fibers," *J. Opt. Soc. Am. B*, v. 25, 1488-1495, 2008.

# Apêndice

## A - Representação da permissividade de metais.

Nesta seção, é apresentada uma breve discussão sobre os modelos materiais utilizados para representar o comportamento de certos metais em simulações eletromagnéticas (mais especificamente, na geração de plásmons de superfície).

Em geral, são escolhidos metais nobres como ouro (Au), prata (Ag) e cobre (Cu) para SPP, porque estes são materiais que apresentam ressonância (*surface plasmon resonance*-SPR) na faixa de freqüências ópticas. Para que as simulações representem resultados mais realísticos, torna-se necessário se certificar que os modelos materiais adotados para cada tipo de metal representem adequadamente seu comportamento físico. Neste trabalho serão adotados três modelos distintos, cujas características serão abordadas brevemente a seguir, sendo eles: modelo de Drude modificado para caso de elétrons livres [A1], modelo do oscilador harmônico (HOM) [63], e ajuste polinomial de dados experimentais pelo método dos mínimos quadrados. Vale salientar que neste trabalho serão utilizados, para o caso específico do ouro (Au), os modelos de Drude para comprimentos de onda acima de 750*nm*, e o de ajuste polinomial para a faixa de comprimentos de onda entre 380*nm* a 750*nm*. Para o caso da prata (Ag), será utilizado o modelo HOM, que cobre satisfatoriamente toda a faixa de comprimento de onda de interesse.

### A.1 - Representação via modelo de Drude

Para obter o modelo de elétrons livres, iniciaremos com a dedução do modelo de condutividade de Drude. O modelo de Drude foi formulado para descrever a movimentação dos elétrons livres e, conseqüentemente, a corrente elétrica gerada quando um campo eletromagnético ($E_0 e^{-j\omega t}$) incide sobre um metal. Para os materiais condutores, a densidade de elétrons liberados pelos átomos é da ordem de $10^{22}\ cm^{-3}$. Neste modelo, o material condutor sempre é considerado neutro, pois a carga negativa dos elétrons livres é neutralizada pela carga positiva dos íons, e estas últimas são consideras imóveis. De forma similar ao que ocorre com as moléculas de um gás, os elétrons responsáveis pela corrente do material sofrem colisões. Essas são consideradas como perda de energia no modelo. Pode-se imaginar, de forma bem simples, que os

elétrons ganham e perdem energia entre um intervalo de colisão e durante a colisão, respectivamente. Não havendo campo eletromagnético aplicado, esses elétrons executam movimentos aleatórios com velocidade média igual a zero. Entretanto, quando um campo eletromagnético é aplicado, os elétrons livres se deslocam sob efeito da força de Lorentz, obedecendo às leis de Newton. Neste caso, a velocidade média é não nula.

Na equação de movimento dos elétrons deve-se incluir uma força dissipativa responsável pela perda de energia. Esta força é proporcional à velocidade média dos elétrons. A equação que descreve o movimento de elétrons livres em um metal sob ação de um campo eletromagnético de freqüência $\omega$ é mostrada abaixo:

$$m\left(\frac{\partial^2 x}{\partial t^2}+\frac{1}{\tau}\frac{\partial x}{\partial t}\right)=-qE_0e^{-j\omega t} \tag{A-1}$$

onde $q$ e $m$ são a carga e a massa do elétron, respectivamente, e $\tau$ é o tempo de relaxação. A solução para essa equação é da forma:

$$x(t,\omega)=x_0(\omega)e^{-j\omega t} \tag{A-2}$$

onde,

$$x_0(\omega)=\frac{-q/m}{\omega^2+j\omega/\tau}(-E_0) \tag{A-3}$$

Substituindo (2) em (3), resulta:

$$x(t,\omega)=\frac{q/m}{\omega^2+j\omega/\tau}E_0e^{-j\omega t} \tag{A-4}$$

Sendo:

$$v(t,\omega)=\frac{\partial x(t,\omega)}{\partial t} \tag{A-5}$$

$$v_0(\omega)=-\frac{q/m}{-j\omega+1/\tau}E_0 \tag{A-6}$$

$$v(t,\omega)=-\frac{q/m}{-j\omega+1/\tau}E_0e^{-j\omega t}=v_0(\omega)e^{-j\omega t} \tag{A-7}$$

De forma similar, pode-se obter a densidade de corrente $J=J_0(\omega)e^{-j\omega t}$, sendo que $J_0(\omega)=-nqv_0(\omega)$ ou $J_0(\omega)=\sigma(\omega)E_0$. Assim, para $J_0(\omega)$, tem-se:

$$-nqv_0(\omega)=\sigma(\omega)E_0 \tag{A-8}$$

$$-nq\left(-\frac{q/m}{-j\omega+1/\tau}E_0\right)=\sigma(\omega)E_0 \tag{A-9}$$

$$\frac{nq^2}{m}\left(\frac{1}{-j\omega+1/\tau}\right)=\sigma(\omega) \tag{A-10}$$

sendo $n$ o número de elétrons livres por unidade de volume. Rearranjando (A-10), chega-se:

$$\sigma(\omega) = \frac{nq^2\tau}{m}\left(\frac{1}{1-j\omega\tau}\right) \tag{A-11}$$

Quando $\omega \to 0$, obtêm-se a condutividade de Drude para baixas freqüências, ou seja

$$\sigma(0) = \frac{nq^2\tau}{m} \tag{A-12}$$

Relacionando a densidade de fluxo elétrico com a polarização do material, tem-se:

$$D = \varepsilon_0 E + p = \varepsilon E \tag{A-13}$$

$$\frac{\partial \varepsilon E}{\partial t} = \frac{\partial \varepsilon_0 E}{\partial t} + \frac{\partial P}{\partial t} \tag{A-14}$$

sendo $\varepsilon$ a permissividade elétrica do material, $p$ o momento do dipolo elétrico por unidade de área dentro do material, e $D$ a densidade de fluxo elétrico. Tanto $D$ quanto $p$ têm a mesma unidade, Coulomb por metro$^2$ (C/m$^2$), de forma que a derivada de $p$ no tempo nos fornece a densidade de corrente $J$. Logo,

$$\frac{\partial \varepsilon E_0 e^{-j\omega t}}{\partial t} = \frac{\partial \varepsilon_0 E_0 e^{-j\omega t}}{\partial t} + J_0(\omega)e^{-j\omega t} \tag{A-15}$$

Fazendo: $\frac{\partial}{\partial t} = -j\omega$

$$-j\omega\varepsilon E_0 e^{-j\omega t} = -j\omega\varepsilon_0 E_0 e^{-j\omega t} + \sigma(\omega)E_0 e^{-j\omega t} \tag{A-16}$$

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_0 - \frac{\sigma(\omega)}{j\omega} \tag{A-17}$$

$$\varepsilon_r(\omega) = \varepsilon_0 - \frac{\sigma(\omega)}{j\omega} \Leftrightarrow 1 - \frac{\sigma(\omega)}{j\omega\,\varepsilon_0} \Leftrightarrow 1 - \frac{nq^2}{m\varepsilon_0}\left(\frac{1}{j\omega}\right)\left(\frac{1}{-j\omega + 1/\tau}\right) \tag{A-18}$$

$$\varepsilon_r(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + j\Gamma)} \tag{A-19}$$

onde:

$\omega_p^2 = \frac{nq^2}{m\varepsilon_0}$ (freqüência de plasma);

$\Gamma = \frac{1}{\tau}$ (perda do material ou freqüência de colisão)

Fazendo $\varepsilon_r(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + j\varepsilon_2(\omega)$, obteremos:

$$\varepsilon_1(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2\tau^2}{1+\omega^2\tau^2} \text{ e} \tag{A-20}$$

$$\varepsilon_2(\omega) = \frac{\omega_p^2\tau^2}{\omega(1+\omega^2\tau^2)} \tag{A-21}$$

A faixa de freqüência de operação será limitada a $\omega < \omega_p$, de forma que o metal ainda retém suas características metálicas. Para caso de $\omega\tau \gg 1$, a parte imaginária $\varepsilon_2 \to 0$, e a permissividade relativa $\varepsilon_r$ se tornará predominantemente real, ou seja,

$$\varepsilon_r(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \tag{A-22}$$

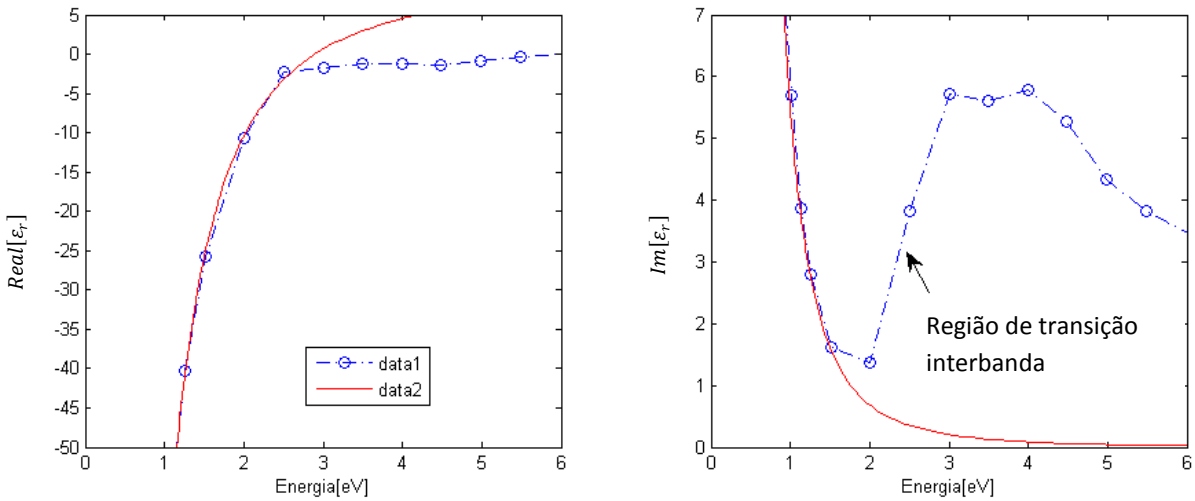
Na região onde a freqüência for muito baixa, $\omega \ll \tau^{-1}$, tem-se que $\varepsilon_2 \gg \varepsilon_1$, e o metal

comporta-se basicamente como um absorvedor.

Até este ponto, foi considerado apenas o modelo material de Drude (elétrons livres) para um metal ideal ($\varepsilon \rightarrow 1$, quando $\omega \gg \omega_p$). A seguir, será feita uma breve comparação desse modelo com um exemplo de metal real. Para metais nobres como ouro, prata e cobre, é necessário adicionar uma extensão para esse modelo na região de $\omega > \omega_p$ (onde as respostas são dominadas pelos elétrons livres) devido à preenchimento da camada d para superfície de Fermi, causa um meio altamente polarizado. Essa polarização residual pode ser descrita adicionando o termo $P_\infty = \varepsilon_0(\varepsilon_\infty - 1)E$ em (A-13), onde $P$ agora representa unicamente a polarização devido aos elétrons livres. Esse efeito é, entretanto, descrito pela constante dielétrica $\varepsilon_\infty$ (permissividade em freqüência infinita, geralmente $1 \leq \varepsilon_\infty \leq 10$). Sendo assim, tem-se:

$$\varepsilon_r(\omega) = \varepsilon_\infty - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + j\Gamma)} \tag{A-23}$$

O comportamento desta equação é ilustrado na Fig. A.1 (a)-(b) para as componentes real ($\varepsilon_1$) e imaginária ($\varepsilon_2$) do ouro, respectivamente. Posteriormente, foram comparados os resultados do modelo simulado com os resultados experimentais obtidos em [A3]. Pode-se observar claramente que na faixa de comprimentos de onda do espectro visível não há aplicabilidade do modelo de elétrons livres, ou seja, os resultados são bastante imprecisos. Isso se deve à ocorrência de transições interbanda, o que faz como este modelo apresente bons resultados para energias bem abaixo de $2eV$, correspondes a comprimentos de onda superiores a $620nm$.




(a) (b)

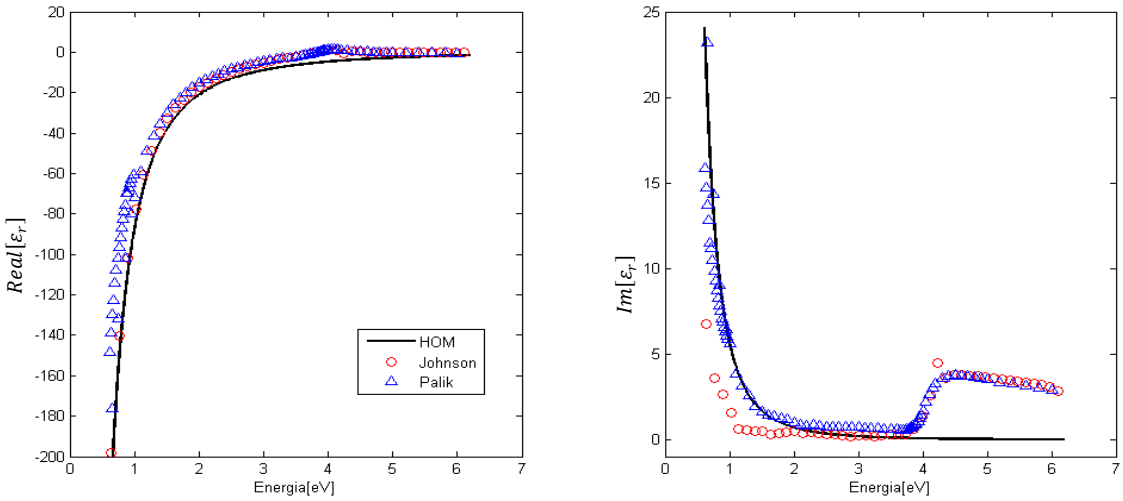
*Figura A.1.* A função dielétrica $\varepsilon_r(\omega)$ via equação (A-23), (linha sólida) e dados experimentais (círculos) para o Au versus energia ($eV$). A validade do modelo de elétrons livres é limitada pela região de transições de interbanda na faixa de freqüência ópticas ou superiores.

## A.2 - Representação via HOM - modelo de oscilador harmônico

Este modelo foi sugerido em [64], e mostrado na Eq. (A-24). Ele é obtido baseando-se na equação de posição dos elétrons e tem como grande atrativo a sua simplicidade, além de apresentar ótimos resultados para um grande faixa de freqüências (como pode ser observado na Fig. A.2 para o caso específico da prata, os resultados obtidos com este modelo apresentam boa concordância com os dados experimentais de Palik [A2] na faixa de energias de 0 a 4 $eV$). A discrepância observada a partir de 4 $eV$ deve-se às transições interbanda no metal.

$$\varepsilon_r = \left(1 - \frac{\omega_p^2}{\varepsilon_0 \omega^2}\right) + j\frac{\Gamma \omega_p^2}{\varepsilon_0 \omega^2} \tag{A-24}$$

No caso do Au, as transições interbanda ocorrem na faixa de energias de 0 a 3 $eV$. Sendo assim, optamos pelo modelo de ajuste polinomial dos dados experimentais.




*(a)* *(b)*

*Figura A.2.* Permissividade relativa para a Ag obtida pelo modelo de oscilador harmônico (linha sólida), com $\omega_p = 1.419 \times 10^{16}\, rad/s$ e $\Gamma = 1.0 \times 10^{14}\, rad/s$. (a) parte real, e (b) parte imaginária. Para comparação são incluídos os dados experimentais de Palik [A2] (triângulos) e Johnson [A3] (círculos).

## A.3 - Ajuste polinomial de dados experimentais

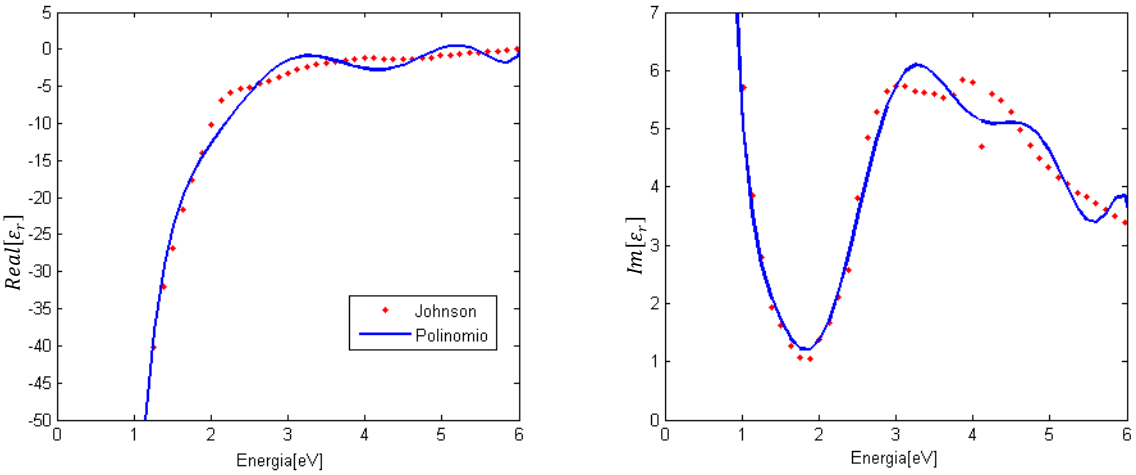
Nesta seção são apresentadas equações polinomiais obtidas diretamente dos dados experimentais de Johnson & Christie [A3] via método dos mínimos quadrados. Estes polinômios são válidos para a faixa de comprimentos de onda de 200nm a 1550nm. Para a

parte real, o polinômio utilizado é de ordem 7, enquanto que para a parte imaginária a ordem é 9, ou seja,

$$Real[\varepsilon_r(f)] = 0.19002794f^7 - 4.8958443f^6 + 52.225984f^5 - 298.28206f^4 + 984.25706f^3 - 1882.3622f^2 + 1955.2726f - 877.50631 \quad \text{(A-25)}$$

$$Imag[\varepsilon_r(f)] = -0.019462382f^9 + 0.61304527f^8 - 8.2793474f^7 + 62.665930f^6 - 291.72211f^5 + 863.03623f^4 - 1620.1541f^3 + 1.8667462f^2 - 1208.2038f + 340.71292 \quad \text{(A-26)}$$

onde $f$ é a energia do fóton em $eV$. As equações (A-25) e (A-26) são representadas graficamente na Fig. A.3 (a)-(b).




(a) (b)

*Figura A.3.* Permissividade do Au em função da energia ($eV$). Ajuste polinomial (linha sólida), e dados experimentais (símbolos), (a) parte real e (b) imaginária.

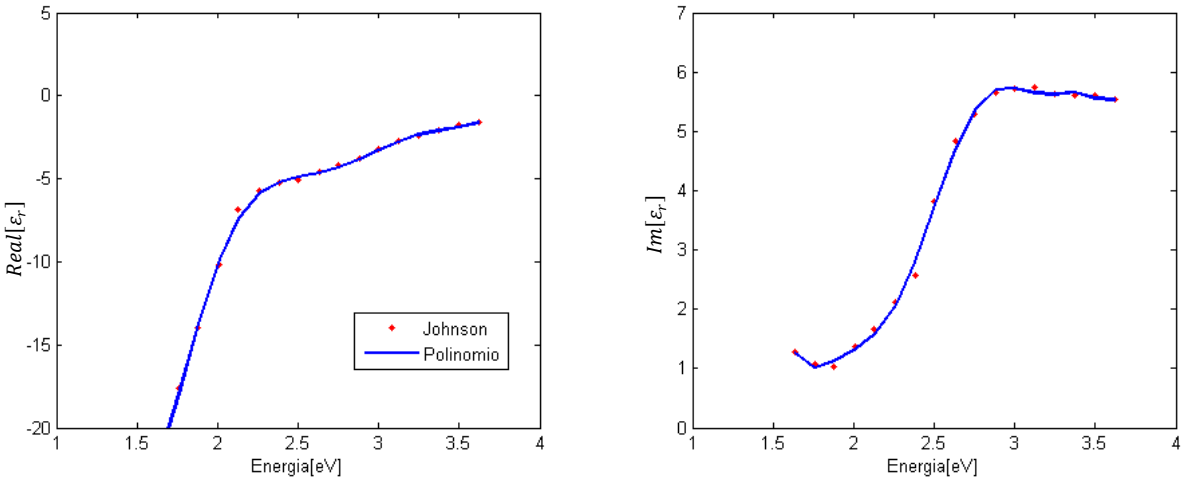
Uma das alternativas utilizadas para minimizar os erros produzidos pelo ajuste polinomial foi a geração de um novo polinômio em uma faixa de freqüências mais estreita. Dessa forma, optou-se apenas pela faixa de freqüências ópticas (entre 1.6 $eV$ e 3.5 $eV$) para a análise dos resultados. As partes real e imaginaria dos novos polinômios são dadas abaixo,

$$Real[\varepsilon_r(f)] = -5.8922449f^7 + 122.06698f^6 - 1065.7621f^5 + 5077.2716f^4 - 14230.672f^3 + 23415.184f^2 - 20875.612f + 7735.7694 \quad \text{(A-27)}$$

$$Imag[\varepsilon_r(f)] = 12.076822f^9 - 274.26460f^8 + 2729.5166f^7 - 15613.333f^6 +$$

$$56534.130f^5 - 134295.06f^4 + 209166.14f^3 - 205847.21f^2 + 116067.02f - 28540.488 \quad \text{(A-28)}$$

A representação gráfica destas equações pode ser vista na Fig. A.4. Pode-se observar que os erros foram reduzidos de forma significativa.




(a) (b)

*Figura A.4.* Permissividade do Au em função da energia ($eV$). Ajuste polinomial (linha sólida), e dados experimentais (símbolos), (a) parte real e (b) imaginária. A faixa de energia foi reduzida apenas para melhorar a precisão do polinômio.

Os modelos materiais descritos anteriormente serão aplicados nas simulações realizadas nos Capítulos 3. Modelos materiais como o de Lorentz [A1] e Drude-Lorentz [A1] (brevemente discutidos a seguir) são igualmente importantes, mas não serão utilizados neste trabalho. A razão para isso se deve à simplicidade e precisão dos modelos de Drude e HOM, além do ajuste polinomial dos dados experimentais, que garantem nível de precisão mais que satisfatório para o que se pretende neste trabalho.

### A.4 - Representação via modelo de Lorentz [A1]

O modelo de Lorentz é utilizado para modelar os meios dispersivos com múltiplas freqüências de ressonância (dispersão multipolar), tais como água. Este modelo semi-quântico é baseado na aproximação de amortecimento de oscilador harmônico, descrevendo as transições de interbandas dos elétrons considerando que os elétrons no material estão confinados no núcleo atômico iônico, e oscilam em torno dele. Este modelo utiliza $k$ osciladores nos principais pontos críticos na densidade conjunta dos estados. Estes estados correspondem às energias de transição das interbandas $\hbar\omega$, com alguns osciladores adicionais para modelar absorção entre junções críticas.

$$\varepsilon^{(c)}(\omega) = \sum_{k=1}^{K} \frac{f_k \omega_p^2}{(\omega_k^2 - \omega^2) + i\omega\Gamma_k} \quad \text{(A-29)}$$

onde $\omega_p$ é a freqüência de plasma, $k$ é o número de osciladores apresentando freqüência $\omega_k$, força $f_k$ e constante de amortecimento $\Gamma_k$ (tempo de relaxação $1/\Gamma_k$). O sobrescrito $(c)$ da equação denota que esta função dielétrica é produzida pelos "elétrons confinados".

### A.5 - Representação via modelo de Drude-Lorentz

Os modelos de Drude e de Lorentz podem ser combinados em uma única equação levando-se em consideração tanto as contribuições intrabandas quanto interbandas [A1]. O modelo híbrido de Drude-Lorentz fornece uma função dielétrica tendo correlação excelente com as funções dielétricas medidas experimentalmente para diversos metais, como por exemplo, prata (Ag). Este modelo apresenta alta precisão em uma faixa larga de freqüências, como ilustrado na Fig. A.5. O modelo D-L pode ser escrito como,

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon^{(l)}(\omega) + \varepsilon^{(c)}(\omega) \quad \text{(A-30)}$$

ou seja,

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_\infty + \sum_{k=0}^{K} \frac{f_k \omega_p^2}{(\omega_k^2 - \omega^2) + i\omega\Gamma_k} \quad \text{(A-31)}$$

Em (A-31), $\varepsilon_\infty$ é a constante dielétrica em freqüência infinita e $\omega_p$ a freqüência de plasma. Os parâmetros $\omega_k$, $f_k$ e $\Gamma_k$ são, respectivamente, freqüência de ressonância, força e freqüência de amortecimento. Para $K = 0$ e $\omega_0 = 0$, o modelo D-L é simplificado para modelo de Drude de elétrons livres. Os valores dos parâmetros para diversos metais estão listados Tabela A.1 [A1].

TABELA A.1. - Parâmetros do modelo de Drude-Lorentz [A1]

| **Parâmetros** | Ag | Au | Cu | Al | Be | Cr | Ni | Pd | Pt | Ti | W |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| $\omega_p$ | 9.01 | 9.03 | 10.83 | 14.98 | 18.51 | 10.75 | 15.92 | 9.72 | 9.59 | 7.29 | 13.22 |
| $f_0$ | 0.845 | 0.760 | 0.575 | 0.523 | 0.084 | 0.168 | 0.096 | 0.330 | 0.333 | 0.148 | 0.206 |
| $\Gamma_0$ | 0.048 | 0.053 | 0.030 | 0.047 | 0.035 | 0.047 | 0.048 | 0.008 | 0.080 | 0.082 | 0.064 |
| $f_1$ | 0.065 | 0.024 | 0.061 | 0.227 | 0.031 | 0.151 | 0.100 | 0.649 | 0.191 | 0.899 | 0.054 |
| $\Gamma_1$ | 3.886 | 0.241 | 0.378 | 0.333 | 1.664 | 3.175 | 4.511 | 2.950 | 0.517 | 2.276 | 0.530 |
| $\omega_1$ | 0.816 | 0.415 | 0.291 | 0.162 | 0.100 | 0.121 | 0.174 | 0.336 | 0.780 | 0.777 | 1.004 |
| $f_2$ | 0.124 | 0.010 | 0.104 | 0.050 | 0.140 | 0.150 | 0.135 | 0.121 | 0.659 | 0.393 | 0.166 |
| $\Gamma_2$ | 0.452 | 0.345 | 1.056 | 0.312 | 3.395 | 1.305 | 1.334 | 0.555 | 1.838 | 2.518 | 1.281 |
| $\omega_2$ | 4.481 | 0.830 | 2.957 | 1.544 | 1.032 | 0.543 | 0.582 | 0.501 | 1.314 | 1.545 | 1.917 |
| $f_3$ | 0.011 | 0.071 | 0.723 | 0.166 | 0.530 | 1.149 | 0.106 | 0.638 | 0.547 | 0.187 | 0.706 |
| $\Gamma_3$ | 0.065 | 0.870 | 3.213 | 1.351 | 4.454 | 2.676 | 2.178 | 4.621 | 3.668 | 1.663 | 3.332 |
| $\omega_3$ | 8.185 | 2.969 | 5.300 | 1.808 | 3.183 | 1.970 | 1.597 | 1.659 | 3.141 | 2.509 | 3.580 |
| $f_4$ | 0.840 | 0.601 | 0.638 | 0.030 | 0.130 | 0.825 | 0.729 | 0.453 | 3.576 | 0.001 | 2.590 |
| $\Gamma_4$ | 0.916 | 2.494 | 4.305 | 3.382 | 1.802 | 1.335 | 6.292 | 3.236 | 8.517 | 1.762 | 5.836 |
| $\omega_4$ | 9.083 | 4.304 | 11.18 | 3.473 | 4.604 | 8.775 | 6.089 | 5.715 | 9.249 | 19.43 | 7.498 |
| $f_5$ | 5.646 | 4.384 | - | - | - | - | - | - | - | - | - |
| $\Gamma_5$ | 2.419 | 2.214 | - | - | - | - | - | - | - | - | - |
| $\omega_5$ | 20.29 | 13.32 | - | - | - | - | - | - | - | - | - |

Obs.: $\omega_p$, $\Gamma_k$ e $\omega_k$ estão em unidade $eV$, e $f_k$ é adimensional.

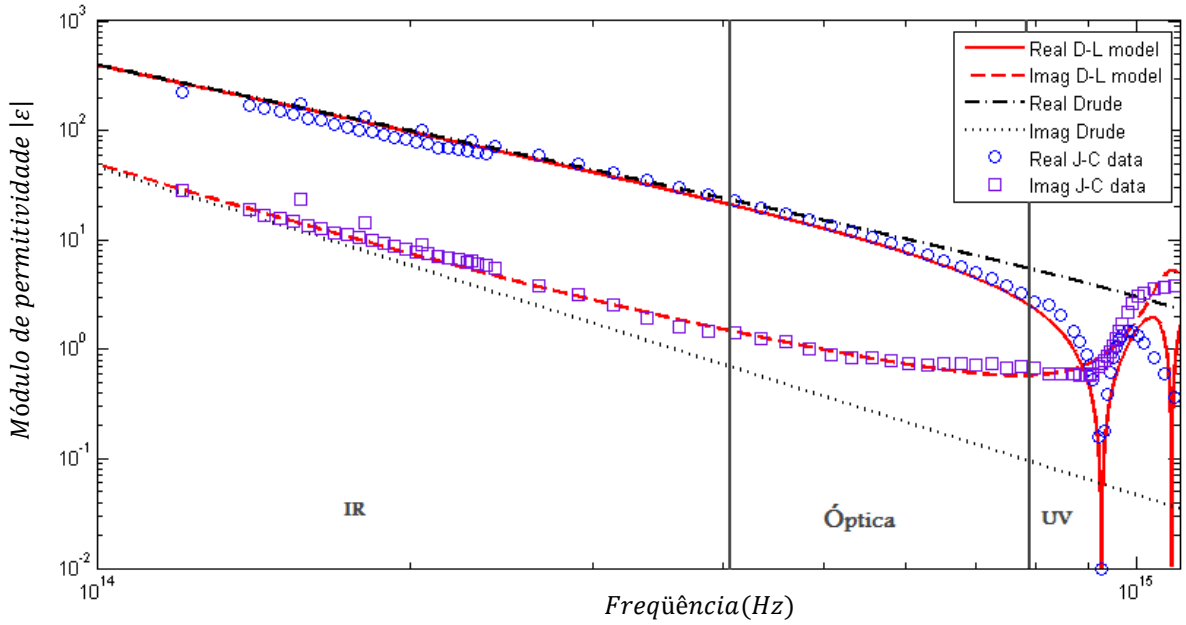



*Figura A.5.* Partes real e imaginária da constante dielétrica da prata (Ag) [A1]. As curvas pretas (pontilhada e pontilhada-tracejada) são geradas pelo modelo de Drude-Lorentz, as curvas vermelhas (sólida e tracejada) são geradas utilizando o modelo de Drude. Círculos e quadrados representam os dados experimentais de Palik para as partes reais e imaginárias, respectivamente [A2].

Como dito anteriormente, o modelo de Drude é um modelo preciso e válido para a constante dielétrica da maioria dos metais na região do infravermelho. Na faixa de freqüências ópticas, no entanto, dependendo da freqüência na qual ocorre a transição de interbanda, ele se torna inválido, como pode ser visto na Fig. A.5. Esta figura mostra uma

comparação entre os modelos de Drude, Drude-Lorentz, e dados experimentais de Palik [A2] para a prata (Ag). A discrepância é significativa entre o modelo de Drude e os valores experimentais nas regiões de freqüências ópticas e de UV (principalmente para a parte imaginária da permissividade). Para freqüências mais elevadas na faixa de UV, o modelo de Drude falha completamente. Por outro lado, o modelo D-L acompanha melhor os dados experimentais, acompanhando as pequenas ressonâncias, e dessa forma fornece um ajuste mais preciso da função dielétrica real da prata sobre toda faixa de freqüência.

## B - Confinamento de campo

O confinamento de campo é o parâmetro utilizado para medir o quanto o campo é confinado em torno da região guia de onda. Existem várias maneiras de se medir o confinamento de campo de nano-estruturas e guias de ondas baseados em filmes metálicos. No entanto, no presente trabalho o cálculo do confinamento de campo foi obtido de acordo com o sugerido por Berini [39], ou seja,

$$M_1 = \frac{Re[n_{eff}] - n_{meio}}{Im[n_{eff}]} \qquad \text{[B-1]}$$

onde $Re[n_{eff}]$ represeta a parte real de índice efetivo da estrutura, $Im[n_{eff}]$ a parte imaginária, e $n_{meio}$ o índice dielétrico do meio.

Outra razão para a escolha da Eq. (B-1) é que esta vem sendo largamente utilizada na literatura. Por outro lado, é importante ressaltar que o parâmetro $M_1$ não pode ser utilizado como indicativo de confinamento de campo principalmente quando comparado com outras estruturas guias de ondas. A razão para isso está no fato de que $M_1$ é inversamente proporcional à parte imaginária de $n_{eff}$. Vale lembrar que quanto mais fina a espessura do filme metálico, menor será a perda de propagação (ou $Im[n_{eff}]$), e maior será o diâmetro modal (e aumento do diâmetro modal implica, necessariamente, em perda de confinamento). Essa diminuição das perdas pode levar a valores exageradamente grandes de $M_1$, fornecendo, portanto, um indicativo inadequado para o grau de confinamento modal.

Como exemplo, considere duas estruturas distintas, sendo a primeira uma fenda quadrada apresentando valor máximo de confinamento igual a $71$ (obtido para $w = 50nm$ e $d_v = 2000nm$). A segunda estrutura é um guia *rib* multicamadas, utilizado aqui em um ressoador em anel descrito na seção 3.4, cujo confinamento de campo é aproximadamente $5200$, obtido para $t_d = 120nm$ e $t_m = 20nm$. Esse maior valor de confinamento foi obtido apenas à custa de uma considerável redução das perdas de propagação, e não reflete um maior confinamento óptico em torno do metal como seria de se esperar. Há, sim, um aumento considerável do diâmetro modal, ou da área efetiva.

Outra maneira que será utilizada em trabalhos futuros para determinação do confinamento de campo consiste em se calcular a área efetiva do modo, $A_{eff}$, ou o diâmetro modal. Assim, quanto maior for a área efetiva, menor será o confinamento de

campo, ou seja, menos campo confinado estará na superfície do metal. O parâmetro $A_{eff}$ é determinado pela relação a seguir,

$$A_{eff} = \frac{(\iint_{-\infty}^{\infty} |F(x,y)|^2 dxdy)^2}{\iint_{-\infty}^{\infty} |F(x,y)|^4 dxdy} \tag{B-2}$$

onde $|F(x,y)|$ é o módulo da distribuição de campo.

Como a Eq. (B-2) calcula diretamente a área efetiva do modo selecionado, é esperado que o valor obtido represente de forma mais adequada o comportamento do confinamento de campo.

## Referências associadas ao Apêndice

[A1] Rakic. D., Djurisic, A. B., Elzar, J. M. and Majewski, M. L. “Optical properties of metallic films for vertical-cavity optoelectronic devices," *Appl. Optics*, v. 37, pp. 5271-5283, 1998.

[A2] E. D. Palik, ed., "Handbook of Optical Constants of Solids I," Academic, Orlando, Fla., 1985.

[A3] Johnson, P. B. and Christy, R. W. “Optical constants of the noble metals." *Phys. Rev. B* v. 6, pp. 4370-4379, 1972.

# Livros Grátis

( http://www.livrosgratis.com.br )

Milhares de Livros para Download:

Baixar livros de Administração
Baixar livros de Agronomia
Baixar livros de Arquitetura
Baixar livros de Artes
Baixar livros de Astronomia
Baixar livros de Biologia Geral
Baixar livros de Ciência da Computação
Baixar livros de Ciência da Informação
Baixar livros de Ciência Política
Baixar livros de Ciências da Saúde
Baixar livros de Comunicação
Baixar livros do Conselho Nacional de Educação - CNE
Baixar livros de Defesa civil
Baixar livros de Direito
Baixar livros de Direitos humanos
Baixar livros de Economia
Baixar livros de Economia Doméstica
Baixar livros de Educação
Baixar livros de Educação - Trânsito
Baixar livros de Educação Física
Baixar livros de Engenharia Aeroespacial
Baixar livros de Farmácia
Baixar livros de Filosofia
Baixar livros de Física
Baixar livros de Geociências
Baixar livros de Geografia
Baixar livros de História
Baixar livros de Línguas

Baixar livros de Literatura
Baixar livros de Literatura de Cordel
Baixar livros de Literatura Infantil
Baixar livros de Matemática
Baixar livros de Medicina
Baixar livros de Medicina Veterinária
Baixar livros de Meio Ambiente
Baixar livros de Meteorologia
Baixar Monografias e TCC
Baixar livros Multidisciplinar
Baixar livros de Música
Baixar livros de Psicologia
Baixar livros de Química
Baixar livros de Saúde Coletiva
Baixar livros de Serviço Social
Baixar livros de Sociologia
Baixar livros de Teologia
Baixar livros de Trabalho
Baixar livros de Turismo