

Dissertação apresentada à Pró-Reitoria de Pós-Graduação do Instituto Tecnológico de Aeronáutica, como parte dos requisitos para obtenção do título de Mestre em Ciências no Programa de Pós-Graduação em Física, Área de Física Atômica e Molecular.

Ana Beatriz Monteiro dos Santos

**PLASMON-FÔNON POLARITONS ANISOTRÓPICOS
EM HETEROESTRUTURAS DE VAN DER WAALS: UM
ESTUDO VIA MÉTODO DA MATRIZ DE
ESPALHAMENTO**

Dissertação aprovada em sua versão final pelos abaixo assinados:



Prof. Dr. André Jorge Carvalho Chaves

Orientador

Campo Montenegro
São José dos Campos, SP - Brasil
2025

Dados Internacionais de Catalogação-na-Publicação (CIP)
Divisão de Informação e Documentação

Monteiro dos Santos, Ana Beatriz

Plasmon-fônon polaritons anisotrópicos em heteroestruturas de van der Waals: um estudo via método da matriz de espalhamento / Ana Beatriz Monteiro dos Santos.

São José dos Campos, 2025.

86f.

Dissertação de Mestrado – Curso de Física. Área de Física Atômica e Molecular – Instituto Tecnológico de Aeronáutica, 2025. Orientador: Prof. Dr. André Jorge Carvalho Chaves.

1. Polaritons. 2. Estruturas bidimensionais. 3. Heteroestruturas de van der Waals. 4. Grafeno. 5. Materiais anisotrópicos. 6. Física. I. Instituto Tecnológico de Aeronáutica. II. Título.

REFERÊNCIA BIBLIOGRÁFICA

MONTEIRO DOS SANTOS, Ana Beatriz. **Plasmon-fônon polaritons anisotrópicos em heteroestruturas de van der Waals: um estudo via método da matriz de espalhamento**. 2025. 86f. Dissertação de Mestrado – Instituto Tecnológico de Aeronáutica, São José dos Campos.

CESSÃO DE DIREITOS

NOME DA AUTORA: Ana Beatriz Monteiro dos Santos

TÍTULO DO TRABALHO: Plasmon-fônon polaritons anisotrópicos em heteroestruturas de van der Waals: um estudo via método da matriz de espalhamento.

TIPO DO TRABALHO/ANO: Dissertação / 2025

É concedida ao Instituto Tecnológico de Aeronáutica permissão para reproduzir cópias desta dissertação e para emprestar ou vender cópias somente para propósitos acadêmicos e científicos. A autora reserva outros direitos de publicação e nenhuma parte desta dissertação pode ser reproduzida sem a autorização da autora.

Ana Beatriz Monteiro dos Santos
Rua Avião Muniz, 282
12.227-100 – São José dos Campos–SP

PLASMON-FÔNON POLARITONS ANISOTRÓPICOS EM HETEROESTRUTURAS DE VAN DER WAALS: UM ESTUDO VIA MÉTODO DA MATRIZ DE ESPALHAMENTO

Ana Beatriz Monteiro dos Santos

Composição da Banca Examinadora:

Profa. Dra.	Lara Kühl Teles	Presidente	-	ITA
Prof. Dr.	André Jorge Carvalho Chaves	Orientador	-	ITA
Prof. Dr.	Marco Antonio Ridenti	Membro Interno	-	ITA
Dra.	Ingrid David Barcelos	Membro Externo	-	CNPEM

Dedico esta dissertação aos meus avós
Agenor (in memoriam) e Maria, meus
maiores incentivadores.

Agradecimentos

Primeiramente, agradeço à minha mãe, Rizonete, e à minha avó, Maria, por todo apoio e incentivo durante esses dois anos longe. Sem vocês eu não teria chegado até aqui.

Ao meu orientador, Prof. Dr. André Jorge Carvalho Chaves, expressei minha gratidão pela paciência, orientação e pelos ensinamentos ao longo dessa jornada.

Aos meus colegas de pesquisa, sou grata por todo acolhimento e pelas trocas de conhecimento. Faço um agradecimento especial ao Gabriel Bomfim pelo suporte e contribuição essencial para essa pesquisa.

Aos meus colegas de pós-graduação, sou grata pelos momentos de aprendizado compartilhados e pelas risadas durante o intervalo do “cafezinho”.

Agradeço ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) pela concessão da bolsa de mestrado, processo nº 409372/2022-6. À Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP) pelo auxílio ao projeto de pesquisa, processo nº 2022/080886-0. À Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior – Brasil (CAPES), por meio do Programa de Apoio à Pós-Graduação.

Por fim, ao meu amor, Bruno Augusto, agradeço por estar ao meu lado em todas as madrugadas de estudo. Obrigada por todo apoio, incentivo, amor e cuidado nos dias difíceis.

A todos, o meu mais sincero obrigado!

*“Hold your breath, make a wish
Count to three
Come with me and you’ll be
In a world of pure imagination.”*

— GENE WILDER, PURE IMAGINATION.

Resumo

Polaritons são quasipartículas resultantes do forte acoplamento entre um campo eletromagnético e excitações materiais, como plasmons, fônons, éxcitons e mágnons, em materiais bidimensionais (2D). Esses modos polaritônicos, como os plasmon-polaritons no grafeno e os fônnon-polaritons no nitreto de boro hexagonal (hBN), permitem o confinamento da luz em nanoescala, possibilitando avanços na nanofotônica e optoeletrônica. Nesta dissertação, foram investigados modos de polaritons de superfície em diferentes heteroestruturas de Van der Waals compostas por materiais bidimensionais anisotrópicos, como grafeno, fósforo negro e hBN. Utilizamos o formalismo 4×4 dos métodos da matriz de transferência e da matriz de espalhamento para calcular as respostas eletromagnéticas de empilhamentos unidimensionais de materiais anisotrópicos. Os autovalores da matriz de espalhamento revelam a presença de polaritons, que foram calculados para os sistemas propostos, sendo analisada a relação de dispersão dos diferentes polaritons. Para isso, foi usada uma ferramenta computacional desenvolvida pelo grupo de pesquisa do ITA, o Polaripy. Estudamos a dispersão de plasmon-polaritons através da matriz de espalhamento em uma monocamada de grafeno e em um filme fino de fósforo negro, além de fônnon-polaritons numa camada de 30nm de hBN. Também foram analisados os modos híbridos resultantes dos empilhamentos dois a dois das camadas de grafeno, fósforo negro e hBN especificadas. Por fim, com o empilhamento dos três materiais simultaneamente, foi feita a análise dos modos híbridos de plasmon-fônnon polaritons anisotrópicos. Os resultados podem ser de grande interesse para futuras aplicações em sensores, guias de onda e tecnologias de comunicação óptica.

Abstract

Polaritons are quasiparticles resulting from the strong coupling between an electromagnetic field and material excitations, such as plasmons, phonons, excitons and magnons, in two-dimensional (2D) materials. These polaritonic modes, such as the plasmon-polaritons in graphene and the phonon-polaritons in hexagonal boron nitride (hBN), allow the confinement of light at nanoscale, enabling advances in nanophotonics and optoelectronics. In this dissertation, we investigated surface polariton modes in different Van der Waals heterostructures composed of two-dimensional anisotropic materials such as graphene, black phosphorus and hBN. We used the 4×4 formalism of the transfer matrix and scattering matrix methods to calculate the electromagnetic responses of one-dimensional stacking of anisotropic materials. The eigenvalues of the scattering matrix reveal the presence of polaritons, which were calculated for the proposed systems, being analyzed the dispersion ratio of the different polaritons. For this, a computational tool developed by the ITA research group, Polaripy, was used. We studied the dispersion of plasmons-polaritons through the scattering matrix in a graphene monolayer and in a fine black phosphorus film, as well as phonon-polaritons in a layer of 30nm of hBN. We also analyzed the hybridized modes resulting from two-by-two stacking of the specified graphene, black phosphorus and hBN layers. Finally, with the stacking of the three materials simultaneously, the analysis of the hybridized modes of anisotropic polariton plasmons-phonons was made. The results may be of great interest for future applications in sensors, waveguides and optical communication technologies.

Lista de Figuras

FIGURA 1.1 – Esquemática para uma interface metal/dielétrico no plano $z = 0$. O meio dielétrico ocupa o semi-espaço $z > 0$, enquanto o metal o semi-espaço $z < 0$ (ANDRADE-NETO <i>et al.</i> , 2017).	15
FIGURA 1.2 – Estrutura cristalina bidimensional do (a) grafeno (b) nitreto de boro hexagonal (c) fósforo negro (MOMMA; IZUMI, 2008).	20
FIGURA 1.3 – Heteroestruturas de van der Waals (GEIM; GRIGORIEVA, 2013).	21
FIGURA 1.4 – Polaritons em materiais bidimensionais (LOW <i>et al.</i> , 2016).	22
FIGURA 1.5 – Parte real da permissividade do hBN, as partes sombreadas são as bandas de Reststrahlen inferior (azul) e superior (rosa).	23
FIGURA 2.1 – Empilhamento de n camadas de materiais com diferentes permissividades elétricas e permeabilidades magnéticas. Cada camada j tem espessura d_j (BOMFIM, 2024) ¹	32
FIGURA 2.2 – Representação da combinação entre as matrizes $\mathbf{S}^{(1)}$ e $\mathbf{S}^{(2)}$ utilizando o produto estrela de Redheffer gerando a matriz $\mathbf{S}^{(12)}$	35
FIGURA 2.3 – Sistema de combinação de matrizes de espalhamento com o conceito do produto estrela de Redheffer.	37
FIGURA 2.4 – Fluxograma do uso do Polaripy	40
FIGURA 3.1 – Maior autovalor da matriz S em função da frequência e do momento no plano, e direção de propagação no plano dada por $\theta = 0.0^\circ$ para o sistema de ar/grafeno/ar. Os parâmetros usados para o grafeno foram: $E_F = 0.3$ eV, $\hbar\gamma = 4.0$ meV.	43
FIGURA 3.2 – À esquerda, temos a parte real e à direita temos a parte imaginária da função dielétrica do fósforo negro. Utilizamos $t = 2.9$ nm, $\eta = 2$ meV, $\epsilon_{zz} = 1$, $\epsilon_{xx,\infty} = 12.5$ e $\epsilon_{yy,\infty} = 10.2$. Parâmetros retirados de (BISWAS <i>et al.</i> , 2021)	45

- FIGURA 3.3 – Maior autovalor da matriz S para o sistema de ar/fósforo negro/ar em função da frequência e do momento no plano, e direção de propagação no plano dada por (a) $\theta = 0.0^\circ$, (b) $\theta = 30.0^\circ$ (c) $\theta = 60.0^\circ$ e (d) $\theta = 90.0^\circ$. Os parâmetros utilizados: espessura $t = 2.9$ nm, $\eta = 2\text{meV}$. A linha vermelha representa o cone de luz. 46
- FIGURA 3.4 – Maior autovalor da matriz S para o sistema de ar/fósforo negro/ar nas frequências de (a) 345.0 cm^{-1} , (b) 583.9 cm^{-1} e (c) 690.1 cm^{-1} em função dos números de onda no plano q_x e q_y . Apresentam modos hiperbólicos. Os parâmetros utilizados: espessura $t = 2.9$ nm, $\eta = 2\text{meV}$ 47
- FIGURA 3.5 – **Dispersão hiperbólica do hBN.**(a) Um esquema das curvas de iso-frequência para um meio hiperbólico do tipo II, que é realizado na faixa de parada superior do hBN. A seta indica a velocidade de grupo do polariton. (b) Um esquema semelhante para o caso do tipo I, que é realizado na faixa de parada inferior do hBN.(c) A superfície de dispersão calculada dos polaritons de hBN. Os eixos são o momento tangencial (k_t), o momento axial (k_z) e a frequência (ω), variando de 1.370 a 1.515cm^{-1} . A cor representa o ângulo de propagação. O corte de frequência constante $\omega = 1.515, \text{cm}^{-1}$ é mostrado pela linha vermelha, para enfatizar a similaridade com (a)(DAI *et al.*, 2015). 49
- FIGURA 3.6 – Maior autovalor da matriz S para o sistema ar/hBN/ar em função da frequência e do momento no plano, e direção de propagação no plano dada por $\theta = 0.0^\circ$. A espessura do hBN $t = 30$ nm. A linha vermelha representa o cone de luz. 49
- FIGURA 3.7 – Maior autovalor da matriz S para a heteroestrutura de ar/grafeno/hBN/ar em função da frequência e do momento no plano, e direção de propagação no plano dada por $\theta = 0.0^\circ$. A camada do grafeno possui espessura de 0.4 nm, $E_F = 0.3$ eV e $\hbar\gamma = 4.0$ meV, hBN possui espessura de 30 nm. A linha vermelha representa o cone de luz. 50
- FIGURA 3.8 – Maior autovalor da matriz S para a heteroestrutura de ar/fósforo negro/hBN/ar em função da frequência e do momento no plano, e direção de propagação no plano dada por (a) $\theta = 0.0^\circ$ (b) $\theta = 30.0^\circ$, (c) $\theta = 60.0^\circ$ e (d) $\theta = 90.0^\circ$. O fósforo negro possui uma espessura de $t = 2.9$ nm, $\eta = 2\text{meV}$, o hBN possui espessura $t = 30$ nm. A linha vermelha representa o cone de luz. 52

- FIGURA 3.9 – Maior autovalor da matriz S para a heteroestrutura de ar/fósforo negro/hBN/ar a uma frequência de 477.7 cm^{-1} (esquerda) e 583.9 cm^{-1} (direita) em função dos números de onda no plano q_x e q_y . Os parâmetros utilizados: para o fósforo negro com espessura de $t = 2.9\text{nm}$, $\eta = 2\text{meV}$, o hBN possui espessura $t = 30\text{nm}$ 53
- FIGURA 3.10 – Maior autovalor da matriz S para a heteroestrutura de ar/grafeno/-fósforo negro/ar em função da frequência e do momento no plano, e direção de propagação no plano dada por **(a)** $\theta = 0.0^\circ$ **(b)** $\theta = 30.0^\circ$, **(c)** $\theta = 60.0^\circ$ e **(d)** $\theta = 90.0^\circ$. Os parâmetros utilizados para o grafeno: $E_F = 0.3\text{eV}$, $\hbar\gamma = 4.0\text{meV}$. Os parâmetros para o fósforo negro: espessura $t = 2.9\text{nm}$, $\eta = 2\text{meV}$. A linha vermelha representa o cone de luz. 54
- FIGURA 3.11 – Maior autovalor da matriz S para a heteroestrutura de ar/grafeno/fósforo negro/ar a uma frequência de **(a)** 350.0 cm^{-1} , **(b)** 400.0 cm^{-1} **(c)** 500 cm^{-1} e **(d)** 600 cm^{-1} em função dos números de onda no plano q_x e q_y . Os parâmetros utilizados para o grafeno: $E_F = 0.3\text{eV}$, $\hbar\gamma = 4.0\text{meV}$. Os parâmetros para o fósforo negro: espessura $t = 2.9\text{nm}$, $\eta = 2\text{meV}$ 55
- FIGURA 3.12 – Maior autovalor da matriz S para a heteroestrutura de ar/grafeno/hBN/fósforo negro/ar em função da frequência e do momento no plano, e direção de propagação no plano dada por **(a)** $\theta = 0.0^\circ$ **(b)** $\theta = 30.0^\circ$, **(c)** $\theta = 60.0^\circ$ e **(d)** $\theta = 90.0^\circ$. Os parâmetros utilizados para o grafeno: espessura $d = 0.4\text{nm}$ $E_F = 0.3\text{eV}$, $\hbar\gamma = 4\text{meV}$. Os parâmetros utilizados para o fósforo negro: espessura $t = 2.9\text{nm}$, $\eta = 2\text{meV}$. O hBN possui espessura $t = 30\text{nm}$. A linha vermelha representa o cone de luz. 57
- FIGURA 3.13 – Maior autovalor da matriz S para a heteroestrutura de ar/grafeno/hBN/fósforo negro/ar a uma frequência de **(a)** 300.0 cm^{-1} , **(b)** 400.0 cm^{-1} **(c)** 500 cm^{-1} e **(d)** 700 cm^{-1} em função dos números de onda no plano q_x e q_y . Os parâmetros utilizados para o grafeno: espessura $d = 0.4\text{nm}$ $E_F = 0.3\text{eV}$, $\hbar\gamma = 4\text{meV}$. Os parâmetros utilizados para o fósforo negro: espessura $t = 2.9\text{nm}$, $\eta = 2\text{meV}$. O hBN possui espessura $t = 30\text{nm}$ 58

Sumário

1	INTRODUÇÃO	14
1.1	Polariton	14
1.2	Relação de dispersão para o plasmon-polaritons de superfície	15
1.3	Ópticas de materiais anisotrópicos	19
1.4	Novos materiais bidimensionais	20
1.5	Polaritons em materiais bidimensionais	21
1.5.1	Plasmon-polaritons	22
1.5.2	Fônon-polaritons	23
1.5.3	Éxciton-polaritons	24
1.5.4	Mágnon-polaritons	24
1.5.5	Microscopia de Varredura de Campo Próximo (s-SNOM)	24
1.6	Objetivos e organização da dissertação	25
2	MÉTODO DA MATRIZ DE ESPALHAMENTO	26
2.1	Propagação de luz em meios anisotrópicos infinitos	26
2.2	Matriz de transferência	32
2.3	Matriz de espalhamento	34
2.3.1	Produto estrela de Redheffer	34
2.3.2	Relação entre a matriz \mathbf{M} e a matriz \mathbf{S}	37
2.3.3	Coefficiente de Fresnel	39
2.4	Polaripy	40
3	PLASMON-FÔNON POLARITONS ANISOTRÓPICOS	42
3.1	Plasmon-polaritons em grafeno e fósforo negro e fônon-polaritons em hBN	42

3.1.1	Grafeno	42
3.1.2	Fósforo negro	44
3.1.3	Nitreto de Boro Hexagonal	48
3.2	Grafeno/hBN	50
3.3	Fósforo negro/hBN	51
3.4	Grafeno/Fósforo negro	53
3.5	Grafeno/hBN/Fósforo negro	56
4	CONCLUSÃO	60
	REFERÊNCIAS	61
	APÊNDICE A – VERIFICAÇÃO DO ANULAMENTO DAS EQUAÇÕES	66
	APÊNDICE B – CÓDIGO POLARIPY	68
	APÊNDICE C – RELAÇÃO ENTRE O MAIOR AUTOVALOR DA MATRIZ DE ESPALHAMENTO E ESTADOS EVANESCENTES	85

1 Introdução

1.1 Polariton

Por séculos, a humanidade se questionou sobre a natureza da luz, sem uma resposta definitiva. Com o avanço da ciência, surgiu a teoria da unificação entre a eletricidade e o magnetismo, conhecida como eletromagnetismo, descrita pelas equações de Maxwell. Desde a compreensão teórica do que é a luz, houve um grande avanço tecnológico que trouxe mudanças significativas no cotidiano da sociedade, como, por exemplo, todos os dispositivos eletrônicos e diversos dispositivos fotônicos utilizados na ciência de base. (BUTT *et al.*, 2021). Com isso, surgiram áreas fundamentais para o estudo da manipulação da luz, que ocorre por meio de sua interação com a matéria.

Polariton é uma quasipartícula resultante da hibridização da luz-matéria, ou seja, o acoplamento entre o fóton e os modos coletivos em sólidos. Os polaritons são classificados dependendo do modo particular da matéria que o campo eletromagnético se acopla (BASOV *et al.*, 2016). Por exemplo, temos o fônon-polariton, resultante do acoplamento entre a vibração coletiva de átomos em uma rede cristalina e o fóton (HUANG, 1951) e o éxciton-polariton, resultante do acoplamento entre um par elétron-buraco e o fóton (HOPFIELD, 1958). Os polaritons podem ser de volume, nos quais os modos acoplados ocupam todo o material, ou de superfície, quando o modo se concentra em uma interface. Nessa dissertação, o foco será nos polaritons de superfície.

A primeira observação de plasmon-polaritons de superfície ocorreu em 1902, em um experimento realizado por Wood, mas sem o entendimento teórico na época. Wood notou dois tipos de anomalias nas medições da refletividade da luz difratada em diferentes grades metálicas, que ficaram conhecidas por anomalias de Wood (WOOD, 1902b; WOOD, 1902a). A descrição teórica da primeira anomalia foi feita por Lord Rayleigh, em 1907 (RAYLEIGH, 1907). Nesse mesmo ano, Zenneck formulou a solução para uma onda de superfície para as equações de Maxwell (ZENNECK, 1907). O segundo tipo de anomalia foi explicado em 1941, por Fano. Ele descreveu a existência de oscilações de carga confinadas na superfície de um material (GUPTA *et al.*, 2015). E em 1957, Ritchie nomeou, pela primeira vez, o termo plasmon-polaritons de superfície (RITCHIE, 1957). Em 1962, Ritchie e Eldridge

publicaram sobre experimentos incluindo sua explicação teórica sobre a emissão de fótons a partir de folhas metálicas irradiadas, demonstrando que plasmons gerados em uma folha de metal decaem pela emissão de um fóton transversal (RITCHIE; ELDRIDGE, 1962). Posteriormente, em 1968, Otto publicou um entendimento claro sobre plasmon-polaritons de superfície (do inglês *surface plasmon polaritons*, SPP), em que um dielétrico é utilizado entre um prisma e o metal para excitar os SPP. Nessa configuração, há reflexão total atenuada na interface do prisma com o dielétrico, e os modos evanescentes resultantes são responsáveis por excitar os SPP (OTTO, 1968). Quando a luz incide sobre a interface entre um material condutor e um dielétrico, os elétrons livres do material condutor são excitados e, com isso, são criadas oscilações coletivas de carga, os plasmons, que, por sua vez, interagem com ondas eletromagnéticas, acoplando-se aos fótons e resultando na formação de plasmon-polaritons de superfície.

1.2 Relação de dispersão para o plasmon-polaritons de superfície

Podemos obter a relação de dispersão, i.e., a relação entre frequência e vetor de onda, para o plasmon-polaritons de superfície em uma interface metal-dielétrico a partir das soluções das equações de Maxwell considerando as condições de contorno para os campos na interface. Partindo de um sistema de coordenadas cartesianas, iremos considerar que o plano de incidência é (x, z) . Vamos considerar que metal e dielétrico são meios semi-infinitos cuja interface se encontra no plano $z = 0$, em que $z > 0$ é o semi-espaço ocupado pelo dielétrico e $z < 0$ é o semi-espaço ocupado pelo metal (veja a Fig. 1.1).



FIGURA 1.1 – Esquematização para uma interface metal/dielétrico no plano $z = 0$. O meio dielétrico ocupa o semi-espaço $z > 0$, enquanto o metal o semi-espaço $z < 0$ (ANDRADE-NETO *et al.*, 2017).

Para o metal (meio 1) consideraremos que a função dielétrica é complexa e depende da frequência ω , podendo ser decomposta em: $\epsilon_1(\omega) = \epsilon'_1(\omega) + i\epsilon''_1(\omega)$, onde $\epsilon'_1(\omega)$ é a parte real e $\epsilon''_1(\omega)$ é a parte imaginária. Para o meio dielétrico (meio 2) a função dielétrica ϵ_2 será considerada uma constante real positiva.

Podemos escrever as expressões dos campos elétrico e magnético para cada um dos

meios:

$$z < 0 \Rightarrow \begin{cases} \mathbf{E}_1 = (E_{01,x}\hat{x} + E_{01,z}\hat{z})e^{(ik_{1x}x+k_{1z}z-i\omega t)}, \\ \mathbf{H}_1 = (H_{01,y}\hat{y})e^{(ik_{1x}x+k_{1z}z-i\omega t)}, \end{cases} \quad (1.1a)$$

$$z > 0 \Rightarrow \begin{cases} \mathbf{E}_2 = (E_{02,x}\hat{x} + E_{02,z}\hat{z})e^{(ik_{2x}x-k_{2z}z-i\omega t)}, \\ \mathbf{H}_2 = (H_{02,y}\hat{y})e^{(ik_{2x}x-k_{2z}z-i\omega t)}, \end{cases} \quad (1.1b)$$

onde foi considerado o modo onde o campo magnético é transverso ao plano de incidência (TM). $E_{0i,x}$ e $E_{0i,z}$ são as componentes x e z , respectivamente, da amplitude do campo elétrico e $H_{0i,y}$ é a componente y da amplitude do campo magnético, k_{ix} e k_{iz} são as componentes x e z do vetor de onda, e o índice $i = 1$ ou 2 identifica o meio 1 (metal) e meio 2 (dielétrico). Podemos simplificar as expressões dos campos elétrico e magnético para facilitar o manuseio das equações, logo temos que:

$$\mathbf{E}_i = E_{ix}\hat{x} + E_{iz}\hat{z}, \quad (1.2)$$

$$\mathbf{H}_i = H_{iy}\hat{y}, \quad (1.3)$$

e

$$E_{ix} = E_{0i,x}e^{\varphi_i}, \quad (1.4a)$$

$$E_{iz} = E_{0i,z}e^{\varphi_i}, \quad (1.4b)$$

$$H_{iy} = H_{0i,y}e^{\varphi_i}, \quad (1.4c)$$

onde $\varphi_i = ik_{ix}x \pm k_{iz}z - i\omega t$ e o sinal menos (+) para o meio 1 (metal) e o sinal mais (-) para o meio 2 (dielétrico).

Considerando as equações de Maxwell em um meio material não-magnético, homogêneo, isotrópico e local no domínio da frequência

$$\nabla \times \mathbf{H}_i = -i\omega \mathbf{D}_i, \quad (1.5a)$$

$$\nabla \times \mathbf{E}_i = i\omega \mathbf{H}_i, \quad (1.5b)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{D}_i = 0, \quad (1.5c)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{H}_i = 0, \quad (1.5d)$$

onde $\mathbf{D}_i = \epsilon_i(\omega)\mathbf{E}_i$ e o índice $i = 1$ ou 2 identificam os meios metal e dielétrico, respectivamente.

Empregando as condições de contorno sobre os vetores de campo na interface, onde a componente tangencial do campo elétrico E_x e a componente normal do campo mag-

nético H_y devem ser contínuas, e considerando que na interface entre os meios não há cargas livres, a componente normal $D_z = \epsilon E_z$ do vetor deslocamento \mathbf{D} também deve ser contínua. Consequentemente:

$$E_{01x} = E_{02x}, \quad (1.6a)$$

$$H_{01y} = H_{02y}, \quad (1.6b)$$

$$\epsilon_1 E_{01z} = \epsilon_2 E_{02z}. \quad (1.6c)$$

Calculando o rotacional da Eq. (1.5a), onde obtemos:

$$\nabla \times \mathbf{H}_i = -\frac{\partial H_{iy}}{\partial z} \hat{x} + \frac{\partial H_{ix}}{\partial x} \hat{z}. \quad (1.7)$$

Substituindo as Eq. (1.7) e (1.2) em (1.5a) temos que:

$$-\frac{\partial H_{iy}}{\partial z} \hat{x} + \frac{\partial H_{ix}}{\partial x} \hat{z} = -i\omega\epsilon_i(\omega)(E_{ix}\hat{x} + E_{iz}\hat{z}). \quad (1.8)$$

Utilizando as Eqs. (1.4a-1.4c) em (1.8) obtemos as expressões para o meio 1 e meio 2, respectivamente:

$$k_{1z}H_{01y} = -\omega\epsilon_1(\omega)E_{01x}, \quad (1.9a)$$

$$k_{1x}H_{01y} = -\omega\epsilon_1(\omega)E_{01z}, \quad (1.9b)$$

e

$$k_{2z}H_{02y} = \omega\epsilon_2 E_{02x}, \quad (1.9c)$$

$$k_{2x}H_{02y} = -\omega\epsilon_2 E_{02z}. \quad (1.9d)$$

Pelas condições de contorno $E_{01x} = E_{02x}$, e substituindo a Eq. (1.9c) na Eq. (1.9a)

$$k_{1z}H_{01y} = -\frac{\epsilon_1(\omega)}{\epsilon_2(\omega)}k_{2z}H_{02y}, \quad (1.10)$$

iremos obter:

$$\frac{k_{1z}}{\epsilon_1(\omega)}H_{01y} = -\frac{k_{2z}}{\epsilon_2}H_{02y}. \quad (1.11)$$

Formando o sistema com as Eqs. (1.6b) e (1.11), temos:

$$H_{01y} - H_{02y} = 0, \quad (1.12a)$$

$$\frac{k_{1z}}{\epsilon_1(\omega)} H_{01y} + \frac{k_{2z}}{\epsilon_2} H_{02y} = 0. \quad (1.12b)$$

Para obtermos uma solução não-trivial, o determinante do sistema de equações 1.12 tem que se anular, portanto temos que:

$$\frac{k_{1z}}{\epsilon_1(\omega)} + \frac{k_{2z}}{\epsilon_2} = 0. \quad (1.13)$$

Substituindo a Eq. (1.5a) na Eq. (1.5b) obtemos a Eq. de Helmholtz, que resulta na conhecida relação entre o número de onda e a frequência em um meio isotrópico:

$$k_x^2 + k_{jz}^2 = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \epsilon_j. \quad (1.14)$$

Combinando as Eqs. (1.13) e (1.14) obtemos a relação de dispersão para o plasmon-polariton de superfície em uma interface entre o metal e um dielétrico:

$$k_x(\omega) = \frac{\omega}{c} \sqrt{\frac{\epsilon_1(\omega)\epsilon_2}{\epsilon_1(\omega) + \epsilon_2}}, \quad (1.15)$$

que descreve a relação entre o número de onda k_x ao longo da interface entre os dois meios e a frequência angular ω . Para que a Eq. (1.15) seja válida precisamos que $\epsilon_1(\omega) < 0$. Sabendo que a função dielétrica do metal $\epsilon_1(\omega)$ é complexa, resulta que o vetor de onda k_x é complexo, ou seja, $k_x = k'_x + ik''_x$. Assumindo que ϵ_2 e ω são reais e que $\epsilon''_1 \ll |\epsilon'_1|$, obtemos então as expressões (RAETHER, 1998; ANDRADE-NETO *et al.*, 2017):

$$k'_x(\omega) \approx \frac{\omega}{c} \sqrt{\frac{\epsilon'_1(\omega)\epsilon_2}{\epsilon'_1(\omega) + \epsilon_2}}, \quad (1.16a)$$

$$k''_x(\omega) \approx \frac{1}{2} \frac{\omega}{c} \left(\frac{\epsilon'_1(\omega)\epsilon_2}{\epsilon'_1(\omega) + \epsilon_2} \right)^{3/2} \frac{\epsilon''_1}{(\epsilon'_1(\omega))^2}. \quad (1.16b)$$

A partir da relação de dispersão determinamos o comprimento de onda e o comprimento de propagação dos plasmon-polaritons de superfície, analisando a parte real do vetor de onda k'_x determinamos o comprimento de onda do SPP, dado por $\lambda_{SPP} = 2\pi/k'_x$, substituindo a Eq. (1.16a) na expressão do λ_{SPP} , temos que:

$$\lambda_{SPP} = \frac{(2\pi c)}{\omega} \sqrt{\frac{\epsilon'_1(\omega) + \epsilon_2}{\epsilon'_1(\omega)\epsilon_2}} = \lambda_0 \sqrt{\frac{\epsilon'_1(\omega) + \epsilon_2}{\epsilon'_1(\omega)\epsilon_2}}, \quad (1.17)$$

onde, λ_0 é o comprimento de onda da luz no vácuo. Conforme observado na Eq. (1.17) e

considerando o regime onde $\epsilon_2 = 1$ e $|\epsilon'_1| > 1$, implica que:

$$\frac{\lambda_{SPP}}{\lambda_0} < 1, \quad (1.18)$$

em que o comprimento de onda do SPP λ_{SPP} é menor que o comprimento de onda da radiação que excita o sistema (ANDRADE-NETO *et al.*, 2017).

O comprimento de propagação dos plasmon-polaritons de superfície pode ser determinado pela parte imaginária do vetor de onda k''_x , que descreve o decaimento exponencial da amplitude do campo elétrico ao longo da interface. O comprimento de propagação do SPP é definido como a distância para que o campo elétrico decaia a $1/e$ do valor inicial, $L_{SPP} = 1/k''_x$. Substituindo a Eq.(1.16b) na expressão do L_{SPP} temos que:

$$L_{SPP} = \frac{1}{\pi} \frac{c}{\omega} \left[\frac{\epsilon'_1(\omega) + \epsilon_2}{\epsilon'_1(\omega)\epsilon_2} \right]^{3/2} \frac{[\epsilon'_1(\omega)]^2}{\epsilon''_1(\omega)} = \frac{\lambda_0}{\pi} \left[\frac{\epsilon'_1(\omega) + \epsilon_2}{\epsilon'_1(\omega)\epsilon_2} \right]^{3/2} \frac{[\epsilon'_1(\omega)]^2}{\epsilon''_1(\omega)}. \quad (1.19)$$

O comprimento de propagação, quando comparado ao comprimento de onda, indica a distância a partir da qual o campo elétrico do SPP se torna desprezível, caracterizando a distância que o SPP percorre na superfície. A determinação do comprimento de onda e do comprimento de propagação do SPP são importantes para a sua caracterização e o seu uso em dispositivos plasmônicos.

1.3 Ópticas de materiais anisotrópicos

Na seção anterior, discutimos polaritons de superfície em uma das situações mais simples possíveis: na interface entre dois meios isotrópicos. Porém, podemos também ter polaritons de superfície em meios anisotrópicos.

Os materiais anisotrópicos apresentam propriedades ópticas que dependem da direção da propagação de uma onda eletromagnética em relação à orientação interna do material. Portanto, a descrição da permissividade elétrica em materiais anisotrópicos pode ser feita por meio de tensores de permissividade e o vetor deslocamento \mathbf{D} e o campo elétrico \mathbf{E} não são necessariamente paralelos. Em materiais anisotrópicos temos o fenômeno da birrefringência, em que, para um determinado ângulo de incidência, há dois índices de refração distintos, que dependem da polarização da luz.

Em materiais uniaxiais, a permissividade em um dos eixos, por exemplo, na direção x é distinta daquela nas direções y e z . Além disso, para materiais uniaxiais há dois tipos de índice de refração, o ordinário e extraordinário, como o nitreto de boro hexagonal (hBN), que será estudado nesta dissertação. Nos materiais biaxiais, cada eixo principal apresenta uma permissividade distinta, sendo suas propriedades descritas por um tensor

de permissividade. Estes materiais desempenham um papel fundamental em diversas aplicações tecnológicas, incluindo dispositivos de controle de polarização (WANG *et al.*, 2022), telecomunicações (DINIZ; BORGES, 2010) e sensores (RODRIGO *et al.*, 2015).

1.4 Novos materiais bidimensionais

Os materiais bidimensionais (2D) constituem uma classe promissora, tendo sido objeto de pesquisa para diversas aplicações, em particular na nanofotônica, devido à forte interação entre a luz e matéria que esses novos materiais apresentam (BASOV *et al.*, 2016). Os materiais 2D são lamelares e formados por poucas camadas de átomos, ou seja, seus portadores de carga possuem graus de liberdade em duas dimensões e estão confinados na terceira dimensão. O exemplo clássico dessa classe de materiais é o grafeno, descoberto em 2004 por Andre Geim e Konstantin Novoselov, onde foi utilizada a técnica de esfoliação mecânica no grafite para a obtenção de uma única folha de átomos de carbono com estrutura hexagonal (como um favo de mel), veja a Fig. 1.2a, que rendeu o Prêmio Nobel de Física em 2010 (NOVOSELOV *et al.*, 2004; GONÇALVES; PERES, 2016). Com sua estrutura cristalina 2D, ele apresenta propriedades notáveis como alta resistência mecânica, mas também é flexível, possui alta condutividade elétrica e térmica (GONÇALVES; PERES, 2016).

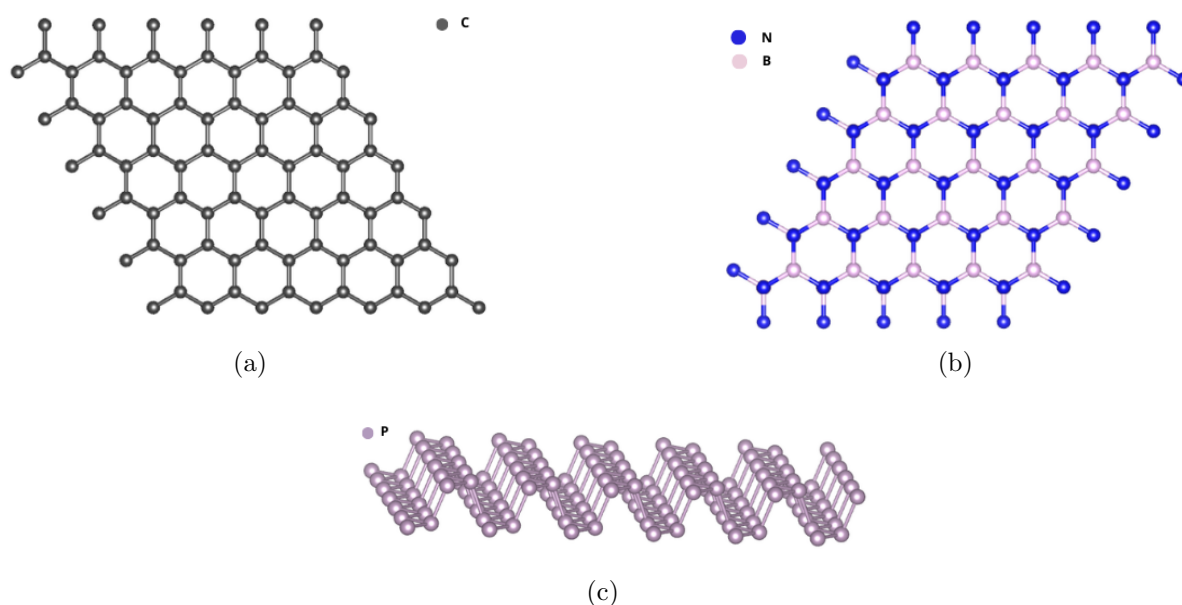


FIGURA 1.2 – Estrutura cristalina bidimensional do (a) grafeno (b) nitreto de boro hexagonal (c) fósforo negro (MOMMA; IZUMI, 2008).

Após a descoberta do grafeno, foram isoladas monocamadas de outros materiais, como

o nitreto de boro hexagonal (hBN), que possui uma estrutura semelhante à do grafeno (veja a Fig. 1.2b)(CALDWELL *et al.*, 2019), tendo como propriedades uma alta força de ruptura dielétrica e resistência à oxidação (SILVA, 2019) sendo por isso bastante utilizado para o encapsulamento de outros materiais 2D, e os dicalcogenetos de metais de transição (TMDs, na sigla em inglês *Transition metal dichalcogenides*), que apresentam propriedades elétricas e ópticas de interesse à pesquisa de base (MANZELI *et al.*, 2017). Além desses, temos o fósforo negro, cujas propriedades eletrônicas e ópticas são anisotrópicas, ou seja, variam dependendo da direção no plano bidimensional (XIA *et al.*, 2019) e sua estrutura cristalina 2D é sanfonada, conforme ilustrado na Fig. 1.2c.

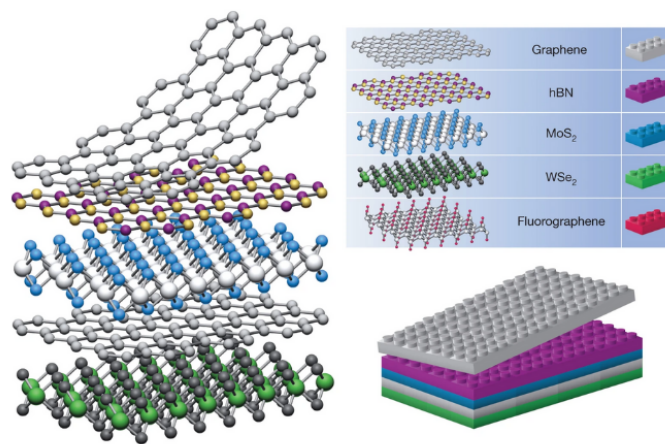


FIGURA 1.3 – Heteroestruturas de van der Waals (GEIM; GRIGORIEVA, 2013).

O surgimento de novos materiais bidimensionais tem impulsionado as pesquisas sobre heteroestruturas. O empilhamento de diferentes camadas desses materiais, ou seja, a sobreposição de monocamadas distintas, pode ser comparado a peças de Lego (GEIM; GRIGORIEVA, 2013), como é visto na Fig. 1.3, em que esses empilhamentos mantêm-se ligados por uma interação fraca do tipo van der Waals e a sua estabilidade é devida às ligações covalentes fortes, que nos permitem desenvolver diversos tipos de materiais, denominados heteroestruturas de van der Waals (vdW), com grande potencial para exploração de novas funcionalidades e propriedades ópticas, em especial a propagação de modos de polaritons de superfície.

1.5 Polaritons em materiais bidimensionais

Os materiais 2D são capazes de suportar diversos tipos de polaritons, como pode ser visto na Fig. 1.4 (LOW *et al.*, 2016). Nessa figura, é mostrado o plasmon-polaritons, presentes no grafeno dopado e fósforo negro, fônons-polaritons, presentes em hBN e isolantes topológicos, éxcitons-polaritons, presentes em dicalcogenetos de metais de transição,

polaritons de pares de Cooper, presentes em supercondutores 2D, e mágnon-polaritons, presentes em antiferromagnéticos 2D.

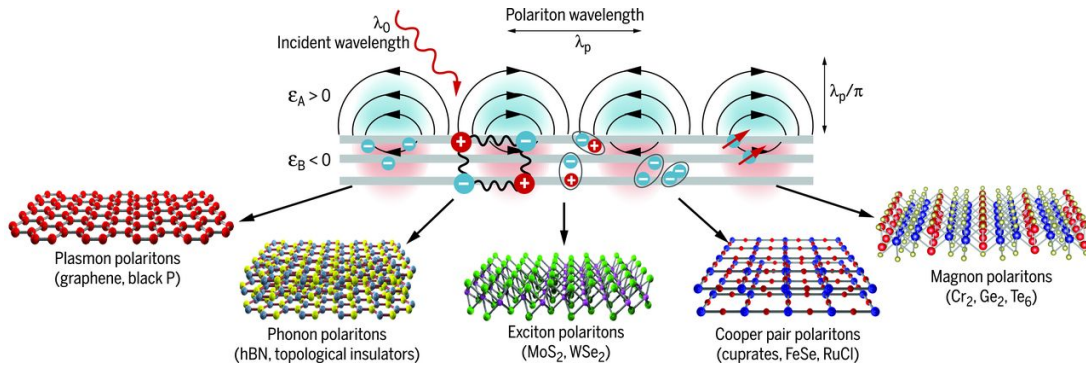


FIGURA 1.4 – Polaritons em materiais bidimensionais (LOW *et al.*, 2016).

1.5.1 Plasmon-polaritons

Um modo de plasmon-polaritons é uma oscilação coletiva de elétrons livres em metais ou em interfaces metal-dielétrico, acoplada a um campo eletromagnético. Muitas propriedades interessantes já foram estudadas com o uso de plasmon-polaritons em metais (LOW *et al.*, 2016). O maior desafio para a aplicação de plasmon-polaritons em componentes nanofotônicos é que, devido ao efeito Joule nos metais, há perda de energia, o que limita o comprimento de propagação dos SPP a distâncias muito curtas, da ordem de micrômetros (IQBAL, 2015).

O grafeno oferece vantagens em relação aos metais nobres para o seu uso em plasmônica. Devido à sua baixa densidade de estados, que ainda pode ser controlada por processos químicos, elétricos e ópticos (LOW *et al.*, 2016), é possível induzir polaritons em estruturas de grafeno utilizando luz na faixa do infravermelho, uma faixa de frequência segura para ser utilizada em aplicações (TIELROOIJ *et al.*, 2015). Além disso, em grafeno encapsulado por hBN, há um baixo acoplamento elétron-fônon, possibilitando uma maior mobilidade dos seus portadores de carga devido à proteção contra impurezas que o hBN proporciona.

Um outro material muito promissor para aplicações baseadas em plasmon-polaritons é o fósforo negro, especialmente pela sua anisotropia e sua boa mobilidade de portadores de carga. Além disso, suas diferentes condutividades ópticas, $\sigma_{xx} \neq \sigma_{yy}$, implicam em uma frente de onda hiperbólica (LOW *et al.*, 2016). No caso do grafeno, podem-se excitar plasmon-polaritons que se propagam igualmente em todas as direções de sua superfície, ou seja, sua condutividade óptica é igual em ambos os eixos, $\sigma_{xx} = \sigma_{yy}$, implicando em uma frente de onda circular.

1.5.2 Fônon-polaritons

Para uma rede cristalina, sua energia de vibração é quantizada, e esse quantum de vibração é denominado fônon (KITTEL, 2004). Em materiais 2D, essas vibrações podem ocorrer no plano, resultando em um movimento longitudinal ou transversal, ou fora do plano, criando um movimento transversal (NIKA; BALANDIN, 2017). Os modos de fônon-polaritons são as oscilações dos átomos de uma rede cristalina acoplados às ondas eletromagnéticas. Podemos observar fônon-polariton em uma estrutura de hBN, um material cuja resposta óptica em determinadas faixas de frequência é naturalmente hiperbólica, que dispõe de dois modos de fônons ativos no infravermelho e que podem ser analisados em duas faixas distintas de frequências, chamadas bandas de Reststrahlen superior, onde temos os modos de fônons no plano ($\omega \sim 1.370 - 1.610\text{cm}^{-1}$), e a banda inferior, em que temos os modos de fônons fora do plano ($\omega \sim 700 - 830\text{cm}^{-1}$) (KUMAR *et al.*, 2015; LOW *et al.*, 2016).

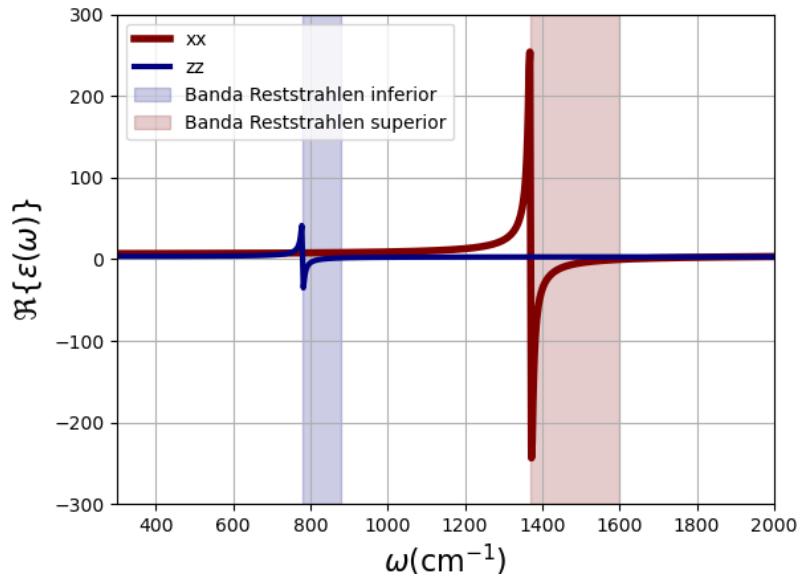


FIGURA 1.5 – Parte real da permissividade do hBN, as partes sombreadas são as bandas de Reststrahlen inferior (azul) e superior (rosa).

Como observado na Fig. 1.5, essas duas bandas satisfazem o critério de hiperbolicidade para as funções dielétricas do hBN. Para a faixa inferior, temos a função dielétrica na direção z $\epsilon_z < 0$ e a função dielétrica tangencial $\epsilon_t > 0$. Já para a faixa superior, temos $\epsilon_z > 0$ e $\epsilon_t < 0$, implicando a possibilidade de observação de fônons-polaritons hiperbólicos nessas faixas.

1.5.3 Éxciton-polaritons

Quando um fóton é absorvido por um semicondutor, um elétron é excitado para a banda de condução e um buraco, de carga oposta, é criado na banda de valência. A atração coulombiana entre o buraco e o elétron pode criar, assim, um par ligado que é conhecido como éxciton (HA *et al.*, 2017). Quando ocorre o acoplamento entre o fóton e o éxciton, é gerado o éxciton-polariton, que pode ser observado em semicondutores bidimensionais, como, por exemplo, em dicalcogenetos de metais de transição (TMDs), que possuem um grande potencial para o desenvolvimento de novas tecnologias devido às suas propriedades ópticas (LIU *et al.*, 2015). Um dos primeiros trabalhos a propor a existência de éxciton-polaritons de superfície em materiais 2D foi realizado a partir do estudo das propriedades eletrônicas do hBN (FERREIRA *et al.*, 2019), bem como sua primeira indicação experimental, em 2020, a partir da obtenção da função dielétrica de uma monocamada de TMD encapsulada por hBN (EPSTEIN *et al.*, 2020).

1.5.4 Mágnon-polaritons

Mágnon é uma excitação coletiva que é caracterizada pela propagação quantizada da energia de uma onda de spin em materiais magnéticos ordenados, destacando-se os ferromagnéticos (DANTAS *et al.*, 2023) e antiferromagnéticos (REZENDE *et al.*, 2019). As ondas de spin são relevantes para a determinação das propriedades magnéticas dos materiais (ALBUQUERQUE; COTTAM, 2004) e os primeiros estudos envolvendo ondas de spin foram feitos por Felix Bloch (BLOCH, 1930). Quando a frequência da onda incidente se aproxima da frequência de ressonância dos mágnons, a propagação da onda eletromagnética em um material magnético é afetada, ocorrendo o acoplamento entre as oscilações de spin e as ondas eletromagnéticas, formando, assim, os mágnons-polaritons (DANTAS *et al.*, 2023), que são importantes para ampliar os conhecimentos das propriedades ópticas e magnéticas dos materiais. Além disso, podem ser aplicados para o processamento e armazenamento de informação nas áreas de spintrônica e magnônica (JÚNIOR, 2018; KRUGLYAK *et al.*, 2010).

1.5.5 Microscopia de Varredura de Campo Próximo (s-SNOM)

Para a investigação dos polaritons, uma técnica possível é a Microscopia de Varredura de Campo Próximo (s-SNOM). Essa técnica permite estudar polaritons de superfície, como plasmon, fônon e éxciton em heteroestruturas bidimensionais, além de analisar campos elétricos locais (BARCELOS, 2015). O s-SNOM combina a microscopia de infravermelho (IR) com a Microscopia de Força Atômica (AFM), proporcionando informações sobre as propriedades ópticas da região em nanoescala do material sob uma ponta metálica.

Além disso, a técnica s-SNOM possibilita obter imagens espectrais de IR em nanoescala, superando o limite de difração. É possível obter a relação de dispersão dos polaritons utilizando a técnica de s-SNOM. Um dos objetivos desta dissertação é realizar o cálculo teórico dessa dispersão.

1.6 Objetivos e organização da dissertação

Ao serem empilhados diferentes tipos de materiais bidimensionais, formando heteroestruturas, modos hibridizados de polaritons, cada um suportado por um material diferente, podem surgir (LOW *et al.*, 2016). Essa dissertação irá investigar alguns tipos de polaritons de superfície em materiais anisotrópicos, bem como modos hibridizados, de diferentes heteroestruturas contendo grafeno, fósforo negro e hBN.

No Capítulo 2, detalhamos o método da matriz de espalhamento no formalismo 4×4 . No Capítulo 3, analisamos os modos de plasmon-polaritons de superfície em grafeno, fósforo negro e na heteroestrutura de grafeno-fósforo negro, além de estudarmos os modos de fônons-polaritons de superfície em hBN, bem como os modos hibridizados de plasmon-fônon polaritons de superfície em heteroestruturas de grafeno-hBN, fósforo negro-hBN, grafeno-hBN-fósforo negro. Para isso, será empregado um procedimento equivalente à função *loss*, definida como a parte imaginária do coeficiente de reflexão num dado sistema. Por fim, no Capítulo 4, apresentamos a conclusão com as descobertas dos modos triplos hibridizados.

2 Método da Matriz de Espalhamento

O empilhamento arbitrário de diferentes camadas de materiais 2D anisotrópicos permite desenvolver heteroestruturas com novas respostas ópticas, que podem apresentar novos modos de polaritons hibridizados. Para calcular a resposta eletromagnética, no caso, os coeficientes de Fresnel da heteroestrutura, utilizamos o formalismo 4×4 do método da matriz de espalhamento (matriz S), que conecta os campos elétrico e magnético das ondas incidentes aos das ondas emergentes. Entretanto, é importante compreender o método da matriz de transferência antes do método da matriz de espalhamento.

O método da matriz de transferência (matriz M) consiste em resolver as equações de Maxwell para uma onda eletromagnética propagando-se em um empilhamento de materiais de tamanhos definidos e permissividades diferentes. Para isso, resolve-se as equações de Maxwell para uma única camada de material, obtendo-se uma matriz que relaciona os campos elétrico e magnético na entrada e na saída do material. Para um sistema de multicamadas, aplicam-se as condições de contorno nas interfaces entre os materiais para obter as matrizes relacionadas. A partir do produto das matrizes de transferências de cada camada é possível obter a matriz M total.

Primeiro, vamos obter os modos de propagação para uma onda eletromagnética monocromática em um meio dielétrico e magnético arbitrário, mas homogêneo. Após isso, vamos mostrar como obter a matriz de transferência para a propagação em um sistema com N camadas empilhadas no eixo z . Em seguida, vamos discutir a matriz de espalhamento, mostrando como fazer a composição da matriz de espalhamento e como obtê-la a partir da matriz de transferência. Por fim, discutiremos como obter os coeficientes de Fresnel e a implementação numérica desse método.

2.1 Propagação de luz em meios anisotrópicos infinitos

Considerando um meio dielétrico e magnético genérico, as equações de Maxwell no vácuo, ou seja, sem a presença de fontes livres, e no domínio da frequência, são apresentadas

como:

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = 0, \quad (2.1a)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0, \quad (2.1b)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = i\omega \mathbf{B}, \quad (2.1c)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = -i\omega \mathbf{D}. \quad (2.1d)$$

Além disso, as relações constitutivas para meios lineares e homogêneos são dadas por:

$$\mathbf{D} = \epsilon_0 \epsilon \mathbf{E}, \quad (2.2a)$$

$$\mathbf{B} = \mu_0 \mu \mathbf{H}, \quad (2.2b)$$

onde ϵ e μ são as matrizes de permissividade e permeabilidade, respectivamente, de tal forma que:

$$\epsilon = \begin{bmatrix} \epsilon_{xx} & \epsilon_{xy} & \epsilon_{xz} \\ \epsilon_{yx} & \epsilon_{yy} & \epsilon_{yz} \\ \epsilon_{zx} & \epsilon_{zy} & \epsilon_{zz} \end{bmatrix}, \quad (2.3)$$

$$\mu = \begin{bmatrix} \mu_{xx} & \mu_{xy} & \mu_{xz} \\ \mu_{yx} & \mu_{yy} & \mu_{yz} \\ \mu_{zx} & \mu_{zy} & \mu_{zz} \end{bmatrix}. \quad (2.4)$$

Consideraremos a propagação de uma onda plana, ou seja, os campos possuem uma dependência espacial da forma $e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}$, onde $\mathbf{q} = (q_x, q_y, k_z)$. Com essas propriedades, pode-se reescrever o rotacional do campo elétrico da seguinte forma:

$$\nabla \times \mathbf{E} = \begin{bmatrix} \hat{x} & \hat{y} & \hat{z} \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ E_x & E_y & E_z \end{bmatrix} = \quad (2.5)$$

$$= \left(\frac{\partial E_z}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial z} \right) \hat{x} + \left(\frac{\partial E_x}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial x} \right) \hat{y} + \left(\frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial y} \right) \hat{z} \quad (2.6)$$

$$= (iq_y E_z - ik_z E_y) \hat{x} + (ik_z E_x - iq_x E_z) \hat{y} + (iq_x E_y - iq_y E_x) \hat{z} = i\mathbf{q} \times \mathbf{E} \quad (2.7)$$

Escrevendo o produto vetorial como uma multiplicação de matrizes, obtém-se:

$$\mathbf{q} \times \mathbf{E} = \begin{bmatrix} 0 & k_z & -q_y \\ k_z & 0 & -q_x \\ -q_y & q_x & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_x \\ E_y \\ E_z \end{bmatrix} = R\mathbf{E}. \quad (2.8)$$

Para o estudo da propagação de uma onda plana em um empilhamento de materiais anisotrópicos ao longo da direção z , a componente do número de onda de interesse é k_z , pois ao contrário das componentes no plano, que se conservam pela simetria de translação, essa componente irá ser dependente do material em que se propaga. Portanto, iremos separar a matriz R da seguinte forma:

$$R = \begin{bmatrix} 0 & -k_z & q_y \\ k_z & 0 & -q_x \\ -q_y & q_x & 0 \end{bmatrix} = k_z \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 & q_y \\ 0 & 0 & -q_x \\ -q_y & q_x & 0 \end{pmatrix} \equiv k_z B + \bar{R}. \quad (2.9)$$

De forma análoga, temos o mesmo para o rotacional do campo \mathbf{H} . Assim, reescrevendo as Eqs. (1.5b) e (2.1d), obtemos:

$$R\mathbf{E} = \omega\mathbf{B}, \quad (2.10)$$

$$R\mathbf{H} = -\omega\mathbf{D}, \quad (2.11)$$

substituindo a Eq. (2.10) na equação (2.2a):

$$R\epsilon^{-1}\mathbf{D} = \epsilon_0\omega\mathbf{B}, \quad (2.12)$$

usando também as Eqs. (2.2b) e (2.11), obtém-se, após rearranjar os termos,

$$R\mu^{-1}R\epsilon^{-1}\mathbf{D} = -k_0^2\mathbf{D}, \quad (2.13)$$

sendo $k_0 = \sqrt{\epsilon_0\mu_0}\omega = \frac{\omega}{c}$, onde c é a velocidade da luz no vácuo. Reescrevendo a Eq. (2.13) utilizando a Eq. (2.9), temos que:

$$(k_z B + \bar{R}) \mu^{-1} (k_z B + \bar{R}) \epsilon^{-1} \mathbf{D} = -k_0^2 \mathbf{D}. \quad (2.14)$$

Explicitando k_z na forma de um polinômio:

$$[(B\mu^{-1}B\epsilon^{-1})k_z^2 + (B\mu^{-1}\bar{R}\epsilon^{-1} + \bar{R}\mu^{-1}B\epsilon^{-1})k_z + \bar{R}\mu^{-1}\bar{R}\epsilon^{-1}] \mathbf{D} = -k_0^2 \mathbf{D}. \quad (2.15)$$

Para simplificar a notação, as seguintes variáveis serão definidas:

$$A^{(2)} = \bar{B}\mu^{-1}\bar{B}\epsilon^{-1}, \quad (2.16)$$

$$A^{(1)} = \bar{B}\mu^{-1}\bar{R}\epsilon^{-1} + \bar{R}\mu^{-1}\bar{B}\epsilon^{-1}, \quad (2.17)$$

$$A^{(0)} = \bar{R}\mu^{-1}\bar{R}\epsilon^{-1}. \quad (2.18)$$

Reescrevemos, então, a Eq. (2.15) como

$$(k_z^2 A^{(2)} + k_z A^{(1)} + A^{(0)})\mathbf{D} = \lambda\mathbf{D}, \quad (2.19)$$

sendo $\lambda = -k_0^2$. Utilizando a equação 2.1a para isolar a componente z do campo \mathbf{D} , tem-se

$$D_z = -\frac{q_x D_x + q_y D_y}{k_z}. \quad (2.20)$$

Para que a Eq. (2.20) seja válida, sempre será considerado $k_z \neq 0$. Para as demais componentes, consideramos:

$$A^{(i)} = \begin{pmatrix} A_{xx}^{(i)} & A_{xy}^{(i)} & A_{xz}^{(i)} \\ A_{yx}^{(i)} & A_{yy}^{(i)} & A_{yz}^{(i)} \\ A_{zx}^{(i)} & A_{zy}^{(i)} & A_{zz}^{(i)} \end{pmatrix}. \quad (2.21)$$

Com as componentes das matrizes $A^{(i)}$ definidas, a Eq. (2.19) pode ser reescrita, para as componentes x e y , como:

$$\begin{aligned} & (k_z^2 A_{xx}^{(2)} + k_z A_{xx}^{(1)} + A_{xx}^{(0)}) D_x + (k_z^2 A_{xy}^{(2)} + k_z A_{xy}^{(1)} + A_{xy}^{(0)}) D_y + \\ & - (k_z^2 A_{xz}^{(2)} + k_z A_{xz}^{(1)} + A_{xz}^{(0)}) \frac{q_x D_x + q_y D_y}{k_z} = -k_0^2 D_x, \end{aligned} \quad (2.22)$$

$$\begin{aligned} & (k_z^2 A_{yx}^{(2)} + k_z A_{yx}^{(1)} + A_{yx}^{(0)}) D_x + (k_z^2 A_{yy}^{(2)} + k_z A_{yy}^{(1)} + A_{yy}^{(0)}) D_y + \\ & - (k_z^2 A_{yz}^{(2)} + k_z A_{yz}^{(1)} + A_{yz}^{(0)}) \frac{q_x D_x + q_y D_y}{k_z} = -k_0^2 D_y. \end{aligned} \quad (2.23)$$

Reorganizando os termos:

$$\begin{aligned} & (k_z^2 A_{xx}^{(2)} + k_z (A_{xx}^{(1)} - q_x A_{xz}^{(2)}) + (k_0^2 + A_{xx}^{(0)} - q_x A_{xz}^{(1)}) - k_z^{-1} q_x A_{xz}^{(0)}) D_x + \\ & + (k_z^2 A_{xy}^{(2)} + k_z (A_{xy}^{(1)} - q_y A_{xz}^{(2)}) + (A_{xy}^{(0)} - q_y A_{xz}^{(1)}) - k_z^{-1} q_y A_{xz}^{(0)}) D_y = 0, \end{aligned} \quad (2.24)$$

$$\begin{aligned} & (k_z^2 A_{yx}^{(2)} + k_z (A_{yx}^{(1)} - q_x A_{yz}^{(2)}) + (A_{yx}^{(0)} - q_x A_{yz}^{(1)}) - k_z^{-1} q_x A_{yz}^{(0)}) D_x + \\ & + (k_z^2 A_{yy}^{(2)} + k_z (A_{yy}^{(1)} - q_y A_{yz}^{(2)}) + (k_0^2 + A_{yy}^{(0)} - q_y A_{yz}^{(1)}) - k_z^{-1} q_y A_{yz}^{(0)}) D_y = 0. \end{aligned} \quad (2.25)$$

Definindo, por fim, os coeficientes de k_z como:

$$\alpha_{ij}^{(2)} \equiv A_{ij}^{(2)}, \quad (2.26)$$

$$\alpha_{ij}^{(1)} \equiv A_{ij}^{(1)} - q_j A_{iz}^{(2)}, \quad (2.27)$$

$$\alpha_{ij}^{(0)} \equiv k_0^2 \delta_{ij} + A_{ij}^{(0)} - q_j A_{iz}^{(1)}, \quad (2.28)$$

$$\alpha_{ij}^{(-1)} \equiv -q_j A_{iz}^{(0)}, \quad (2.29)$$

as equações se tornam:

$$\begin{aligned} & (k_z^2 \alpha_{xx}^{(2)} + k_z \alpha_{xx}^{(1)} + \alpha_{xx}^{(0)} + k_z^{-1} \alpha_{xx}^{(-1)}) D_x + \\ & (k_z^2 \alpha_{xy}^{(2)} + k_z \alpha_{xy}^{(1)} + \alpha_{xy}^{(0)} + k_z^{-1} \alpha_{xy}^{(-1)}) D_y = 0, \end{aligned} \quad (2.30)$$

$$\begin{aligned} & (k_z^2 \alpha_{yx}^{(2)} + k_z \alpha_{yx}^{(1)} + \alpha_{yx}^{(0)} + k_z^{-1} \alpha_{yx}^{(-1)}) D_x + \\ & (k_z^2 \alpha_{yy}^{(2)} + k_z \alpha_{yy}^{(1)} + \alpha_{yy}^{(0)} + k_z^{-1} \alpha_{yy}^{(-1)}) D_y = 0. \end{aligned} \quad (2.31)$$

Esse sistema de equações nas variáveis D_x e D_y deve ter soluções não triviais, que podem ser encontradas a partir do determinante da matriz de seus coeficientes, que deve ser nulo. Assim:

$$\begin{aligned} & (k_z^2 \alpha_{xx}^{(2)} + k_z \alpha_{xx}^{(1)} + \alpha_{xx}^{(0)} + k_z^{-1} \alpha_{xx}^{(-1)}) (k_z^2 \alpha_{yy}^{(2)} + k_z \alpha_{yy}^{(1)} + \alpha_{yy}^{(0)} + k_z^{-1} \alpha_{yy}^{(-1)}) - \\ & (k_z^2 \alpha_{yx}^{(2)} + k_z \alpha_{yx}^{(1)} + \alpha_{yx}^{(0)} + k_z^{-1} \alpha_{yx}^{(-1)}) (k_z^2 \alpha_{xy}^{(2)} + k_z \alpha_{xy}^{(1)} + \alpha_{xy}^{(0)} + k_z^{-1} \alpha_{xy}^{(-1)}) = 0. \end{aligned} \quad (2.32)$$

Com bastante algebrismo (veja apêndice A), é possível chegar que:

$$\alpha_{xx}^{(-1)} \alpha_{yy}^{(-1)} - \alpha_{yx}^{(-1)} \alpha_{xy}^{(-1)} = 0, \quad (2.33)$$

e também que:

$$\alpha_{yy}^{(-1)} \alpha_{xx}^{(0)} + \alpha_{xx}^{(-1)} \alpha_{yy}^{(0)} - \alpha_{xy}^{(-1)} \alpha_{yx}^{(0)} - \alpha_{yx}^{(-1)} \alpha_{xy}^{(0)} = 0. \quad (2.34)$$

A partir dessas relações, é possível, finalmente, obter uma equação polinomial de quarto

grau para k_z , da seguinte forma:

$$\begin{aligned}
& (\alpha_{xx}^{(2)}\alpha_{yy}^{(2)} - \alpha_{yx}^{(2)}\alpha_{xy}^{(2)}) k_z^4 + \\
& (\alpha_{xx}^{(1)}\alpha_{yy}^{(2)} + \alpha_{xx}^{(2)}\alpha_{yy}^{(1)} - \alpha_{yx}^{(1)}\alpha_{xy}^{(2)} - \alpha_{yx}^{(2)}\alpha_{xy}^{(1)}) k_z^3 + \\
& (\alpha_{xx}^{(0)}\alpha_{yy}^{(2)} + \alpha_{xx}^{(1)}\alpha_{yy}^{(1)} + \alpha_{xx}^{(2)}\alpha_{yy}^{(0)} - \alpha_{yx}^{(0)}\alpha_{xy}^{(2)} - \alpha_{yx}^{(1)}\alpha_{xy}^{(1)} - \alpha_{yx}^{(2)}\alpha_{xy}^{(0)}) k_z^2 + \\
& (\alpha_{xx}^{(-1)}\alpha_{yy}^{(2)} + \alpha_{xx}^{(0)}\alpha_{yy}^{(1)} + \alpha_{xx}^{(1)}\alpha_{yy}^{(0)} + \alpha_{xx}^{(2)}\alpha_{yy}^{(-1)} - \\
& - \alpha_{yx}^{(-1)}\alpha_{xy}^{(2)} - \alpha_{yx}^{(0)}\alpha_{xy}^{(1)} - \alpha_{yx}^{(1)}\alpha_{xy}^{(0)} - \alpha_{yx}^{(2)}\alpha_{xy}^{(-1)}) k_z + \\
& \alpha_{xx}^{(-1)}\alpha_{yy}^{(1)} + \alpha_{xx}^{(0)}\alpha_{yy}^{(0)} + \alpha_{xx}^{(1)}\alpha_{yy}^{(-1)} - \alpha_{yx}^{(-1)}\alpha_{xy}^{(1)} - \alpha_{yx}^{(0)}\alpha_{xy}^{(0)} - \alpha_{yx}^{(1)}\alpha_{xy}^{(-1)} \\
& = 0. \tag{2.35}
\end{aligned}$$

Esse polinômio permite quatro soluções para o vetor de onda no eixo z . Para sistemas isotrópicos, existem apenas duas soluções distintas e de mesmo módulo que correspondem à propagação no eixo z , no sentido positivo ou negativo. Para cada raiz, rotulamos a solução com $i = 1, 2, 3, 4$, sendo os rótulos 1 e 2 para as soluções com a parte real negativa de k_z , ou no caso em que essa se anula e possui parte imaginária positiva. E os rótulos 3 e 4 para aqueles que têm parte real positiva ou, no caso que essa se anula, possui parte imaginária negativa. Para cada solução k_i do polinômio anterior, temos um autoestado do campo eletromagnético caracterizado pelas componentes $\mathbf{e}_i, \mathbf{d}_i, \mathbf{b}_i, \mathbf{h}_i$, que satisfazem as equações de Maxwell. Uma solução geral pode ser decomposta como:

$$\mathbf{E}(z) = \sum_i c_i \mathbf{e}_i e^{ik_i z}, \tag{2.36a}$$

$$\mathbf{D}(z) = \sum_i c_i \mathbf{d}_i e^{ik_i z}, \tag{2.36b}$$

$$\mathbf{B}(z) = \sum_i c_i \mathbf{b}_i e^{ik_i z}, \tag{2.36c}$$

$$\mathbf{H}(z) = \sum_i c_i \mathbf{h}_i e^{ik_i z}, \tag{2.36d}$$

onde c_i são os coeficientes de decomposição. O campo \mathbf{d} pode ser obtido tratando as Eqs. (2.24) e (2.25) como um sistema de equações de autovalor para $-k_0^2$. Os autovetores dessa matriz possuem como componentes d_x e d_y . A componente d_z pode ser obtida pela Eq. (2.20). Assim, é possível calcular os demais campos eletromagnéticos no material fazendo:

$$\mathbf{e}_i = \frac{1}{\epsilon_0} \epsilon^{-1} \mathbf{d}_i, \tag{2.37a}$$

$$\mathbf{b}_i = \frac{1}{\omega} R \mathbf{e}_i, \tag{2.37b}$$

$$\mathbf{h}_i = \frac{1}{\mu_0} \mu^{-1} \mathbf{b}_i. \tag{2.37c}$$

Utilizaremos as Eqs. (2.38a-2.38d) e (2.37a-2.37c) na próxima seção.

2.2 Matriz de transferência

Vamos considerar um empilhamento de N materiais com matrizes de permissividade e permeabilidade ϵ_j e μ_j , respectivamente, com $j = 1, 2, \dots, N$, como descrito na Fig. 2.1. A matriz de transferência M relaciona os campos elétrico e magnético que se propagam à esquerda do sistema com os campos que se propagam à direita do sistema. Para determinar a matriz M , as condições de contorno na interface entre cada camada de material devem ser consideradas.

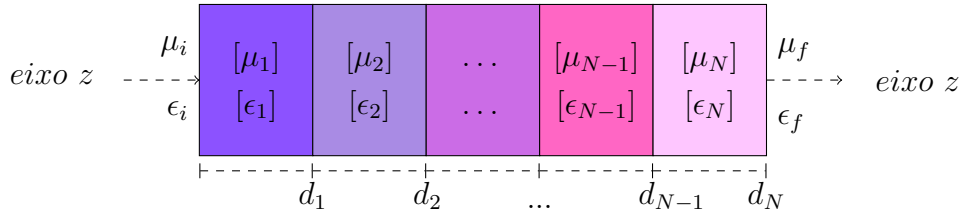


FIGURA 2.1 – Empilhamento de n camadas de materiais com diferentes permissividades elétricas e permeabilidades magnéticas. Cada camada j tem espessura d_j (BOMFIM, 2024)¹.

Para cada camada, fazemos a decomposição dos campos eletromagnéticos em seus modos de propagação, conforme visto na seção anterior, o que resulta em:

$$\mathbf{E}_j(z) = \sum_i c_{i,j} \mathbf{e}_{i,j} e^{ik_{i,j}z}, \quad (2.38a)$$

$$\mathbf{D}_j(z) = \sum_i c_{i,j} \mathbf{d}_{i,j} e^{ik_{i,j}z}, \quad (2.38b)$$

$$\mathbf{B}_j(z) = \sum_i c_{i,j} \mathbf{b}_{i,j} e^{ik_{i,j}z}, \quad (2.38c)$$

$$\mathbf{H}_j(z) = \sum_i c_{i,j} \mathbf{h}_{i,j} e^{ik_{i,j}z}, \quad (2.38d)$$

Utilizando o sistema de referência da Fig. 2.1, as condições de contorno entre cada camada adjacente são dadas por:

$$\mathbf{E}_j(d_j) \cdot \mathbf{u}_x = \mathbf{E}_{j+1}(d_j) \cdot \mathbf{u}_x, \quad (2.39a)$$

$$\mathbf{E}_j(d_j) \cdot \mathbf{u}_y = \mathbf{E}_{j+1}(d_j) \cdot \mathbf{u}_y, \quad (2.39b)$$

$$\mathbf{H}_j(d_j) \cdot \mathbf{u}_x = \mathbf{H}_{j+1}(d_j) \cdot \mathbf{u}_x, \quad (2.39c)$$

$$\mathbf{H}_j(d_j) \cdot \mathbf{u}_y = \mathbf{H}_{j+1}(d_j) \cdot \mathbf{u}_y, \quad (2.39d)$$

¹Agradeço ao Gabriel Carneiro Bomfim por disponibilizar a imagem usada nessa dissertação.

que podem ser reescritas, utilizando as Eqs. (2.38a) e (2.38c), como:

$$\sum_{i=1}^4 c_{i,j} (\mathbf{e}_{i,j} \cdot \mathbf{u}_x) (e^{ik_{i,j}d_j}) = \sum_{i=1}^4 c_{i,j+1} (\mathbf{e}_{i,j+1} \cdot \mathbf{u}_x) (e^{ik_{i,j+1}d_j}), \quad (2.40a)$$

$$\sum_{i=1}^4 c_{i,j} (\mathbf{e}_{i,j} \cdot \mathbf{u}_y) (e^{ik_{i,j}d_j}) = \sum_{i=1}^4 c_{i,j+1} (\mathbf{e}_{i,j+1} \cdot \mathbf{u}_y) (e^{ik_{i,j+1}d_j}), \quad (2.40b)$$

$$\sum_{i=1}^4 c_{i,j} (\mathbf{b}_{i,j} \cdot \mathbf{u}_x) (e^{ik_{i,j}d_j}) = \sum_{i=1}^4 c_{i,j+1} (\mathbf{b}_{i,j+1} \cdot \mathbf{u}_x) (e^{ik_{i,j+1}d_j}), \quad (2.40c)$$

$$\sum_{i=1}^4 c_{i,j} (\mathbf{b}_{i,j} \cdot \mathbf{u}_y) (e^{ik_{i,j}d_j}) = \sum_{i=1}^4 c_{i,j+1} (\mathbf{b}_{i,j+1} \cdot \mathbf{u}_y) (e^{ik_{i,j+1}d_j}). \quad (2.40d)$$

Esse sistema de 4 equações pode ser mais simplesmente escrito definindo a matriz \mathcal{C}_j , dada por:

$$\mathcal{C}_j = \begin{pmatrix} \mathbf{e}_{1,j} \cdot \mathbf{u}_x & \mathbf{e}_{2,j} \cdot \mathbf{u}_x & \mathbf{e}_{3,j} \cdot \mathbf{u}_x & \mathbf{e}_{4,j} \cdot \mathbf{u}_x \\ \mathbf{e}_{1,j} \cdot \mathbf{u}_y & \mathbf{e}_{2,j} \cdot \mathbf{u}_y & \mathbf{e}_{3,j} \cdot \mathbf{u}_y & \mathbf{e}_{4,j} \cdot \mathbf{u}_y \\ \mathbf{b}_{1,j} \cdot \mathbf{u}_x & \mathbf{b}_{2,j} \cdot \mathbf{u}_x & \mathbf{b}_{3,j} \cdot \mathbf{u}_x & \mathbf{b}_{4,j} \cdot \mathbf{u}_x \\ \mathbf{b}_{1,j} \cdot \mathbf{u}_y & \mathbf{b}_{2,j} \cdot \mathbf{u}_y & \mathbf{b}_{3,j} \cdot \mathbf{u}_y & \mathbf{b}_{4,j} \cdot \mathbf{u}_y \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{ik_{1,j}d_j} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{ik_{2,j}d_j} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{ik_{3,j}d_j} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{ik_{4,j}d_j} \end{pmatrix}. \quad (2.41)$$

Portanto,

$$\mathcal{C}_j \begin{pmatrix} c_{1,j} \\ c_{2,j} \\ c_{3,j} \\ c_{4,j} \end{pmatrix} = \mathcal{C}_{j+1} \begin{pmatrix} c_{1,j+1} \\ c_{2,j+1} \\ c_{3,j+1} \\ c_{4,j+1} \end{pmatrix}. \quad (2.42)$$

A partir do sinal da parte real de k_z , conforme definimos na seção anterior, podemos definir a direção de propagação. As ondas que se propagam para a esquerda são definidas a partir de:

$$L_j = \begin{pmatrix} c_{1,j} \\ c_{2,j} \end{pmatrix}, \quad (2.43)$$

em que L_j representa dois canais de propagação dos modos que se direcionam para a esquerda, referenciados pelos subscritos 1 e 2. Já para a direita,

$$R_j = \begin{pmatrix} c_{3,j} \\ c_{4,j} \end{pmatrix}, \quad (2.44)$$

em que R_j representa dois canais de propagação dos modos que se direcionam para a

direita, referenciados pelos subscritos 3 e 4. A partir da Eq. (2.42), temos:

$$\mathcal{C}_j \begin{pmatrix} L_j \\ R_j \end{pmatrix} = \mathcal{C}_{j+1} \begin{pmatrix} L_{j+1} \\ R_{j+1} \end{pmatrix}. \quad (2.45)$$

A Eq. (2.45) nos dá uma relação direta entre as ondas que se propagam à frente e atrás de cada camada j . Se multiplicarmos ambos os lados da equação por \mathcal{C}_{j+1}^{-1} à esquerda, podemos, então, definir a matriz de transferência M_j para cada camada como sendo:

$$M_j = \mathcal{C}_{j+1}^{-1} \mathcal{C}_j. \quad (2.46)$$

Portanto, reescrevendo então a Eq. (2.45), temos:

$$\begin{pmatrix} L_{j+1} \\ R_{j+1} \end{pmatrix} = M_j \begin{pmatrix} L_j \\ R_j \end{pmatrix}, \quad (2.47)$$

podemos obter a matriz de transferência total, que conecta os campos à esquerda e a direita do empilhamento de materiais, fazendo a multiplicação de cada matriz de transferência M_j .

2.3 Matriz de espalhamento

A matriz de espalhamento S retorna a onda de saída a partir da onda de entrada, sendo escrita como:

$$\begin{pmatrix} L_j \\ R_{j+1} \end{pmatrix} = S_j \begin{pmatrix} R_j \\ L_{j+1} \end{pmatrix}. \quad (2.48)$$

No caso das estruturas de van der Waals aqui tratadas, cada camada da estrutura apresenta uma parcela da onda incidente que retorna como onda refletida. Além disso, cada camada também recebe como entrada a onda refletida da camada posterior.

2.3.1 Produto estrela de Redheffer

Para um sistema multicamadas é preciso calcular a matriz de espalhamento para cada camada. Para obter a propagação por todo o sistema é necessário realizar a combinação entre as matrizes de cada camada e obter uma única matriz, que será a matriz S total. As matrizes de espalhamento foram escritas como matrizes de bloco 2×2 , como pode ser visto abaixo:

$$\mathbf{S}_{11} = \begin{bmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{S}_{12} = \begin{bmatrix} S_{13} & S_{14} \\ S_{23} & S_{24} \end{bmatrix},$$

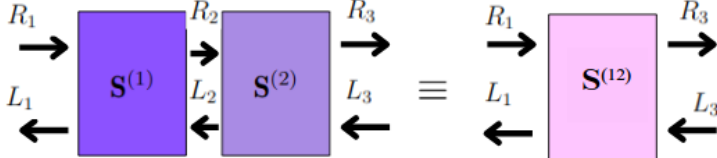
$$\mathbf{S}_{21} = \begin{bmatrix} S_{31} & S_{32} \\ S_{41} & S_{42} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{S}_{22} = \begin{bmatrix} S_{33} & S_{34} \\ S_{43} & S_{44} \end{bmatrix},$$


FIGURA 2.2 – Representação da combinação entre as matrizes $\mathbf{S}^{(1)}$ e $\mathbf{S}^{(2)}$ utilizando o produto estrela de Redheffer gerando a matriz $\mathbf{S}^{(12)}$.

Podemos combinar duas ou mais matrizes S , utilizando o produto estrela de Redheffer (REDHEFFER, 1961). Dada uma matriz de espalhamento $\mathbf{S}^{(1)}$ seguida de uma matriz de espalhamento $\mathbf{S}^{(2)}$, como pode ser visto na Fig. 2.2, podemos calcular a combinação dessas matrizes utilizando o produto estrela de Redheffer $\mathbf{S}^{(12)} = \mathbf{S}^{(1)} \otimes \mathbf{S}^{(2)}$, escrito da seguinte forma:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{S}_{11}^{(12)} & \mathbf{S}_{12}^{(12)} \\ \mathbf{S}_{21}^{(12)} & \mathbf{S}_{22}^{(12)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{S}_{11}^{(1)} & \mathbf{S}_{12}^{(1)} \\ \mathbf{S}_{21}^{(1)} & \mathbf{S}_{22}^{(1)} \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} \mathbf{S}_{11}^{(2)} & \mathbf{S}_{12}^{(2)} \\ \mathbf{S}_{21}^{(2)} & \mathbf{S}_{22}^{(2)} \end{bmatrix}, \quad (2.49)$$

sendo a matriz $\mathbf{S}^{(12)}$ definida como:

$$\begin{pmatrix} L_1 \\ R_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{S}_{11}^{(12)} & \mathbf{S}_{12}^{(12)} \\ \mathbf{S}_{21}^{(12)} & \mathbf{S}_{22}^{(12)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} R_1 \\ L_3 \end{pmatrix}. \quad (2.50)$$

Para obter os elementos da combinação entre a matriz $\mathbf{S}^{(1)}$ e $\mathbf{S}^{(2)}$, escrevemos a matriz $\mathbf{S}^{(1)}$ da seguinte forma:

$$\begin{pmatrix} L_1 \\ R_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{S}_{11}^{(1)} & \mathbf{S}_{12}^{(1)} \\ \mathbf{S}_{21}^{(1)} & \mathbf{S}_{22}^{(1)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} R_1 \\ L_2 \end{pmatrix}. \quad (2.51)$$

Obtendo os elementos da matriz, temos:

$$L_1 = \mathbf{S}_{11}^{(1)} R_1 + \mathbf{S}_{12}^{(1)} L_2, \quad (2.52a)$$

$$R_2 = \mathbf{S}_{21}^{(1)} R_1 + \mathbf{S}_{22}^{(1)} L_2. \quad (2.52b)$$

Fazendo o mesmo para a matriz $\mathbf{S}^{(2)}$:

$$\begin{pmatrix} L_2 \\ R_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{S}_{11}^{(2)} & \mathbf{S}_{12}^{(2)} \\ \mathbf{S}_{21}^{(2)} & \mathbf{S}_{22}^{(2)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} R_2 \\ L_3 \end{pmatrix}. \quad (2.53)$$

Logo,

$$L_2 = \mathbf{S}_{11}^{(2)} R_2 + \mathbf{S}_{12}^{(2)} L_3, \quad (2.54a)$$

$$R_3 = \mathbf{S}_{21}^{(2)} R_2 + \mathbf{S}_{22}^{(2)} L_3. \quad (2.54b)$$

Precisamos obter os elementos L_1 e R_3 da matriz $\mathbf{S}^{(12)}$. Para isso, relacionaremos os elementos das matrizes $\mathbf{S}^{(1)}$ e $\mathbf{S}^{(2)}$. Substituindo (2.52b) em (2.54a), temos:

$$L_2 = \mathbf{S}_{11}^{(2)} (\mathbf{S}_{21}^{(1)} R_1 + \mathbf{S}_{22}^{(1)} L_2) + \mathbf{S}_{12}^{(2)} L_3. \quad (2.55)$$

Isolando L_2 , após algumas manipulações algébricas, obtemos:

$$L_2 = [\mathbf{I} - \mathbf{S}_{11}^{(2)} \mathbf{S}_{22}^{(1)}]^{-1} \mathbf{S}_{11}^{(2)} \mathbf{S}_{21}^{(1)} R_1 + [\mathbf{I} - \mathbf{S}_{11}^{(2)} \mathbf{S}_{22}^{(1)}]^{-1} \mathbf{S}_{12}^{(2)} L_3. \quad (2.56)$$

Substituindo em (2.52a) e explicitando R_1 e L_3 , temos:

$$L_1 = (\mathbf{S}_{11}^{(1)} + \mathbf{S}_{12}^{(1)} [\mathbf{I} - \mathbf{S}_{11}^{(2)} \mathbf{S}_{22}^{(1)}]^{-1} \mathbf{S}_{11}^{(2)} \mathbf{S}_{21}^{(1)}) R_1 + \mathbf{S}_{12}^{(1)} [\mathbf{I} - \mathbf{S}_{11}^{(2)} \mathbf{S}_{22}^{(1)}]^{-1} \mathbf{S}_{12}^{(2)} L_3. \quad (2.57)$$

Tendo relacionado L_1 com R_1 e L_3 , vamos agora relacionar R_3 com R_1 e L_3 .

Desse modo, substituindo (2.54a) na Eq. (2.52b), temos:

$$R_2 = \mathbf{S}_{21}^{(1)} R_1 + \mathbf{S}_{22}^{(1)} [\mathbf{S}_{11}^{(2)} R_2 + \mathbf{S}_{12}^{(2)} L_3]. \quad (2.58)$$

Analisando R_2 da Eq. (2.58) e realizando um pouco de algebrismo, chegamos na expressão:

$$R_2 = [\mathbf{I} - \mathbf{S}_{22}^{(1)} \mathbf{S}_{11}^{(2)}]^{-1} \mathbf{S}_{21}^{(1)} R_1 + [\mathbf{I} - \mathbf{S}_{22}^{(1)} \mathbf{S}_{11}^{(2)}]^{-1} \mathbf{S}_{22}^{(1)} \mathbf{S}_{12}^{(2)} L_3. \quad (2.59)$$

Agora, substituindo (2.59) na expressão (2.54b) para obter R_3 , temos que:

$$R_3 = (\mathbf{S}_{21}^{(2)} [\mathbf{I} - \mathbf{S}_{22}^{(1)} \mathbf{S}_{11}^{(2)}]^{-1} \mathbf{S}_{21}^{(1)}) R_1 + (\mathbf{S}_{21}^{(2)} [\mathbf{I} - \mathbf{S}_{22}^{(1)} \mathbf{S}_{11}^{(2)}]^{-1} \mathbf{S}_{22}^{(1)} \mathbf{S}_{12}^{(2)} + \mathbf{S}_{22}^{(2)}) L_3. \quad (2.60)$$

As expressões (2.60) e (2.57) nos fornecem os elementos da matriz $\mathbf{S}^{(12)}$, encontrando, por

fim, os coeficientes do produto estrela de Redheffer como:

$$\begin{aligned}
 \mathbf{S}_{11}^{(12)} &= \mathbf{S}_{11}^{(1)} + \mathbf{S}_{12}^{(1)} [\mathbf{I} - \mathbf{S}_{11}^{(2)} \mathbf{S}_{22}^{(1)}]^{-1} \mathbf{S}_{11}^{(2)} \mathbf{S}_{21}^{(1)}, \\
 \mathbf{S}_{12}^{(12)} &= \mathbf{S}_{12}^{(1)} [\mathbf{I} - \mathbf{S}_{11}^{(2)} \mathbf{S}_{22}^{(1)}]^{-1} \mathbf{S}_{12}^{(2)}, \\
 \mathbf{S}_{21}^{(12)} &= \mathbf{S}_{21}^{(2)} [\mathbf{I} - \mathbf{S}_{22}^{(1)} \mathbf{S}_{11}^{(2)}]^{-1} \mathbf{S}_{21}^{(1)}, \\
 \mathbf{S}_{22}^{(12)} &= \mathbf{S}_{22}^{(2)} + \mathbf{S}_{21}^{(2)} [\mathbf{I} - \mathbf{S}_{22}^{(1)} \mathbf{S}_{11}^{(2)}]^{-1} \mathbf{S}_{22}^{(1)} \mathbf{S}_{12}^{(2)}.
 \end{aligned} \tag{2.61}$$

Portanto, para um sistema com n camadas a matriz \mathbf{S} total gerada pela combinação é dada por $\mathbf{S}^{(1)} \otimes \mathbf{S}^{(2)} \otimes \mathbf{S}^{(3)} \otimes \dots \otimes \mathbf{S}^{(n)}$. Pois o produto estrela de Redheffer é associativo. A Fig. 2.3 mostra o sistema com n camadas.

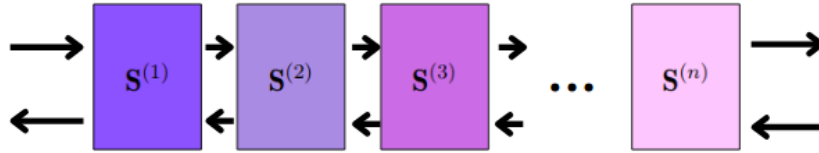


FIGURA 2.3 – Sistema de combinação de matrizes de espalhamento com o conceito do produto estrela de Redheffer.

2.3.2 Relação entre a matriz \mathbf{M} e a matriz \mathbf{S}

É fácil expressar os elementos da matriz \mathbf{M} em termos dos elementos da matriz \mathbf{S} , portanto, podemos fazer a seguinte associação para a matriz \mathbf{M} :

$$\begin{pmatrix} R_2 \\ L_2 \end{pmatrix} = \mathbf{M} \begin{pmatrix} R_1 \\ L_1 \end{pmatrix}, \tag{2.62}$$

$$\begin{pmatrix} R_2 \\ L_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{M}_{11} & \mathbf{M}_{12} \\ \mathbf{M}_{21} & \mathbf{M}_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} R_1 \\ L_1 \end{pmatrix}, \tag{2.63}$$

multiplicando a matriz, temos:

$$R_2 = \mathbf{M}_{11} R_1 + \mathbf{M}_{12} L_1, \tag{2.64a}$$

$$L_2 = \mathbf{M}_{21} R_1 + \mathbf{M}_{22} L_1. \tag{2.64b}$$

Faremos o mesmo para a matriz \mathbf{S} :

$$\begin{pmatrix} L_1 \\ R_2 \end{pmatrix} = \mathbf{S} \begin{pmatrix} R_1 \\ L_2 \end{pmatrix}, \tag{2.65}$$

$$\begin{pmatrix} L_1 \\ R_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{S}_{11} & \mathbf{S}_{12} \\ \mathbf{S}_{21} & \mathbf{S}_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} R_1 \\ L_2 \end{pmatrix}, \quad (2.66)$$

$$L_1 = \mathbf{S}_{11}R_1 + \mathbf{S}_{12}L_2, \quad (2.67a)$$

$$R_2 = \mathbf{S}_{21}R_1 + \mathbf{S}_{22}L_2. \quad (2.67b)$$

Evidenciando o L_2 na Eq. (2.67a):

$$L_2 = \mathbf{S}_{12}^{-1}L_1 - \mathbf{S}_{12}^{-1}\mathbf{S}_{11}R_1. \quad (2.68)$$

Substituindo L_2 na Eq. (2.67b), temos:

$$R_2 = \mathbf{S}_{21}R_1 + \mathbf{S}_{22}[\mathbf{S}_{12}^{-1}L_1 - \mathbf{S}_{12}^{-1}\mathbf{S}_{11}R_1], \quad (2.69a)$$

$$R_2 = [\mathbf{S}_{21} - \mathbf{S}_{22}\mathbf{S}_{12}^{-1}\mathbf{S}_{11}]R_1 + \mathbf{S}_{22}\mathbf{S}_{12}^{-1}L_1. \quad (2.69b)$$

Comparando as Eqs. (2.64a) e (2.64b) com as Eqs. (2.68) e (2.69b):

$$\begin{aligned} \mathbf{M}_{11} &= \mathbf{S}_{21} - \mathbf{S}_{22}\mathbf{S}_{12}^{-1}\mathbf{S}_{11}, \\ \mathbf{M}_{12} &= \mathbf{S}_{22}\mathbf{S}_{12}^{-1}, \\ \mathbf{M}_{21} &= -\mathbf{S}_{12}^{-1}\mathbf{S}_{11}, \\ \mathbf{M}_{22} &= \mathbf{S}_{12}^{-1}. \end{aligned} \quad (2.70)$$

Portanto, podemos organizar os elementos da matriz \mathbf{M} em termos dos elementos da matriz \mathbf{S} :

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} \mathbf{M}_{11} & \mathbf{M}_{12} \\ \mathbf{M}_{21} & \mathbf{M}_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{S}_{21} - \mathbf{S}_{22}\mathbf{S}_{12}^{-1}\mathbf{S}_{11} & \mathbf{S}_{22}\mathbf{S}_{12}^{-1} \\ -\mathbf{S}_{12}^{-1}\mathbf{S}_{11} & \mathbf{S}_{12}^{-1} \end{pmatrix}. \quad (2.71)$$

De forma análoga, podemos fazer o mesmo para a matriz \mathbf{S} e expressar os elementos da matriz pelos os elementos da matriz \mathbf{M} , tendo que:

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} \mathbf{S}_{11} & \mathbf{S}_{12} \\ \mathbf{S}_{21} & \mathbf{S}_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\mathbf{M}_{22}^{-1}\mathbf{M}_{21} & \mathbf{M}_{22}^{-1} \\ \mathbf{M}_{11} - \mathbf{M}_{12}\mathbf{M}_{22}^{-1}\mathbf{M}_{21} & \mathbf{M}_{12}\mathbf{M}_{22}^{-1} \end{pmatrix}, \quad (2.72)$$

dessa forma, podemos obter a matriz de espalhamento para cada camada j . O método da matriz de espalhamento é mais estável que o método da matriz de transferência quando temos ondas evanescentes (KO; SAMBLES, 1988). Como o propósito dessa dissertação é o estudo de modos de superfície, que por definição são evanescentes, usaremos a matriz de espalhamento para a obtenção dos resultados.

2.3.3 Coeficiente de Fresnel

Uma das grandes vantagens em se utilizar a matriz de espalhamento é a obtenção direta dos coeficientes de transmissão e reflexão do material. Para um formalismo 2×2 , a obtenção desses coeficientes é trivial, porém, para o formalismo 4×4 aqui utilizado, é necessário um passo a mais para explicitar esses coeficientes.

Dado um sistema com matriz de espalhamento S , vamos considerar a entrada dos modos que se propagam para a direita, sintetizados na matriz R_0 , que, em cada coluna, representa as amplitudes normalizadas dos modos de onda propagante e, em cada linha, representa os modos que foram deduzidos na equação 2.42, de modo que:

$$R_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (2.73)$$

Assim, R_0 representa as duas possíveis incidências de modos que são autoestados do primeiro meio. Também será forçado que não há onda que incida sobre o sistema propagando-se pela esquerda, definindo:

$$L_N = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.74)$$

Além disso, temos a matriz L_0 :

$$L_0 = \begin{pmatrix} r_{a,a} & r_{a,b} \\ r_{b,a} & r_{b,b} \end{pmatrix}, \quad (2.75)$$

representando as ondas refletidas para cada incidência distinta. Por fim, temos a matriz R_N :

$$R_N = \begin{pmatrix} t_{a,a} & t_{a,b} \\ t_{b,a} & t_{b,b} \end{pmatrix}, \quad (2.76)$$

representando as ondas transmitidas. Definidas essas matrizes, podemos aplicá-las à Eq. (2.48), resultando em:

$$\begin{pmatrix} L_0 \\ R_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11}^T & S_{12}^T \\ S_{21}^T & S_{22}^T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L_N \\ R_0 \end{pmatrix}. \quad (2.77)$$

Portanto:

$$L_0 = S_{12}^T R_0, \quad (2.78)$$

$$R_N = S_{22}^T R_0, \quad (2.79)$$

pelo que podemos identificar:

$$S_{12}^T = \begin{pmatrix} r_{a,a} & r_{a,b} \\ r_{b,a} & r_{b,b} \end{pmatrix}, \quad (2.80)$$

e

$$S_{22}^T = \begin{pmatrix} t_{a,a} & t_{a,b} \\ t_{b,a} & t_{b,b} \end{pmatrix}. \quad (2.81)$$

A partir dessa relação, podemos encontrar os coeficientes de transmissão e reflexão da estrutura de multicamadas diretamente da sua matriz de espalhamento.

2.4 Polaripy

O Polaripy é uma ferramenta computacional escrita em Python utilizando o Numpy, uma biblioteca de código aberto para computação científica que realiza operações em *arrays* multidimensionais e matrizes, além de outras coleções de funções matemáticas. O código é estruturado de forma modular, pois nosso objetivo é facilitar a adição de novas funcionalidades, visto que o código será disponibilizado para a comunidade científica. O Polaripy realiza o cálculo dos coeficientes de transmissão, reflexão e absorção na interface de materiais multicamadas, que podem ser anisotrópicos, através dos métodos da matriz de transferência e matriz de espalhamento, como apresentados aqui (veja o apêndice B). Também é possível observar os polaritons pelo maior autovalor da matriz S , como demonstrado no apêndice C. O Polaripy foi desenvolvido por um grupo de pesquisa do Instituto Tecnológico de Aeronáutica (ITA), composto por Gabriel Bomfim Carneiro, Ana Beatriz Monteiro dos Santos, Márcio Gholmie Labriola Filho e André Jorge Carvalho Chaves.

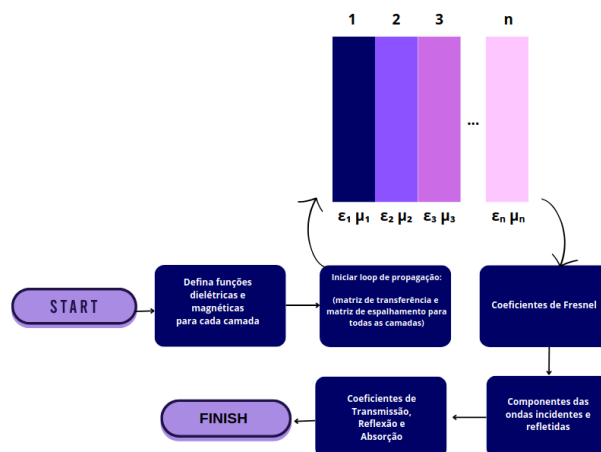


FIGURA 2.4 – Fluxograma do uso do Polaripy

Para utilizar o Polaripy, primeiro é necessário definir a função dielétrica de cada material para gerar a matriz de $\epsilon(\omega)$ para compor a lista de materiais utilizados. É possível adicionar uma relação finita e arbitrária de materiais. Em seguida, para definir a estrutura do sistema, os materiais da lista devem ser combinados com uma lista correspondente de espessuras. Para obter os modos plasmônicos, definem-se as frequências e os vetores de onda no plano. Logo depois, define-se um *array* tridimensional, em que serão definidos os pontos para cada dimensão e armazenar os resultados. E por fim, usando a função *imshow* para visualizar os polaritons através de *plots* da frequência em função do vetor de onda e do número de onda para uma determinada frequência. Após a definição do sistema, o processo de configuração da onda pode ser diferente e ser repetido para o mesmo sistema. Na Fig. 2.4 apresenta um fluxograma sobre como utilizar o Polaripy.

3 Plasmon-fônon polaritons anisotrópicos

A interação entre diferentes tipos de polaritons em um empilhamento composto de variados materiais pode resultar na formação de modos hibridizados, com propriedades distintas dos modos isolados. O objetivo deste capítulo é obter os modos de polaritons de superfície hibridizados da heteroestrutura contendo ar/grafeno/hBN/fósforo negro/ar. Isso será feito ao se estudar os autovalores da matriz de espalhamento, que revelam a presença de modos ligados, i.e., modos que são evanescentes. Esses modos podem ser confinados ou localizados (NOBRE *et al.*, 1998). Modos confinados são análogos a modos de guias de onda, cuja energia se concentra no interior da estrutura, enquanto os modos localizados se concentram nas interfaces. A relação de dispersão dos modos de superfície encontra-se à direita do cone de luz definido por $q = \omega/c$. Vamos começar estudando individualmente cada um dos materiais, seguindo a estrutura: ar/grafeno/ar, ar/fósforo negro/ar e ar/hBN/ar. Em seguida, faremos o estudo dos empilhamentos dois a dois dos materiais, i.e., estudaremos as heteroestruturas de ar/grafeno/hBN/ar, ar/fósforo negro/hBN/ar e ar/grafeno/fósforo negro/ar. Por fim, estudamos a heteroestrutura ar/grafeno/hBN/fósforo negro/ar, usando os resultados anteriores para comparação.

3.1 Plasmon-polaritons em grafeno e fósforo negro e fônon-polaritons em hBN

3.1.1 Grafeno

O grafeno é formado por uma única camada de átomos de carbono na hibridização sp^2 , formando uma estrutura hexagonal. As bandas de valência e condução formam superfícies que se tocam nos pontos K e K' da zona de Brillouin, que também são conhecidos como pontos de Dirac (CHAVES, 2018; BARCELOS, 2015). Além disso, a forma cônica das bandas de valência e condução é, em sua maioria, responsável pelas propriedades eletrônicas e ópticas do grafeno.

O grafeno possui uma grande versatilidade, sendo um dos materiais promissores para a plasmônica (POLITANO; CHIARELLO, 2014). No regime de transições intrabandas, o

grafeno suporta plasmon-polaritons de superfície. Isso pode ser visto pois, nesse regime, as propriedades ópticas do grafeno podem ser descritas pela condutividade de Drude (BLUDOV *et al.*, 2013):

$$\sigma(\omega) = \frac{4i|E_F|}{\pi(\hbar\omega + i\hbar\gamma)}\sigma_0, \quad (3.1)$$

onde E_F é a energia de Fermi, γ é a taxa de relaxamento das excitações eletrônicas, ω é a frequência e $\sigma_0 = e^2/4\hbar$. A função dielétrica pode ser expressa em relação à condutividade:

$$\epsilon(\omega) = 1 + \frac{i\sigma(\omega)}{\epsilon_0\omega d}, \quad (3.2)$$

onde ϵ_0 é a permissividade do vácuo e a espessura do grafeno é d . Para a obtenção dos modos de plasmon-polaritons de superfície, para uma estrutura ar/grafeno/ar, utilizamos o maior autovalor da matriz S . Os parâmetros utilizados para obtenção da dispersão foram $E_F = 0.3$ eV, $\hbar\gamma = 4$ meV e a espessura $d = 0.4$ nm. Utilizaremos esses mesmos parâmetros para o grafeno nos demais casos.

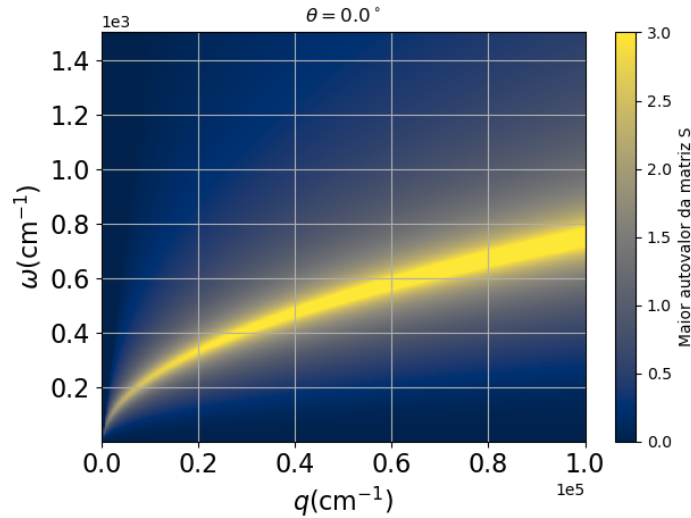


FIGURA 3.1 – Maior autovalor da matriz S em função da frequência e do momento no plano, e direção de propagação no plano dada por $\theta = 0.0^\circ$ para o sistema de ar/grafeno/ar. Os parâmetros usados para o grafeno foram: $E_F = 0.3$ eV, $\hbar\gamma = 4.0$ meV.

Na Fig. 3.1, é observada a relação de dispersão do grafeno, que segue o comportamento de raiz de q . Conforme o número de onda q aumenta, a sua frequência ω cresce. Para o sistema do grafeno, o ângulo θ de vetor de onda no plano \mathbf{q} em relação ao eixo x é irrelevante, pois ele é isotrópico no plano. A relação de dispersão obtida na figura coincide com a literatura (GONÇALVES; PERES, 2016).

3.1.2 Fósforo negro

O fósforo negro apresenta uma estrutura bidimensional sanfonada, com uma anisotropia no plano do material que pode resultar numa interação entre luz e seus portadores de carga a depender da direção. A forte interação luz-matéria em uma monocamada de fósforo negro acontece na faixa eletromagnética do infravermelho médio, facilitando a sua aplicação em dispositivos fotônicos (VEEN *et al.*, 2019).

A função dielétrica complexa do fósforo negro é dada por:

$$\epsilon_{ij}(\omega) = \epsilon_{ij,\infty} + \frac{i\sigma_{ij}(\omega)}{t\omega\epsilon_0}, \quad (3.3)$$

onde i e j são as direções nos meios anisotrópicos, ϵ_0 e ϵ_∞ são constantes, t é a espessura das multicamadas do fósforo negro, que serão tratados como fósforo negro *bulk* e $\sigma(\omega)$ é dado pela soma das condutividades intrabandas e interbandas, porém essa última componente será desprezada. Para a condutividade intrabanda, usaremos os dados que foram obtidos a partir do experimento utilizando microespectroscopia de infravermelho com transformada de Fourier para medir os espectros de reflexão em temperatura ambiente (BISWAS *et al.*, 2021). A condutividade pode ser escrita como:

$$\sigma_{ij}(\omega) = \delta_{ij} \frac{iD_j}{\pi \left(\omega + \frac{i\eta}{\hbar} \right)}, \quad (3.4)$$

onde δ_{ij} representa o delta de Kronecker, e i e j são as direções nos meios anisotrópicos, η/\hbar é a taxa de relaxamento do modelo de Drude e D_j é dado por:

$$D_j = \pi e^2 \sum_{l=1}^N \frac{n_l}{m_{lj}^*}, \quad (3.5)$$

sendo n_l a concentração de elétrons na banda l e m_{lj}^* a massa efetiva na direção j da banda l (BISWAS *et al.*, 2021). Os parâmetros utilizados foram $t = 2.9$ nm, que é a espessura do filme fino de fósforo negro, $n_l = 7 \times 10^{12}/\text{cm}^2$, $\eta = 2$ meV, $\epsilon_{zz} = 1$, $\epsilon_{xx,\infty} = 12.5$, $\epsilon_{yy,\infty} = 10.2$ e $m_x^* = 0.14m_0$ e $m_y^* = 0.71m_0$ são as massas efetivas na direção x e y , respectivamente, onde m_0 é a massa do elétron. Serão utilizados os mesmos parâmetros ao longo dos resultados. A Fig. 3.2 mostra as partes real e imaginária da função dielétrica.

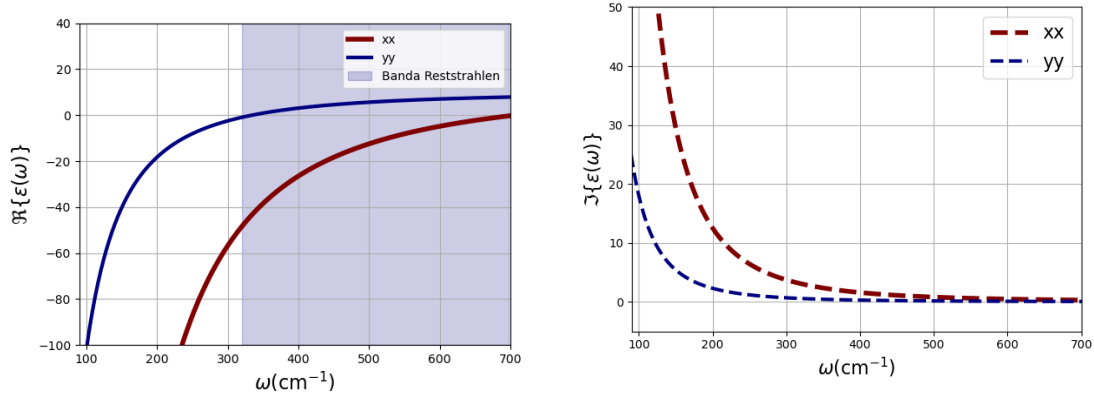


FIGURA 3.2 – À esquerda, temos a parte real e à direita temos a parte imaginária da função dielétrica do fósforo negro. Utilizamos $t = 2.9$ nm, $\eta = 2\text{meV}$, $\epsilon_{zz} = 1$, $\epsilon_{xx,\infty} = 12.5$ e $\epsilon_{yy,\infty} = 10.2$. Parâmetros retirados de (BISWAS *et al.*, 2021)

Podemos observar que a curva azul (na direção yy) cruza o zero entre 300 cm^{-1} e 320 cm^{-1} e a curva vermelha (na direção xx) cruza o zero por volta de 700 cm^{-1} . Portanto, a região entre as frequências de 300 cm^{-1} e 700 cm^{-1} é uma faixa de alta refletividade e forte absorção óptica que será denominada banda de Reststrahlen (STREYER, 2016). Além disso, para baixas frequências, temos que $|\epsilon_{xx}| > \epsilon_{yy}$, tanto na parte real como na imaginária. Para frequências dentro da banda de Reststrahlen, as funções dielétricas nos eixos x e y assumem sinais opostos, caracterizando modos de polaritons hiperbólicos. Já para as frequências fora da banda de Reststrahlen, as funções dielétricas possuem o mesmo sinal, e os modos de polaritons serão elípticos (BISWAS *et al.*, 2021).

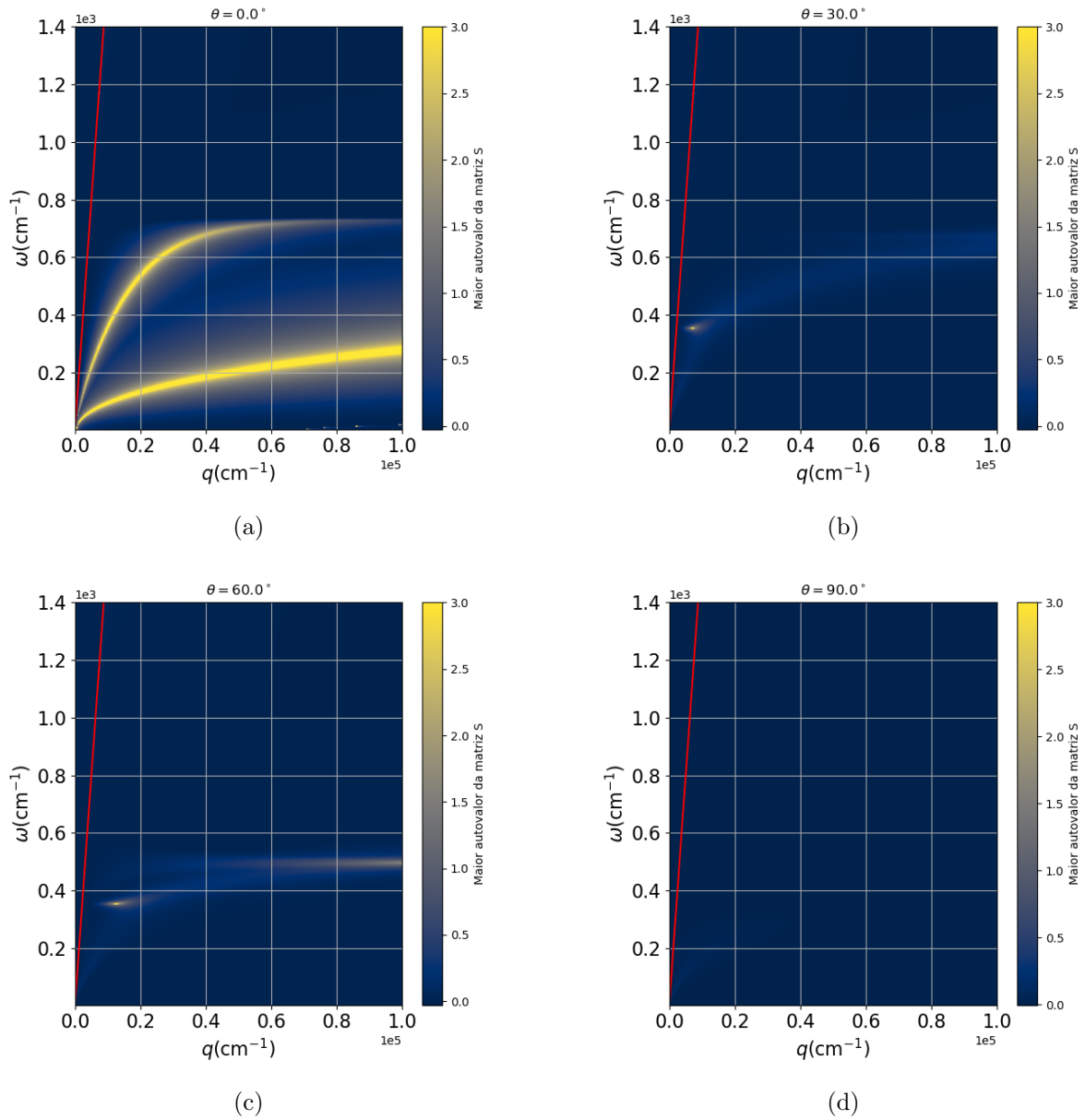


FIGURA 3.3 – Maior autovalor da matriz S para o sistema de ar/fósforo negro/ar em função da frequência e do momento no plano, e direção de propagação no plano dada por (a) $\theta = 0.0^\circ$, (b) $\theta = 30.0^\circ$ (c) $\theta = 60.0^\circ$ e (d) $\theta = 90.0^\circ$. Os parâmetros utilizados: espessura $t = 2.9$ nm, $\eta = 2\text{meV}$. A linha vermelha representa o cone de luz.

Na Fig. 3.3, apresentamos o maior autovalor da matriz S para o sistema ar/fósforo negro/ar em função do número de onda q e da frequência ω para diferentes ângulos do vetor de onda no plano \mathbf{q} em relação ao eixo x , indicados por θ . Vemos na Fig. 3.3a que o fósforo negro apresenta dois modos distintos. O de frequência mais alta está concentrado nas bordas e corresponde aos modos da banda de Reststrahlen, onde $\Re\{\epsilon_{xx}\} > 0$ e $\Re\{\epsilon_{yy}\} < 0$, que apresentam caráter hiperbólico. Já os modos de frequência mais baixa estão concentrados no interior do material, correspondendo a modos TM guiados (ALBUQUERQUE; COTTAM, 2004). Esse comportamento ocorre devido à espessura finita

do fósforo negro, permitindo que ele aja como um guia de onda. Vemos nas Fig. 3.3b-3.3d que, conforme mudamos o ângulo de propagação no plano, os modos desaparecem.

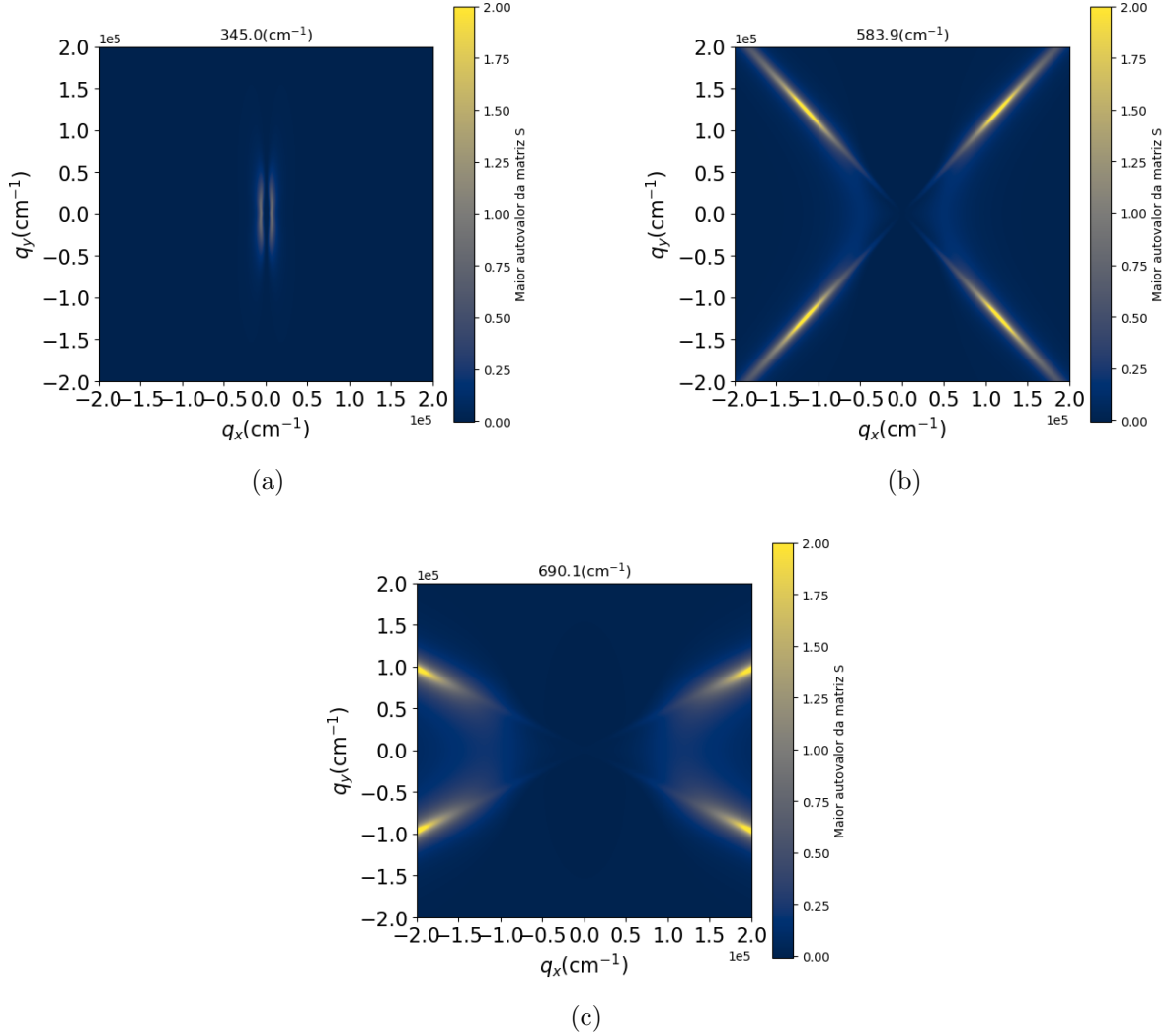


FIGURA 3.4 – Maior autovalor da matriz S para o sistema de ar/fósforo negro/ar nas frequências de (a) 345.0 cm^{-1} , (b) 583.9 cm^{-1} e (c) 690.1 cm^{-1} em função dos números de onda no plano q_x e q_y . Apresentam modos hiperbólicos. Os parâmetros utilizados: espessura $t = 2.9 \text{ nm}$, $\eta = 2 \text{ meV}$.

Mostramos na Fig. 3.4 o maior autovalor da matriz S em função das frequências ω e dos números de onda no plano q_x e q_y . Na Fig. 3.4a nota-se que a relação de dispersão é quase paralela ao eixo y . Isso ocorre porque, na frequência de 345 cm^{-1} , estamos no início da zona de Reststrahlen, visto que a função dielétrica em yy ainda tem uma pequena parte positiva. Analisando as Fig. 3.4b e 3.4c, os modos hiperbólicos podem ser vistos, bem como as tangentes das hipérboles bem destacadas. À medida que a frequência aumenta, o ângulo entre as tangentes das hipérboles e o eixo q_x diminui.

3.1.3 Nitreto de Boro Hexagonal

O hBN possui uma estrutura bidimensional hexagonal, semelhante à do grafeno, e também apresenta anisotropia na direção transversal ao plano do material, como o grafite, por ser um empilhamento de camadas ligadas pela força de van der Waals. A anisotropia do hBN é responsável pela formação de fônons-polaritons hiperbólicos, seguindo a equação que relaciona as permissividades elétricas numa dada frequência, que resulta no seguinte hiperboloide:

$$\epsilon_t^{-1}k_z^2 + \epsilon_z^{-1}(k_x^2 + k_y^2) = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2, \quad (3.6)$$

onde c é a velocidade da luz no vácuo, ϵ_z e $\epsilon_t \equiv \epsilon_x = \epsilon_y$ são as permissividades axial e tangencial, respectivamente. Como as permissividades elétricas do hBN também dependem da frequência da onda que incide no material, seguindo a Eq. (3.7), nem todas as frequências permitem a propagação de polaritons hiperbólicos. Na direção paralela ao plano do material, as constantes utilizadas para calcular a permissividade valem $\omega_{TO} = 780 \text{ cm}^{-1}$ e $\omega_{LO} = 830 \text{ cm}^{-1}$, já na direção perpendicular ao plano do material, as constantes valem $\omega_{TO} = 1360 \text{ cm}^{-1}$ e $\omega_{LO} = 1610 \text{ cm}^{-1}$ (HAJIAN *et al.*, 2020).

$$\epsilon_m = \epsilon_{\infty,m} + \epsilon_{\infty,m} \times \frac{(\omega_{LO,m})^2 - (\omega_{TO,m})^2}{(\omega_{TO,m})^2 - \omega^2 - i\omega\Gamma_m}, \quad (3.7)$$

em que $m = t, z$ e os outros parâmetros valem $\epsilon_{\infty,t} = 4.87$, $\epsilon_{\infty,z} = 2.95$, $\Gamma_t = 5 \text{ cm}^{-1}$ e $\Gamma_z = 4 \text{ cm}^{-1}$, para o sistema ar/hBN/ar, a espessura do hBN é $t = 30 \text{ nm}$. Os parâmetros do hBN serão os mesmos nas demais combinações. Com isso, modos de polaritons hiperbólicos podem ser observados nas faixas de frequência especificadas na Fig. 1.5. A hiperbolicidade ocorre na direção axial do material, como pode ser observado mais claramente na Fig. 3.5, que mostra a dispersão dos polaritons do hBN, enfatizando a direção z , perpendicular ao plano do material. A hiperbolicidade do hBN pode ser verificada ao longo do eixo z do material, o que faz com que a espessura do hBN influencie nas características dos modos de fônons-polaritons de superfície (HAJIAN *et al.*, 2017).

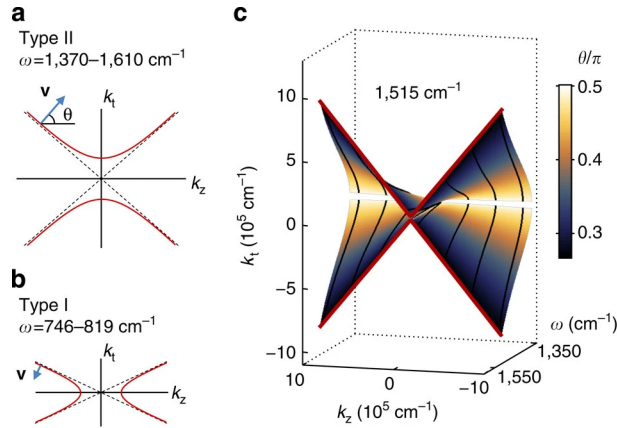


FIGURA 3.5 – **Dispersão hiperbólica do hBN.** (a) Um esquema das curvas de isofrequência para um meio hiperbólico do tipo II, que é realizado na faixa de parada superior do hBN. A seta indica a velocidade de grupo do polariton. (b) Um esquema semelhante para o caso do tipo I, que é realizado na faixa de parada inferior do hBN. (c) A superfície de dispersão calculada dos polaritons de hBN. Os eixos são o momento tangencial (k_t), o momento axial (k_z) e a frequência (ω), variando de 1.370 a 1.515 cm^{-1} . A cor representa o ângulo de propagação. O corte de frequência constante $\omega = 1.515, \text{cm}^{-1}$ é mostrado pela linha vermelha, para enfatizar a similaridade com (a) (DAI *et al.*, 2015).

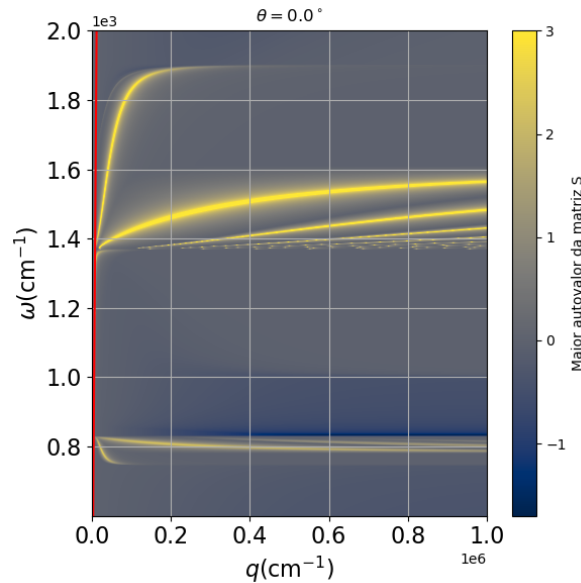


FIGURA 3.6 – Maior autovalor da matriz S para o sistema ar/hBN/ar em função da frequência e do momento no plano, e direção de propagação no plano dada por $\theta = 0.0^\circ$. A espessura do hBN $t = 30$ nm. A linha vermelha representa o cone de luz.

Na Fig. 3.6 mostramos o maior autovalor da matriz S em função da frequência ω e dos números de onda q para o sistema ar/hBN/ar na direção de propagação no plano $\theta = 0^\circ$. É possível notar na Fig. 3.6 dois modos distintos na banda superior de Reststrahlen: um deles está confinado à superfície e possui maior frequência, e o outro modo é um modo na faixa entre 1370cm^{-1} e 1610cm^{-1} , que está no interior do hBN. O mesmo acontece para a banda inferior de Reststrahlen, porém, com os modos invertidos, temos os modos de menor frequência confinados na superfície e os modos no interior. Portanto, a existência de

fônnon-polaritons de superfície se limita às faixas de frequência das bandas de Reststrahlen superior e inferior do hBN conforme discutido na literatura (GEICK *et al.*, 1966; MA *et al.*, 2024).

3.2 Grafeno/hBN

O empilhamento de camadas de diferentes materiais cria a oportunidade de contornar limitações apresentadas pelas monocamadas dos materiais constituintes. O hBN, individualmente, apresenta apenas fônnon-polaritons hiperbólicos limitados às faixas de frequência das suas bandas de Reststrahlen. Já o grafeno apresenta plasmon-polaritons numa faixa mais ampla de frequências. A junção dos dois numa estrutura multicamadas complementa suas propriedades, possibilitando a propagação de polaritons com baixas perdas ôhmicas e com largos vetores de onda (HAJIAN *et al.*, 2017). Apresentamos o maior autovalor da matriz S para a heteroestrutura de ar/grafeno/hBN/ar em função da frequência ω e do momento no plano q na Fig. 3.7. A heteroestrutura consiste em uma camada de grafeno com 0.4 nm de espessura e o hBN com espessura de 30 nm. As funções dielétricas usadas foram as mesmas das subseções anteriores.

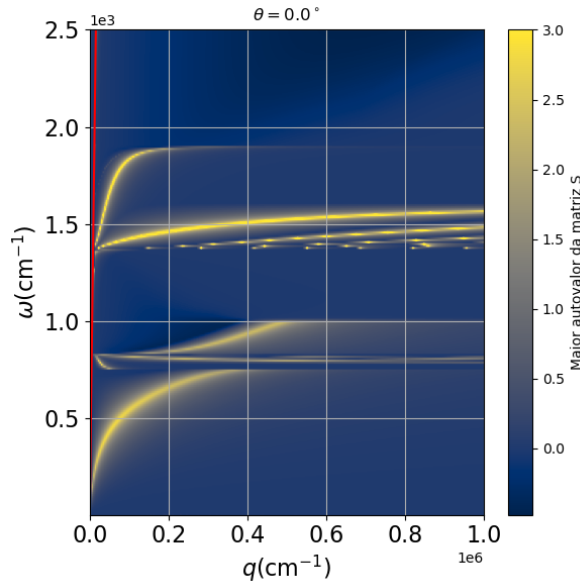


FIGURA 3.7 – Maior autovalor da matriz S para a heteroestrutura de ar/grafeno/hBN/ar em função da frequência e do momento no plano, e direção de propagação no plano dada por $\theta = 0.0^\circ$. A camada do grafeno possui espessura de 0.4 nm, $E_F = 0.3$ eV e $\hbar\gamma = 4.0$ meV, hBN possui espessura de 30 nm. A linha vermelha representa o cone de luz.

Observando a Fig. 3.7 é possível notar que os modos de dispersão do hBN na banda inferior de Reststrahlen não cruzam os modos do grafeno, indicando, então, que há modos híbridos de plasmon-fônnon polaritons. Pode-se observar que os modos do grafeno cessam até a frequência 1.0×10^3 cm^{-1} , pois o hBN possui uma alta função dielétrica.

Além disso, na Fig. 3.1 o grafeno cruza na frequência de $0.6 \times 10^3 \text{ cm}^{-1}$ no momento no plano $0.4 \times 10^5 \text{ cm}^{-1}$ que se comparado a Fig. 3.7, observa-se que, nesse mesmo momento no plano o grafeno cruza na frequência de $0.75 \times 10^3 \text{ cm}^{-1}$, portanto, nota-se que o hBN altera a dispersão do grafeno. Não é observada alteração do grafeno nos modos do hBN na banda superior de Reststrahlen.

3.3 Fósforo negro/hBN

Tanto o hBN como o fósforo negro apresentam modos de polaritons hiperbólicos devido à sua anisotropia, porém, enquanto o hBN possui anisotropia fora do plano, o fósforo negro possui anisotropia no plano. O empilhamento de ambos os materiais suporta modos hibridizados de plasmon-fônnon polaritons que também apresentarão caráter hiperbólico. O empilhamento é composto por uma heteroestrutura de ar/fósforo negro/hBN/ar, tendo o fósforo negro uma espessura de 2.9 nm e hBN uma espessura de 30 nm. Serão consideradas as mesmas funções dielétricas das seções anteriores.

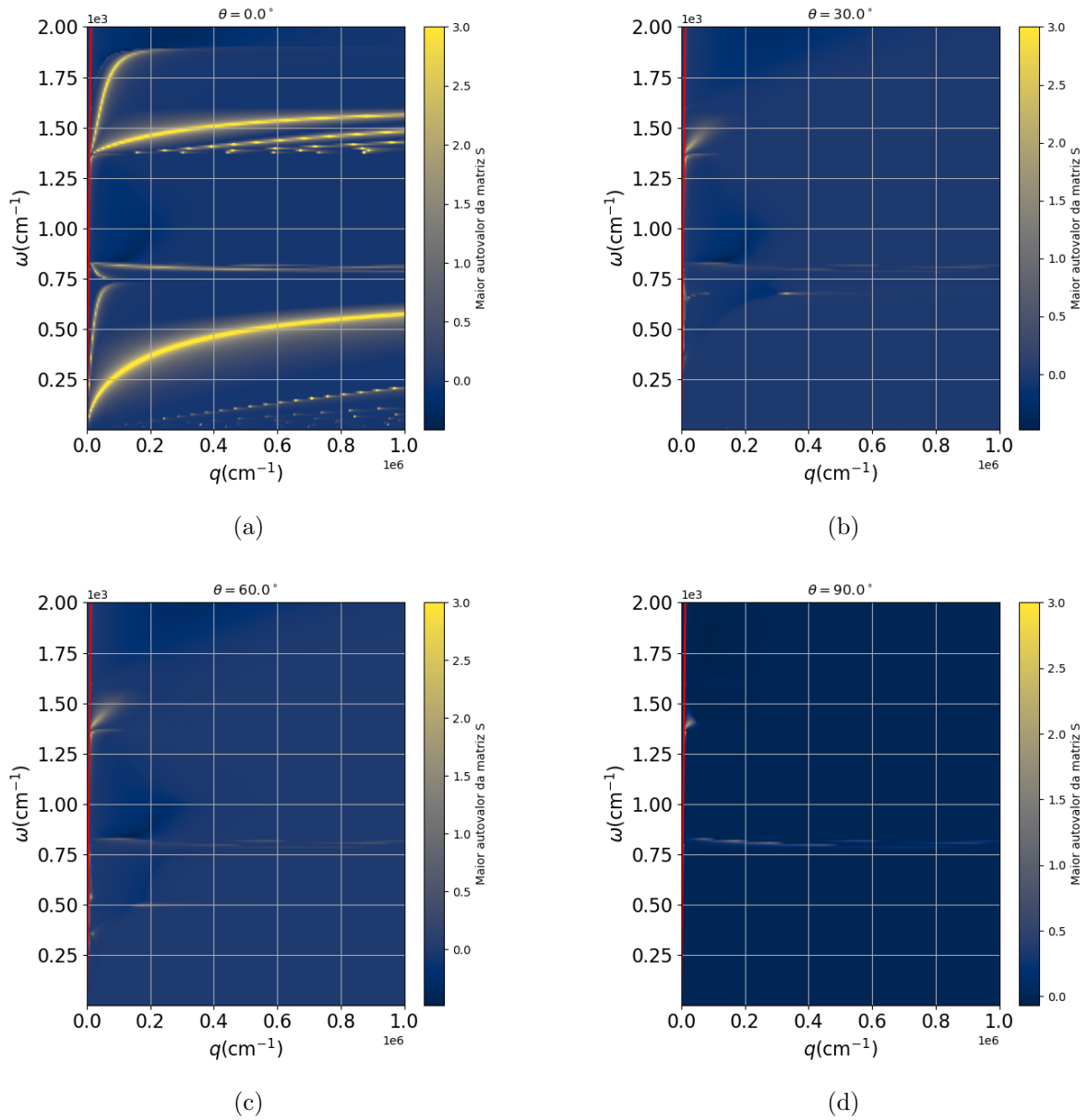


FIGURA 3.8 – Maior autovalor da matriz S para a heteroestrutura de ar/fósforo negro/hBN/ar em função da frequência ω e do momento no plano, e direção de propagação no plano dada por (a) $\theta = 0.0^\circ$ (b) $\theta = 30.0^\circ$, (c) $\theta = 60.0^\circ$ e (d) $\theta = 90.0^\circ$. O fósforo negro possui uma espessura de $t = 2.9$ nm, $\eta = 2\text{meV}$, o hBN possui espessura $t = 30$ nm. A linha vermelha representa o cone de luz.

A Fig. 3.8 mostra o maior autovalor da matriz S para a heteroestrutura ar/fósforo negro/hBN/ar em função da frequência ω e do número de onda q em diferentes direções de propagação no plano θ . Na Fig. 3.8a, é possível notar os dois modos correspondentes ao fósforo negro (veja a Fig. 3.3a) o modo associado à superfície híbrida com os modos da banda inferior de Reststrahlen do hBN, enquanto o modo que corresponde ao modo guiado no fósforo negro não sofre hibridização. Da mesma forma, como foi visto na Fig. 3.7, para as frequências equivalentes à banda de Reststrahlen superior do hBN, observa-se pouca influência do fósforo negro nos modos. É interessante notar que nas Fig. 3.8b-

3.8d, o hBN não suporta modos de superfície para grandes números de onda, apenas para baixos números de onda.

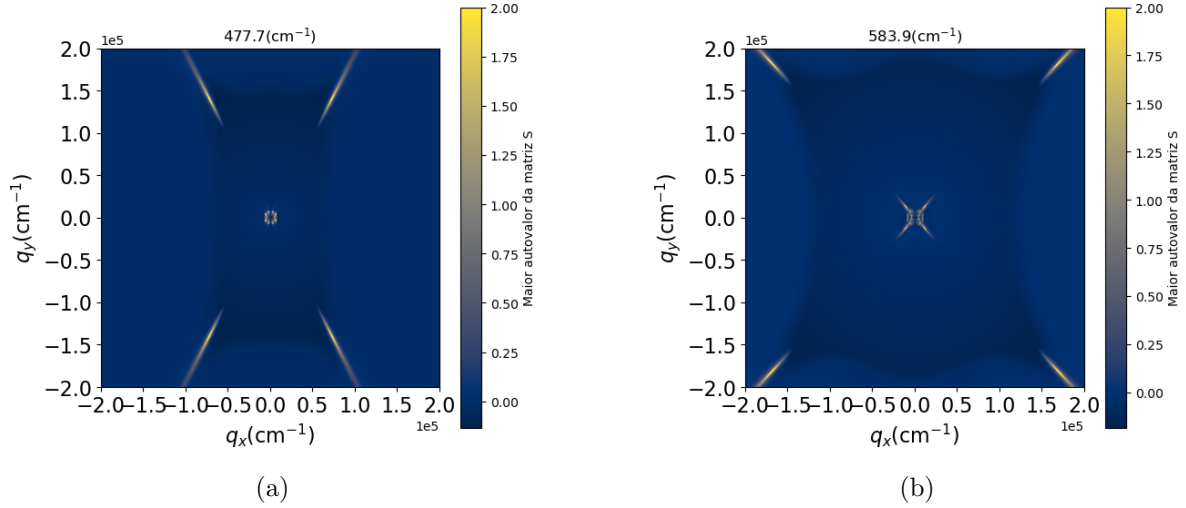


FIGURA 3.9 – Maior autovalor da matriz S para a heteroestrutura de ar/fósforo negro/hBN/ar a uma frequência de 477.7 cm^{-1} (esquerda) e 583.9 cm^{-1} (direita) em função dos números de onda no plano q_x e q_y . Os parâmetros utilizados: para o fósforo negro com espessura de $t = 2.9 \text{ nm}$, $\eta = 2 \text{ meV}$, o hBN possui espessura $t = 30 \text{ nm}$.

Apresentamos na Fig. 3.9 o maior autovalor da matriz S em função das frequências $\omega = 477.7 \text{ cm}^{-1}$ e $\omega = 583.9 \text{ cm}^{-1}$ pelos números de onda no plano q_x e q_y . Analisando a Fig. 3.9a para $\omega = 477.7 \text{ cm}^{-1}$, observam-se dois modos menos intensos, que se dividem em duas retas, separados por um ângulo próximo. Em comparação com o fósforo negro (veja a Fig. 3.4b), onde há apenas uma reta, isso sugere uma possível influência dos modos do hBN. Observa-se também que os modos aparecem em determinados comprimentos de onda e desaparecem em outros. Da mesma forma acontece na Fig. 3.9b para $\omega = 583.9 \text{ cm}^{-1}$, observamos modos em determinados comprimentos de onda.

3.4 Grafeno/Fósforo negro

O empilhamento de grafeno com o fósforo negro apresenta uma hibridização dos modos de plasmon-polaritons de cada um dos materiais. A heteroestrutura estudada será composta de ar/grafeno/fósforo negro/ar, tendo o fósforo negro uma espessura de 2.9 nm e o grafeno uma monocamada com 0.4 nm de espessura. A função dielétrica de cada material é a mesma utilizada nos resultados anteriores.

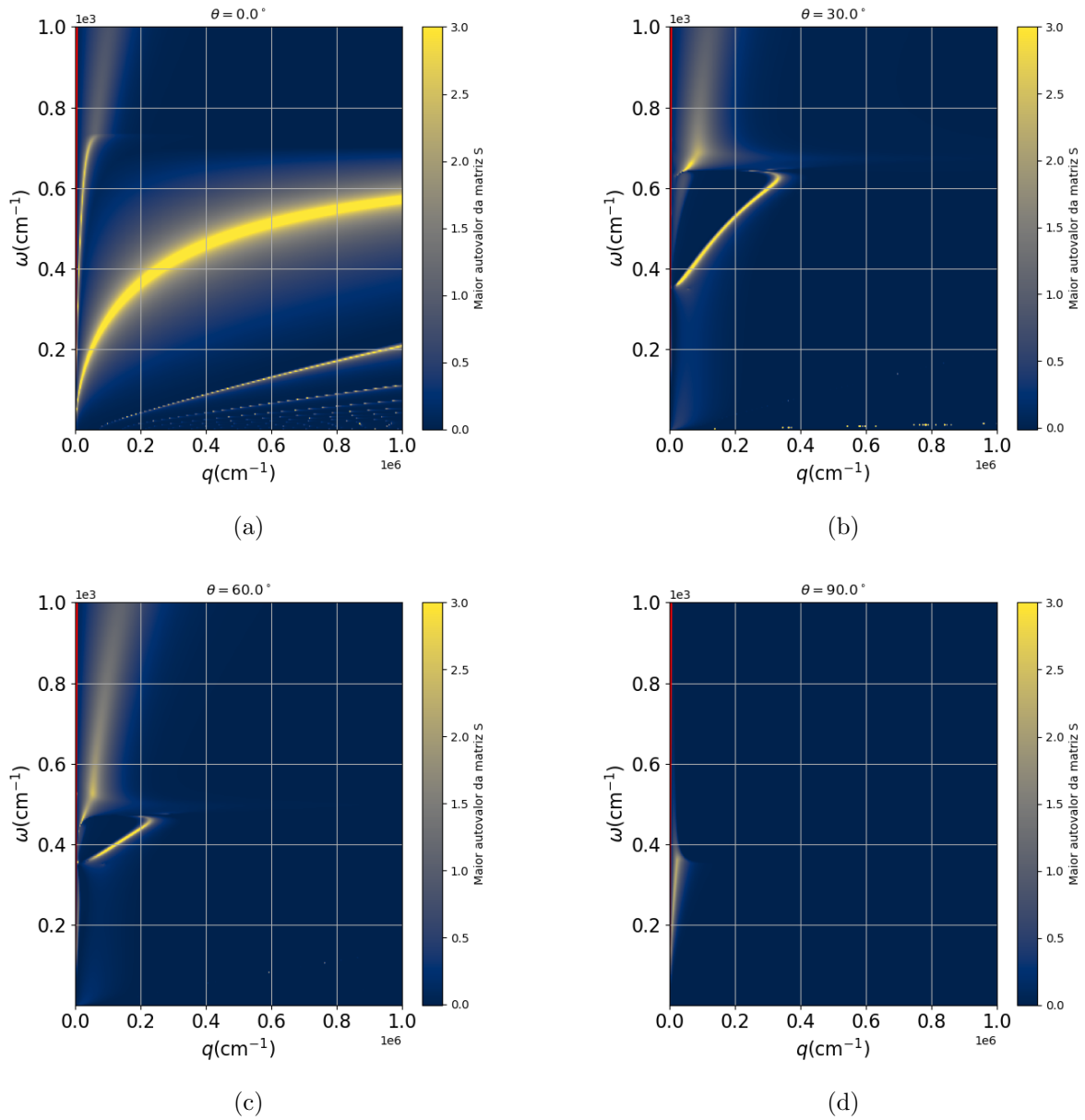


FIGURA 3.10 – Maior autovalor da matriz S para a heteroestrutura de ar/grafeno/fósforo negro/ar em função da frequência e do momento no plano, e direção de propagação no plano dada por (a) $\theta = 0.0^\circ$ (b) $\theta = 30.0^\circ$, (c) $\theta = 60.0^\circ$ e (d) $\theta = 90.0^\circ$. Os parâmetros utilizados para o grafeno: $E_F = 0.3\text{eV}$, $\hbar\gamma = 4.0\text{meV}$. Os parâmetros para o fósforo negro: espessura $t = 2.9\text{nm}$, $\eta = 2\text{meV}$. A linha vermelha representa o cone de luz.

A Fig. 3.10 mostra o maior autovalor da matriz S para a heteroestrutura ar/grafeno/fósforo negro/ar em função da frequência ω e do número de onda q em diferentes direções de propagação no plano θ . O resultado da Fig. 3.10a mostra que para modos de plasmon próximos, formam-se dois modos: um que é quase linear, chamado de modo óptico, e o modo acústico, que pode ser visto na figura como a curva de cor mais intensa. Vemos na Fig. 3.10b, na direção de propagação no plano correspondente ao ângulo de 30° , os modos híbridos para baixos números de onda. Nas Fig. 3.10c e 3.10d, é possível observar que a combinação suporta modos de plasmon-polaritons, também para pequenos

comprimentos de onda.

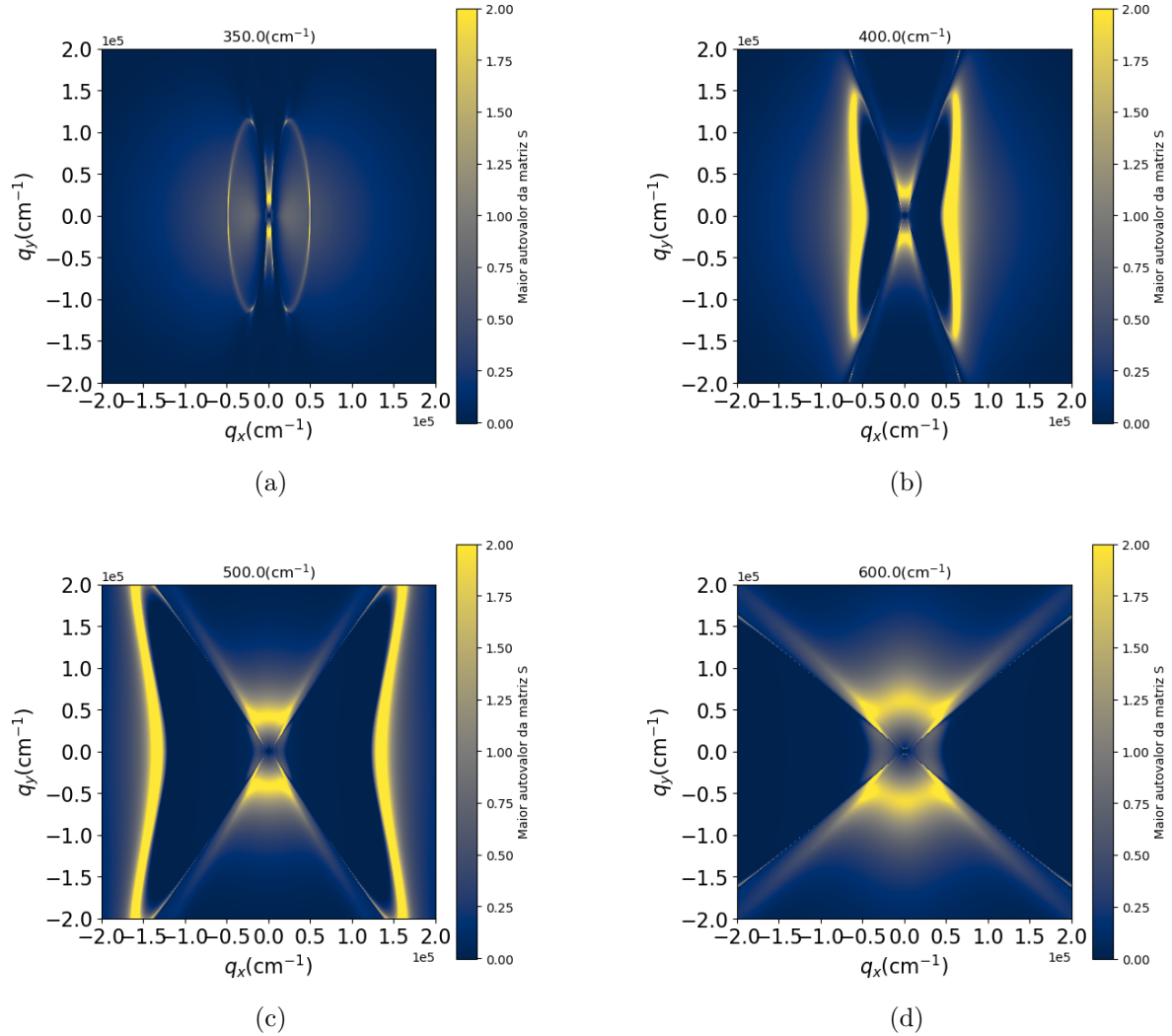


FIGURA 3.11 – Maior autovalor da matriz S para a heteroestrutura de ar/grafeno/fósforo negro/ar a uma frequência de (a) 350.0 cm^{-1} , (b) 400.0 cm^{-1} (c) 500 cm^{-1} e (d) 600 cm^{-1} em função dos números de onda no plano q_x e q_y . Os parâmetros utilizados para o grafeno: $E_F = 0.3\text{eV}$, $\hbar\gamma = 4.0\text{meV}$. Os parâmetros para o fósforo negro: espessura $t = 2.9\text{nm}$, $\eta = 2\text{meV}$.

Apresentamos na Fig. 3.11 o maior autovalor da matriz S em função de diferentes frequências ω e dos números de onda q_x e q_y para heteroestrutura ar/grafeno/fósforo negro/ar. Na Fig. 3.11a para $\omega = 350 \text{ cm}^{-1}$ observa-se a presença de dois modos na região de 0.0 a $0.5 \times 10^5 \text{ cm}^{-1}$ em q_x , considerando o ângulo de direção de propagação no plano igual a zero. O mesmo acontece na Fig. 3.11b para $\omega = 400 \text{ cm}^{-1}$ é possível notar dois modos, um mais intenso e outro menos intenso ao centro, os modos de propagação na Fig. 3.11b são semelhantes a uma borboleta. Analisando a Fig. 3.11c existem três modos para $\omega = 500 \text{ cm}^{-1}$ que podem indicar a hibridização do grafeno e o fósforo negro. Agora, na Fig. 3.11d para $\omega = 600 \text{ cm}^{-1}$ há dois modos de plasmon-polaritons de superfície.

3.5 Grafeno/hBN/Fósforo negro

Nessa seção estudaremos a heteroestrutura de ar/grafeno/hBN/fósforo negro/ar, tendo a monocamada de grafeno uma espessura de 0.4 nm, o fósforo negro uma espessura de 2.9 nm e o hBN uma espessura de 30 nm. Utilizaremos a mesma função dielétrica das seções anteriores, considerando que a função dielétrica do grafeno fora do plano é igual a 1. O grafeno e o hBN apresentam anisotropia fora do plano, e o fósforo negro exibe anisotropia no plano. O estudo de polaritons de superfície na combinação entre os três materiais não foi ainda relatado na literatura.

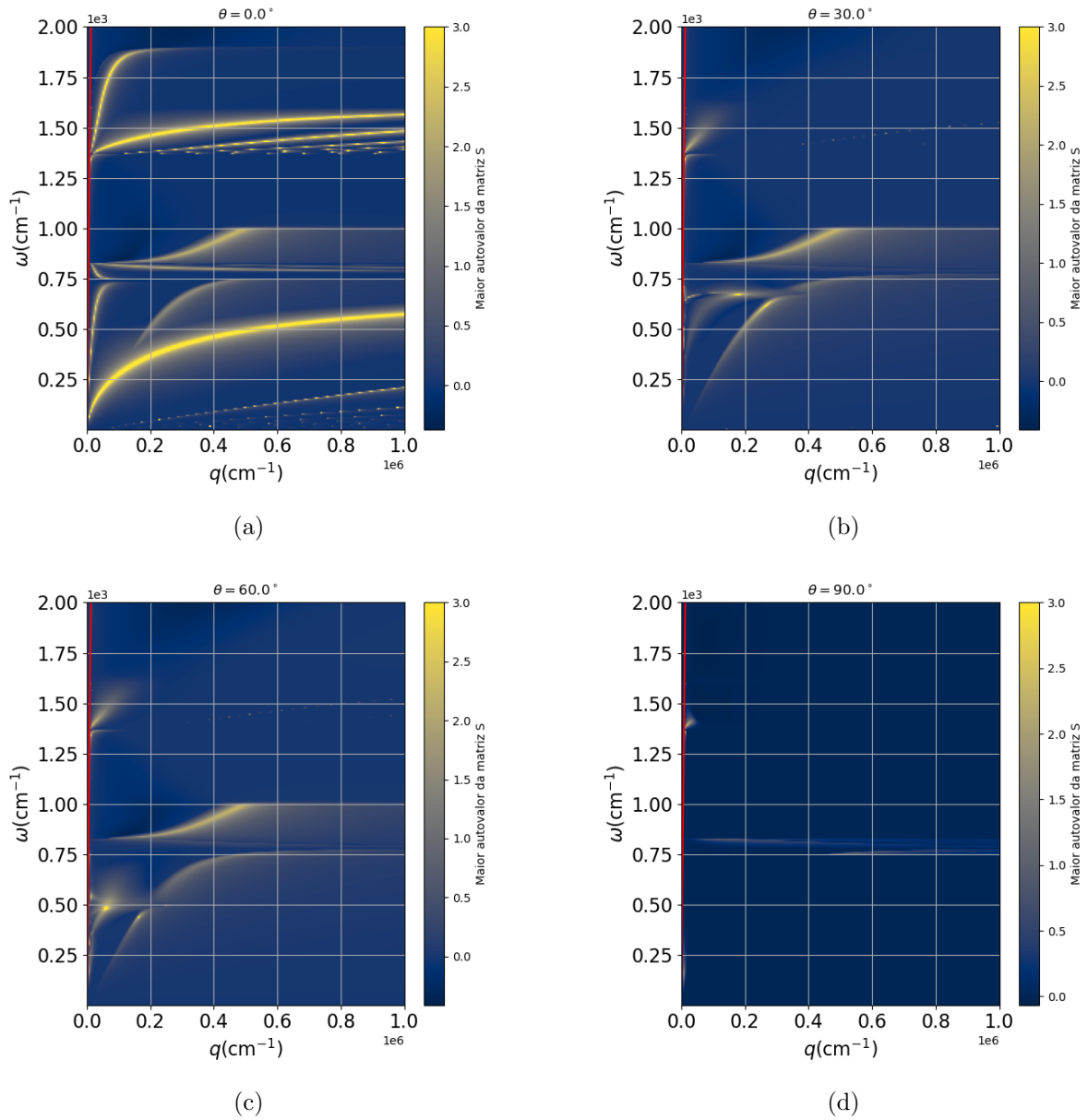


FIGURA 3.12 – Maior autovalor da matriz S para a heteroestrutura de ar/grafeno/hBN/fósforo negro/ar em função da frequência ω e do momento no plano, e direção de propagação no plano dada por (a) $\theta = 0.0^\circ$ (b) $\theta = 30.0^\circ$, (c) $\theta = 60.0^\circ$ e (d) $\theta = 90.0^\circ$. Os parâmetros utilizados para o grafeno: espessura $d = 0.4\text{nm}$ $E_F = 0.3\text{eV}$, $\hbar\gamma = 4\text{meV}$. Os parâmetros utilizados para o fósforo negro: espessura $t = 2.9\text{nm}$, $\eta = 2\text{meV}$. O hBN possui espessura $t = 30\text{nm}$. A linha vermelha representa o cone de luz.

A Fig. 3.12 mostra o maior autovalor da matriz S para heteroestrutura de ar/grafeno/hBN/fósforo negro/ar em função da frequência ω e do número de onda q em diferentes direções de propagação no plano θ . É possível observar na Fig.3.12a, comparado com a hibridização dois a dois, há hibridização dos modos do grafeno/fósforo negro (veja a Fig. 3.10a) com os modos da banda inferior de Reststrahlen do hBN. Para os parâmetros usados, não foi observado, para nenhum dos casos, a hibridização com a banda superior de Reststrahlen do hBN. Nota-se que na Fig.3.12b os modos na direção de propagação no plano para $\theta = 30^\circ$ a hibridização acontece abaixo da faixa de Reststrahlen, em vez de na

frequência dos fônons. Já nas Fig. 3.12c e 3.12d, podemos observar que, para as demais direções, os modos desaparecem.

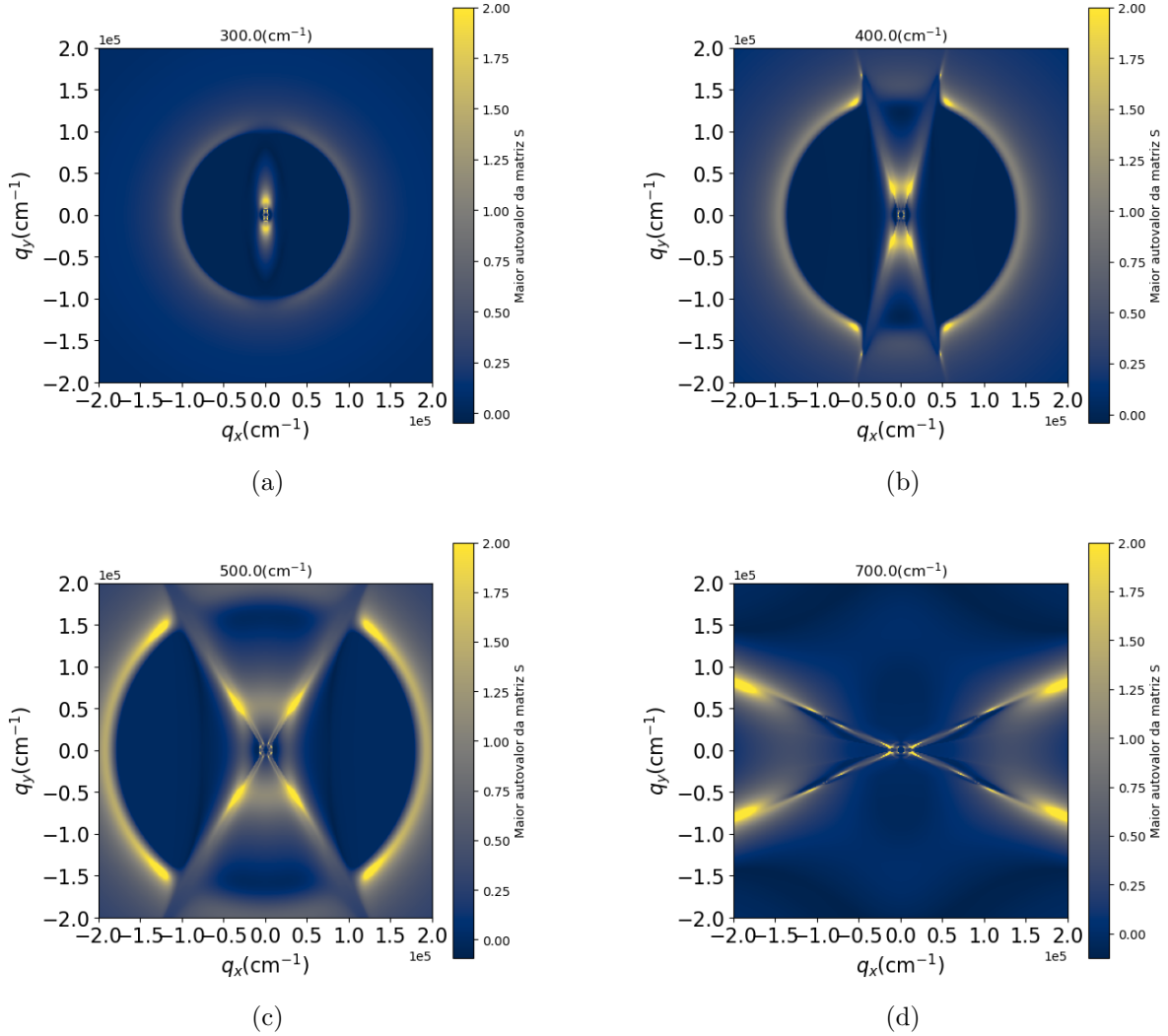


FIGURA 3.13 – Maior autovalor da matriz S para a heteroestrutura de ar/grafeno/hBN/fósforo negro/ar a uma frequência de (a) 300.0 cm^{-1} , (b) 400.0 cm^{-1} (c) 500 cm^{-1} e (d) 700 cm^{-1} em função dos números de onda no plano q_x e q_y . Os parâmetros utilizados para o grafeno: espessura $d = 0.4 \text{ nm}$, $E_F = 0.3 \text{ eV}$, $\hbar\gamma = 4 \text{ meV}$. Os parâmetros utilizados para o fósforo negro: espessura $t = 2.9 \text{ nm}$, $\eta = 2 \text{ meV}$. O hBN possui espessura $t = 30 \text{ nm}$.

Apresentamos na Fig. 3.13 o maior autovalor da matriz S em função de diferentes frequências ω pelos números de ondas no plano q_x q_y . Na Fig. 3.13a para $\omega = 300 \text{ cm}^{-1}$ e na Fig. 3.13b $\omega = 400 \text{ cm}^{-1}$ podemos observar dois modos propagantes quando comparados com a direção de propagação no plano correspondente ao ângulo de 0.0° . Agora, analisando a Fig. 3.13c para $\omega = 500 \text{ cm}^{-1}$ observa-se que os modos se dividem em duas retas separadas por um ângulo próximo onde há propagação, assim como observado na hibridização fósforo negro/hBN (veja a Fig. 3.9a). Além disso, essas duas retas se unem em um único modo mais intenso. Vemos na Fig. 3.13d $\omega = 700 \text{ cm}^{-1}$ se comparado com a direção de propagação de $\theta = 30^\circ$ (veja a Fig. 3.12b) a região dos modos mais

intensos. Portanto, a heteroestrutura composta por grafeno/hBN/fósforo negro é capaz de suportar modos hibridizados de plasmon-fônons polaritons.

4 Conclusão

Neste trabalho, investigamos alguns tipos de polaritons em materiais bidimensionais anisotrópicos, como grafeno, fósforo negro e nitreto de boro hexagonal (hBN), analisando suas propriedades eletromagnéticas. Com o auxílio do Polaripy, diversos materiais bidimensionais conhecidos na literatura foram estudados a partir da resposta eletromagnética de um feixe incidente polarizado, obtendo-se a curva de dispersão dos modos dos diversos tipos de polaritons nos materiais por meio do cálculo do maior autovalor da matriz de espalhamento.

Foram verificadas propriedades previstas para os materiais, como as bandas de Reststrahlen no hBN, seus modos hiperbólicos de propagação, os efeitos da anisotropia do fósforo negro, que resultam em modos hiperbólicos de propagação e a alta condutividade plasmônica do grafeno. Além disso, foram vistas as propriedades da interação entre os modos de polaritons dos materiais estudados a partir de seu empilhamento dois a dois. Em geral, a dispersão dos modos polaritônicos em cada faixa de frequência distinta foi preservada, com a adição da junção de alguns dos modos fundamentais de propagação. Por fim, foi testada a heteroestrutura de grafeno, hBN e fósforo negro. Observou-se a existência de modos triplos hibridizados de plasmons-fônons polaritons.

Desse modo, verificamos que a hibridização de diferentes tipos de polaritons pode gerar novos modos de superfície com propriedades ópticas únicas que podem contribuir para o avanço nos estudos de materiais bidimensionais aplicados à fotônica. Pesquisas futuras podem explorar aplicações práticas desses modos híbridos em sensores, guias de onda e tecnologias de comunicação óptica.

Referências

ALBUQUERQUE, E. L.; COTTAM, M. G. **Polaritons in periodic and quasiperiodic structures**. [S.l.]: Elsevier, 2004.

ANDRADE-NETO, A. V.; NETO, A. R.; JORIO, A. Relação de dispersão para os plásmon-polárítos de superfície em uma interface plana metal/dielétrico. **Revista Brasileira de Ensino de Física**, Sociedade Brasileira de Física, v. 39, n. 3, p. e3310, 2017. ISSN 1806-1117. Available at: <https://doi.org/10.1590/1806-9126-RBEF-2016-0267>.

BARCELOS, I. D. **Estudo de propriedades estruturais e óticas de heteroestruturas formadas com materiais bidimensionais**. Thesis (Doutorado) — Universidade Federal de Minas Gerais, 2015.

BASOV, D. N.; FOGLER, M. M.; ABAJO, F. J. G. de. Polaritons in van der waals materials. **Science**, v. 354, n. 6309, p. aag1992, 2016. Available at: <https://www.science.org/doi/abs/10.1126/science.aag1992>.

BISWAS, S.; WHITNEY, W. S.; GRAJOWER, M. Y.; WATANABE, K.; TANIGUCHI, T.; BECHTEL, H. A.; ROSSMAN, G. R.; ATWATER, H. A. Tunable intraband optical conductivity and polarization-dependent epsilon-near-zero behavior in black phosphorus. **Science advances**, American Association for the Advancement of Science, v. 7, n. 2, p. eabd4623, 2021.

BLOCH, F. Zur theorie des ferromagnetismus. **Zeitschrift für Physik**, Springer, v. 61, n. 3, p. 206–219, 1930.

BLUDOV, Y. V.; FERREIRA, A.; PERES, N. M.; VASILEVSKIY, M. I. A primer on surface plasmon-polaritons in graphene. **International Journal of Modern Physics B**, World Scientific, v. 27, n. 10, p. 1341001, 2013.

BOMFIM, G. C. **Imagem feita pelo aluno de iniciação científica**. 2024.

BUTT, M.; KHONINA, S.; KAZANSKIY, N. Recent advances in photonic crystal optical devices: A review. **Optics Laser Technology**, v. 142, p. 107265, 2021. ISSN 0030-3992. Available at: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0030399221003534>.

CALDWELL, J. D.; AHARONOVICH, I.; CASSABOIS, G.; EDGAR, J. H.; GIL, B.; BASOV, D. N. Photonics with hexagonal boron nitride. **Nature Reviews. Materials**, v. 4, n. 8, 7 2019. ISSN 2058-8437. Available at: <https://www.osti.gov/biblio/1612881>.

CHAVES, A. J. C. **Photonics of Graphene and Other Two-Dimensional Materials Heterostructures**. Thesis (Doutorado) — Universidade do Minho (Portugal), 2018.

DAI, S.; MA, Q.; ANDERSEN, T.; MCLEOD, A.; FEI, Z.; LIU, M.; WAGNER, M.; WATANABE, K.; TANIGUCHI, T.; THIEMENS, M. *et al.* Subdiffractive focusing and guiding of polaritonic rays in a natural hyperbolic material. **Nature communications**, Nature Publishing Group UK London, v. 6, n. 1, p. 6963, 2015.

DANTAS, L. Q.; VASCONCELOS, M. S.; ANSELMO, D. H. A. L.; COTTAM, M. G. Surface magnon-polaritons at a dielectric/graphene/gyromagnetic interface in a perpendicular applied magnetic field. **Journal of Physics: Condensed Matter**, IOP Publishing, v. 35, n. 37, p. 375801, jun 2023. Available at: <https://dx.doi.org/10.1088/1361-648X/acdc77>.

DINIZ, L. O.; BORGES, B.-H. V. **Modelagem de dispositivos ópticos em escala nanométrica**. Dissertation (Mestrado) — Universidade de São Paulo, 2010.

EPSTEIN, I.; CHAVES, A. J.; RHODES, D. A.; FRANK, B.; WATANABE, K.; TANIGUCHI, T.; GIESSEN, H.; HONE, J. C.; PERES, N. M. R.; KOPPENS, F. H. L. Highly confined in-plane propagating exciton-polaritons on monolayer semiconductors. **2D Materials**, IOP Publishing, v. 7, n. 3, p. 035031, jun 2020. Available at: <https://dx.doi.org/10.1088/2053-1583/ab8dd4>.

FERREIRA, F.; CHAVES, A. J.; PERES, N. M. R.; RIBEIRO, R. M. Excitons in hexagonal boron nitride single-layer: a new platform for polaritonics in the ultraviolet. **J. Opt. Soc. Am. B**, Optica Publishing Group, v. 36, n. 3, p. 674–683, Mar 2019. Available at: <https://opg.optica.org/josab/abstract.cfm?URI=josab-36-3-674>.

GEICK, R.; PERRY, C. H.; RUPPRECHT, G. Normal modes in hexagonal boron nitride. **Physical Review**, American Physical Society, v. 146, n. 2, p. 543–547, 1966. Available at: <https://doi.org/10.1103/PhysRev.146.543>.

GEIM, A. K.; GRIGORIEVA, I. V. Van der waals heterostructures. **Nature**, Nature Publishing Group UK London, v. 499, n. 7459, p. 419–425, 2013.

GONÇALVES, P. A. D.; PERES, N. M. **An introduction to graphene plasmonics**. [S.l.]: World Scientific, 2016.

GUPTA, B. D.; VERMA, R.; SRIVASTAVA, S. K. **Fiber optic sensors based on plasmonics**. [S.l.]: World Scientific, 2015.

HA, D. T.; THUY, D. T.; HOA, V. T.; VAN, T. T. T.; VIET, N. A. On the theory of three types of polaritons (phonon, exciton and plasmon polaritons). *In*: IOP PUBLISHING. **Journal of Physics: Conference Series. Proceedings** [...]. [S.l.: s.n.], 2017. v. 865, n. 1, p. 012007.

HAJIAN, H.; GHOBADI, A.; DERESHGI, S. A.; BUTUN, B.; OZBAY, E. Hybrid plasmon-phonon polariton bands in graphene-hexagonal boron nitride metamaterials [invited]. **Journal of the Optical Society of America B**, Optical Society of America, v. 34, n. 4, p. D29–D36, 2017. Available at: <https://doi.org/10.1364/JOSAB.34.000D29>.

- HAIJIAN, H.; RUKHLENKO, I. D.; HANSON, G. W.; LOW, T.; BUTUN, B.; OZBAY, E. Tunable plasmon-phonon polaritons in anisotropic 2d materials on hexagonal boron nitride. **Nanophotonics**, De Gruyter, v. 9, n. 12, p. 3909–3920, 2020.
- HOPFIELD, J. J. Theory of the contribution of excitons to the complex dielectric constant of crystals. **Phys. Rev.**, American Physical Society, v. 112, p. 1555–1567, Dec 1958. Available at: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.112.1555>.
- HUANG, K. Lattice vibrations and optical waves in ionic crystals. **Nature**, v. 167, n. 4254, p. 779–780, 1951.
- IQBAL, T. Propagation length of surface plasmon polaritons excited by a 1d plasmonic grating. **Current Applied Physics**, Elsevier, v. 15, n. 11, p. 1445–1452, received: 19 May 2015; Revised: 9 August 2015; Accepted: 17 August 2015; Available online: 25 August 2015, 2015.
- JÚNIOR, J. H. d. S. **Fenômenos de spintrônica e magnônica em materiais magnéticos**. Thesis (Doutorado) — Universidade Federal de Pernambuco, 2018.
- KITTEL, C. **Introduction to Solid State Physics**. 8. ed. [*S.l.*]: Wiley, 2004.
- KO, D. Y. K.; SAMBLES, J. Scattering matrix method for propagation of radiation in stratified media: attenuated total reflection studies of liquid crystals. **Journal of the Optical Society of America A**, Optical Society of America, v. 5, n. 11, p. 1863–1866, 1988.
- KRUGLYAK, V. V.; DEMOKRITOV, S. O.; GRUNDLER, D. Magnonics. **Journal of Physics D: Applied Physics**, v. 43, n. 26, p. 264001, jun 2010. Available at: <https://dx.doi.org/10.1088/0022-3727/43/26/264001>.
- KUMAR, A.; LOW, T.; FUNG, K. H.; AVOURIS, P.; FANG, N. X. Tunable light-matter interaction and the role of hyperbolicity in graphene-hbn system. **Nano Letters**, v. 15, n. 5, p. 3172–3180, pMID: 25897983, 2015. Available at: <https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.5b01191>.
- LIU, X.; GALFSKY, T.; SUN, Z.; XIA, F.; LIN, E.-c.; LEE, Y.-H.; KÉNA-COHEN, S.; MENON, V. M. Strong light-matter coupling in two-dimensional atomic crystals. **Nature Photonics**, Nature Publishing Group UK London, v. 9, n. 1, p. 30–34, 2015.
- LOW, T.; CHAVES, A.; CALDWELL, J. D.; KUMAR, A.; FANG, N. X.; AVOURIS, P.; HEINZ, T. F.; GUINEA, F.; MARTIN-MORENO, L.; KOPPENS, F. Polaritons in layered two-dimensional materials. **Nature Materials**, published online: 28 November 2016, nov 2016.
- MA, Y.; ZHONG, G.; DAI, Z.; OU, Q. In-plane hyperbolic phonon polaritons: materials, properties, and nanophotonic devices. **npj Nanophotonics**, Nature Publishing Group UK London, v. 1, n. 1, p. 25, 2024.
- MANZELI, S.; OVCHINNIKOV, D.; PASQUIER, D.; YAZYEV, O. V.; KIS, A. 2d transition metal dichalcogenides. **Nature Reviews Materials**, Nature Publishing Group, v. 2, n. 8, p. 1–15, 2017.

- MOMMA, K.; IZUMI, F. Vesta: a three-dimensional visualization system for electronic and structural analysis. **Applied Crystallography**, International Union of Crystallography, v. 41, n. 3, p. 653–658, 2008.
- NIKA, D. L.; BALANDIN, A. A. Phonons and thermal transport in graphene and graphene-based materials. **Reports on Progress in Physics**, IOP Publishing, v. 80, n. 3, p. 036502, jan 2017. Available at: <https://dx.doi.org/10.1088/1361-6633/80/3/036502>.
- NOBRE, E.; FILHO, R. C.; FARIAS, G.; ALMEIDA, N. Polaritons in anisotropic materials with cylindrical geometry. **Physical Review B**, APS, v. 57, n. 17, p. 10583, 1998.
- NOVOSELOV, K. S.; GEIM, A. K.; MOROZOV, S. V.; JIANG, D.-e.; ZHANG, Y.; DUBONOS, S. V.; GRIGORIEVA, I. V.; FIRSOV, A. A. Electric field effect in atomically thin carbon films. **science**, American Association for the Advancement of Science, v. 306, n. 5696, p. 666–669, 2004.
- OTTO, A. Excitation of nonradiative surface plasma waves in silver by the method of frustrated total reflection. **Zeitschrift für Physik**, v. 216, n. 4, p. 398–410, 1968.
- POLITANO, A.; CHIARELLO, G. Plasmon modes in graphene: status and prospect. **Nanoscale**, Royal Society of Chemistry, v. 6, n. 19, p. 10927–10940, 2014.
- RAETHER, H. **Surface Plasmons on Smooth and Rough Surfaces and on Gratings**. [S.l.]: pringer-Verlag, Berlin, 1998.
- RAYLEIGH, L. On the dynamical theory of gratings. **Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character**, JSTOR, v. 79, n. 532, p. 399–416, 1907.
- REDHEFFER, R. Difference equations and functional equations in transmission-line theory. **Modern mathematics for the engineer**, McGraw-Hill, New York, v. 12, p. 282–337, 1961.
- REZENDE, S. M.; AZEVEDO, A.; RODRÍGUEZ-SUÁREZ, R. L. Introduction to antiferromagnetic magnons. **Journal of Applied Physics**, AIP Publishing, v. 126, n. 15, 2019.
- RITCHIE, R. H. Plasma losses by fast electrons in thin films. **Physical Review**, v. 106, n. 5, p. 874–881, jun 1957.
- RITCHIE, R. H.; ELDRIDGE, H. B. Optical emission from irradiated foils. i. **Phys. Rev.**, American Physical Society, v. 126, p. 1935–1947, Jun 1962. Available at: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.126.1935>.
- RODRIGO, D.; LIMAJ, O.; JANNER, D.; ETEZADI, D.; ABAJO, F. J. García de; PRUNERI, V.; ALTUG, H. Mid-infrared plasmonic biosensing with graphene. **Science**, American Association for the Advancement of Science, v. 349, n. 6244, p. 165–168, 2015.
- SILVA, J. T. C. **Propriedades eletrônicas de monocamadas de nitreto de boro**. Dissertation (Mestrado) — Universidade do Minho (Portugal), 2019.

STREYER, W. H. **Reststrahlen band optics for the advancement of far-infrared optical architecture**. Thesis (Doutorado) — University of Illinois at Urbana-Champaign, 2016.

TIELROOIJ, K. *et al.* Electrical control of optical emitter relaxation pathways enabled by graphene. **Nature Physics**, v. 11, p. 281–287, 2015.

VEEN, E. V.; NEMILENTSAU, A.; KUMAR, A.; ROLDÁN, R.; KATSNELSON, M. I.; LOW, T.; YUAN, S. Tuning two-dimensional hyperbolic plasmons in black phosphorus. **Physical Review Applied**, APS, v. 12, n. 1, p. 014011, 2019.

WANG, J.; JIANG, C.; LI, W.; XIAO, X. Anisotropic low-dimensional materials for polarization-sensitive photodetectors: From materials to devices. **Advanced Optical Materials**, v. 10, n. 6, p. 2102436, 2022. Available at: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/adom.202102436>.

WOOD, R. Xliv. a suspected case of the electrical resonance of minute metal particles for light-waves. a new type of absorption. **The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science**, Taylor & Francis, v. 3, n. 16, p. 396–410, 1902.

WOOD, R. Xlvii. on the electrical resonance of metal particles for light-waves—second communication. **The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science**, Taylor & Francis, v. 4, n. 22, p. 425–429, 1902.

XIA, F.; WANG, H.; HWANG, J. C.; NETO, A. C.; YANG, L. Black phosphorus and its isoelectronic materials. **Nature Reviews Physics**, Nature Publishing Group UK London, v. 1, n. 5, p. 306–317, 2019.

ZENNECK, J. Über die fortpflanzung ebener elektromagnetischer wellen längs einer ebenen leiterfläche und ihre beziehung zur drahtlosen telegraphie. **Annalen der Physik**, Wiley Online Library, v. 328, n. 10, p. 846–866, 1907.

Apêndice A - Verificação do anulamento das equações

O seguinte código em Python foi feito para calcular o resultado das Eqs.(2.33) e (2.34), utilizando a biblioteca Sympy.

```
from sympy import *

x, y = symbols('x␣y')

mxx,mxy,mxz,myx,myy,myz,mzx,mzy,mzz = symbols('m_xx,m_xy,m_xz,m_yx
,m_yy,m_yz,m_zx,m_zy,m_zz')
exx,exy,exz,eyx,eyy,eyz,ezx,ezy,ezz = symbols('e_xx,e_xy,e_xz,e_yx
,e_yy,e_yz,e_zx,e_zy,e_zz')

qx, qy = symbols('q_x␣q_y')
k0 = symbols('k_0')

mu = Matrix([[mxx, mxy, mxz], [myx, myy, myz], [mzx, mzy, mzz]])
eps = Matrix([[exx, exy, exz], [eyx, eyy, eyz], [ezx, ezy, ezz]])

B = Matrix([[0, -1, 0], [1, 0, 0], [0, 0, 0]])
R = Matrix([[0, 0, qy], [0, 0, -qx], [-qy, qx, 0]])

A2 = B * mu * B * eps
A1 = B * mu * R * eps + R * mu * B * eps
A0 = R * mu * R * eps

alpha2 = A2[0:2, 0:2]
alpha1 = A1[0:2, 0:2]
alpha1[0, 0] += -qx * A2[0, 2]
alpha1[1, 0] += -qx * A2[1, 2]
alpha1[0, 1] += -qy * A2[0, 2]
alpha1[1, 1] += -qy * A2[1, 2]
```

```
alpha0 = A0[0:2, 0:2]
alpha0[0, 0] += k0**2 - qx * A1[0, 2]
alpha0[1, 0] += -qx * A1[1, 2]
alpha0[0, 1] += -qy * A1[0, 2]
alpha0[1, 1] += k0**2 - qy * A1[1, 2]

alpham = A0[0:2, 0:2] - A0[0:2, 0:2]
alpham[0, 0] = -qx * A0[0, 2]
alpham[0, 1] = -qy * A0[0, 2]
alpham[1, 0] = -qx * A0[1, 2]
alpham[1, 1] = -qy * A0[1, 2]

# Resultado da primeira equacao:
alpham[0, 0] * alpham[1, 1] - alpham[0, 1] * alpham[1, 0]

# Resultado da segunda equacao:
simplify(alpham[0,0] * alpha0[1,1]+alpha0[0,0] * alpham[1,1]-
        alpham[1,0] * alpha0[0,1]-alpha0[1,0] * alpham[0,1])
```

Os resultados resultaram em zero para ambos os casos.

Apêndice B - Código polaripy

Biblioteca criada pelo grupo do ITA², contendo todas as funções utilizadas no Polaripy.

```
# version 03/05/2024
# Transfer Matrix Method for Anisotropic systems
# Includes Scattering Matrix Formalism.
# Wavenumbers in the propagation direction are determined by the
  solution of
# a forth order polynomial

import numpy as np
from numpy.linalg import det, inv
from numpy.linalg import solve

# Constants
# -----
c = 299792458 # m/s
tol = 10e-7 # tolerance for the roots of the polynomial
# -----
'''
    To determine the structure, we have two classes.
    Convention on the notation of the arrays:
    u[direction, mode label, kind]
    u is an 3*4*4 array
    the first dimention express the x, y and z axis
    0 -> x axis
    1 -> y axis
    2 -> z axis
    the second dimention express the four modes of the eigenmodes
    There is four roots of the polinomial
'''
```

²Gabriel Bomfim Carneiro, Ana Beatriz Monteiro dos Santos, Marcio Gholmie Labriola Filho e André Jorge Carvalho Chaves.

```

0, 1, 2, 3 express those four roots.
the third dimation express the four kinds of fields
0 -> D field
1 -> E field
2 -> H field
3 -> B field
'''
class Structure:
    """
    The Structure class determines the 1D stack (Materials with
    widths)
    """

    # Constructor method
    def __init__(self, materials, widths):
        self.materials = materials
        self.wid = widths

class Material:
    """
    Each material is characterized by its dielectric function and
    permeability
    """

    # Constructor method
    def __init__(self, eps, mu):
        self.eps = eps # Dielectric function of the material
        self.mu = mu # Permeability of the material

# -----
'''
Functions:
'''
# Coefs:
# Calculates transmission (T), reflection (R), and absorption (A)
coefficients
# using the transfer matrix method and scattering matrix approach.
# @jit(nopython=True, paralell = True)
def coefs(Cr, freq, qx, qy, polarization):
    """
    Parameters:

```

```

Cr (Crystal): Crystal object containing material properties.
freq (float): Frequency of the incident wave.
qx (float): Wave vector component in the x-direction.
qy (float): Wave vector component in the y-direction.
Polarization (float): Polarization angle. Defines the
    composition between TM and TE modes.( between 0 and pi/2)
Nmax (int, optional): Maximum number of iterations for
    numerical integration. Default is 1000.
precs (float, optional): Precision parameter for numerical
    integration. Default is 1.0e-6.

Returns:
T (float): Transmission coefficient.
R (float): Reflection coefficient.
A (float): Absorption coefficient.
"""

# Calculate total transfer matrix , scattering matrix,
    eigenmodes and wavenumbers
# S total and ktot are not used.
M_total, S_total, u, ktot = prop(Cr, freq, qx, qy)
fresnel_total = fresnel(M_total)

# Obtain initial and final permeabilities of the crystal
mu_i = Cr.materials[0].mu(freq)
mu_f = Cr.materials[len(Cr.materials) - 1].mu(freq)

# Extract Fresnel coefficients
fresnel_a, fresnel_b = fresnel_total

# Calculate components of incident and reflected waves
a1 = np.cos(polarization)
a3 = np.sin(polarization)
b1 = fresnel_a[0] * a1 + fresnel_b[0] * a3
b3 = fresnel_a[1] * a1 + fresnel_b[1] * a3

# u[direction, mode label, kind]
N = len(Cr.materials) - 1

# Calculate the poyting vector for the initial and final
    polarization state
S_i_dir = Poyting_vector(a1, a3, mu_i, u[:, 0, 1, 0], u[:, 1,

```

```

    1, 0], u[:, 0, 2, 0], u[:, 1, 2, 0])
S_f_dir = Poyting_vector(b1, b3, mu_f, u[:, 0, 1, N], u[:, 1,
    1, N], u[:, 0, 2, N], u[:, 1, 2, N])

# Reflection coefficients for each polarization state
a2 = fresnel_a[2] * a1 + fresnel_b[2] * a3 # raa
a4 = fresnel_a[3] * a1 + fresnel_b[3] * a3 # rab
S_i_esq = Poyting_vector(a2, a4, mu_i, u[:, 2, 1, 0], u[:, 3,
    1, 0], u[:, 2, 2, 0], u[:, 3, 2, 0])

# Calculate transmission, reflection, and absorption
# coefficients
T = S_f_dir[2] / S_i_dir[2]
R = -S_i_esq[2] / S_i_dir[2]
A = 1 - T - R

return T, R, A

# -----
# Prop:
# Method to calculate the total transfer matrix, scattering matrix
# , eigenmodes, and wavenumbers
def prop(System, freq, qx, qy):
    """
    Parameters:
    System (object): System object containing information about
        layers and materials.
    freq (float): Frequency of the incident wave.
    qx (float): Wave vector component in the x-direction.
    qy (float): Wave vector component in the y-direction.
    Nmax (int, optional): Maximum number of iterations for
        numerical integration. Default is 1000.
    prec (float, optional): Precision parameter for numerical
        integration. Default is 1.0e-6.

    Returns:
    M_total (array): Total transfer matrix.
    S_total (array): Total scattering matrix.
    utot (array): Eigenmodes field components for all layers.
    ktot (array): Wavenumbers for all layers.
    """

```

```
# Initialize the arrays
number_of_layers = len(System.wid)
utot = np.zeros([3, 4, 4, number_of_layers + 2], dtype=np.
    complex128) # All the eigenmodes field components
ktot = np.zeros([4, number_of_layers + 2], dtype=np.complex128
    ) # All the wavenumbers
k0 = freq / c
materials = System.materials

# External media
eps_ext = materials[0].eps(freq)
mu_ext = materials[0].mu(freq)
rext, aext = Aj(qx, qy, freq, mu_ext, eps_ext)
u1 = eigenmodes(qx, qy, freq, mu_ext, eps_ext, rext, aext)

# First dielectric inside the system
eps_first = materials[1].eps(freq)
mu_first = materials[1].mu(freq)
rf, af = Aj(qx, qy, freq, mu_first, eps_first)
u2 = eigenmodes(qx, qy, freq, mu_first, eps_first, rf, af)

# Initialize the transfer matrix by the first interface
M_total = transfer_matrix_interface(u1, u2)

# Initialize the scattering matrix
# by other method, we could calculate the scattering matrix
with:
# S_total = scattering(M_total), but we choose to do it with
the following method, more precise.
S_total = scattering_matrix_interface(u1, u2)

# Register the first values
utot[:, :, :, 0] = u1
ktot[:, 0] = k0 * rext
kz2 = rf

# Iterate over the layers

for j in range(1, number_of_layers + 1): # j = 1, 2, ...,
    number of layers
```

```
# Repeat the process until the last layer
kz1 = kz2
u1 = u2
width = System.wid[j - 1]

M_inside = propagation_matrix(kz1 * k0, width) #
    calculate the transfer matrix inside the two means
S_inside = scattering(M_inside) # then calculate the
    scattering matrix
S_total = redheffer_star(S_inside, S_total) # then
    concatenate both of them

# Register the others values, for each j.
utot[:, :, :, j] = u1
ktot[:, j] = k0 * kz1

# Multiply every matrix to calculate the total transfer
    matrix
M_total = M_inside.dot(M_total)

# extract each of the eps and mu of the next layers
eps_prox = materials[j + 1].eps(freq)
mu_prox = materials[j + 1].mu(freq)

# do this to the next interface
kz2, alpha2 = Aj(qx, qy, freq, mu_prox, eps_prox)
u2 = eigenmodes(qx, qy, freq, mu_prox, eps_prox, kz2,
    alpha2)
M_interface = transfer_matrix_interface(u1, u2)
S_interface = scattering(M_interface)
# S_interface = scattering_matrix_interface(u1, u2)

S_total = redheffer_star(S_interface, S_total)

# Then, concatenate
M_total = M_interface.dot(M_total)

# put the last eigenvalue and wave number into the array
utot[:, :, :, number_of_layers + 1] = u2
ktot[:, number_of_layers + 1] = k0 * kz2
```

```

    return M_total, S_total, utot, ktot

def Aj(qx, qy, freq, mu, eps):
    """
    Parameters:
    freq (float): Frequency of the incident wave.
    qx (float): Wave vector component in the x-direction.
    qy (float): Wave vector component in the y-direction.
    mu (array): Property of the material.
    eps (array): Property of the material.
    test (boolean, optional): just an auxiliary parameter.

    Returns:
    r (array): roots of the fourth power complex polynomial p.
    alpha (array): important parameters to calculate the roots.
    """

    # number of wave, normalized
    k0 = freq / c
    qx = qx / k0
    qy = qy / k0

    # Calculate B and Rt matrix
    B = np.array([[0, -1, 0], [1, 0, 0], [0, 0, 0]], dtype=np.
        complex128)
    Rt = np.array([[0, 0, qy], [0, 0, -qx], [-qy, qx, 0]], dtype=
        np.complex128)
    epsinv = inv(eps)

    # Auxiliar matrix A, defined in pdf, for this method
    A = np.zeros([3, 3, 3], dtype=np.complex128)
    A[:, :, 2] = Rt.dot(solve(mu, Rt.dot(epsinv)))
    A[:, :, 1] = B.dot(solve(mu, Rt.dot(epsinv))) + Rt.dot(solve(
        mu, B.dot(epsinv)))
    A[:, :, 0] = B.dot(solve(mu, B.dot(epsinv))) # [3,3]
    lam = -1
    alpha = np.zeros([2, 2, 4], dtype=np.complex128)
    # notation pattern with pdf
    # To match the indices on the array with the indices in pdf.
    # 2 <-> 0

```

```

# 1 <-> 1
# 0 <-> 2
# -1 <-> 3

# Sum A for 2,1,0
alpha[:, :, 0:3] = A[0:2, 0:2, :]

# subtract qi*A(2) to find alpha 1
alpha[0, 0, 1] += -qx * A[0, 2, 0]
alpha[1, 0, 1] += -qy * A[0, 2, 0]
alpha[0, 1, 1] += -qx * A[1, 2, 0]
alpha[1, 1, 1] += -qy * A[1, 2, 0]

# subtract qi*A(1) and ko^2*delta from kronecker to find alpha
0
alpha[0, 0, 2] += -qx * A[0, 2, 1] - lam
alpha[1, 0, 2] += -qy * A[0, 2, 1]
alpha[0, 1, 2] += -qx * A[1, 2, 1]
alpha[1, 1, 2] += -qy * A[1, 2, 1] - lam

# calculate alpha (-1)
alpha[0, 0, 3] = -qx * A[0, 2, 2]
alpha[1, 0, 3] = -qy * A[0, 2, 2]
alpha[0, 1, 3] = -qx * A[1, 2, 2]
alpha[1, 1, 3] = -qy * A[1, 2, 2]

# Calculate the coefficients (corrected)

# k^4*wxx2*wyy2 - k^4*wxy2*wyx2
# a4 is the coefficient that multiplies k^4
a4 = alpha[0, 0, 0] * alpha[1, 1, 0] - alpha[0, 1, 0] * alpha
    [1, 0, 0]

# k^3*wxx1*wyy2 + k^3*wxx2*wyy1 - k^3*wxy1*wyx2 - k^3*wxy2*
    wyx1
# a3 is the coefficient that multiplies k^3
a3 = alpha[0, 0, 0] * alpha[1, 1, 1] + alpha[0, 0, 1] * alpha
    [1, 1, 0]
a3 += -alpha[0, 1, 0] * alpha[1, 0, 1] - alpha[0, 1, 1] *
    alpha[1, 0, 0]

```

```

# k^2*wx0*wy2 + k^2*wx1*wy1 + k^2*wx2*wy0 - k^2*wx0*
  wyx2 - k^2*wx1*wyx1 - k^2*wx2*wyx0
# a2 is the coefficient that multiplies k^2
a2 = alpha[0, 0, 0] * alpha[1, 1, 2] + alpha[1, 1, 0] * alpha
  [0, 0, 2]
a2 += alpha[0, 0, 1] * alpha[1, 1, 1] - alpha[0, 1, 0] * alpha
  [1, 0, 2]
a2 += -alpha[1, 0, 0] * alpha[1, 0, 2] - alpha[0, 1, 1] *
  alpha[0, 1, 1]

# k*wx0*wy1 + k*wx1*wy0 + k*wx2*wy3 + k*wx3*wy2 - k*
  wxy2*wyx3 - k*wxy3*wyx2 - k*wxy0*wyx1 - k*wxy1*wyx0
# a1 is the coefficient that multiplies k^1
a1 = alpha[0, 0, 0] * alpha[1, 1, 3] + alpha[1, 1, 0] * alpha
  [0, 0, 3]
a1 += +alpha[0, 0, 1] * alpha[1, 1, 2] + alpha[1, 1, 1] *
  alpha[0, 0, 0]
a1 += -alpha[0, 1, 2] * alpha[1, 0, 3] - alpha[1, 0, 0] *
  alpha[0, 1, 3]
a1 += -alpha[0, 1, 1] * alpha[1, 0, 2] - alpha[1, 0, 1] *
  alpha[0, 1, 2]

# wx0*wy0 - wxy0*wyx0 + wx1*wy3 + wx3*wy1 - wxy1*wyx3 -
  wxy3*wyx1
# a0 is the coefficient that multiplies k^0
a0 = alpha[0, 0, 1] * alpha[1, 1, 3] + alpha[1, 1, 0] * alpha
  [0, 0, 3]
a0 += alpha[0, 0, 2] * alpha[1, 1, 2] - alpha[0, 1, 1] * alpha
  [1, 0, 3]
a0 += -alpha[1, 0, 1] * alpha[0, 1, 3] - alpha[0, 1, 2] *
  alpha[1, 0, 2]

# construct the fourth degree polynomial
p = np.array([a4, a3, a2, a1, a0], dtype=np.complex128)

# test if biquadratic:
if abs(a3) <= tol and abs(a1) <= tol:
    # delta=a2**2-4*a4*a0
    sr = np.roots([a4, a2, a0]) + 0.j
    sr = np.sort(sr)
    for j in range(2):

```

```

        x = np.angle(sr[j])
        if (x < tol or np.abs(x - np.pi) < tol or np.abs(x +
            np.pi) < tol):
            sr[j] = sr[j].real
    r = np.array([-np.sqrt(sr[0]), -np.sqrt(sr[1]), np.sqrt(sr
        [0]), np.sqrt(sr[1])])
else:
    r = np.roots(p)
    index = np.argsort(r.imag)
    r = r[index]
return r, alpha

# Eigenmodes
# Calculate the eigenmodes of the system.

def eigenmodes(qx, qy, freq, mu, eps, roots, alpha):
    """
    Parameters:
    - qx (float): Wave vector component in the x-direction.
    - qy (float): Wave vector component in the y-direction.
    - freq (float): Frequency of the incident wave.
    - mu (numpy.ndarray): Permeability matrix of the material.
    - eps (numpy.ndarray): Permittivity matrix of the material.
    - roots (numpy.ndarray): Roots of the characteristic equation.
    - alpha (numpy.ndarray): Tensor used to calculate coefficients
        .

    Returns:
    - u (numpy.ndarray): Eigenmodes of the system.
    """

    u = np.zeros([3, 4, 4], dtype=np.complex128)
    # u[direction, mode label, kind]
    # u is an 3*4*4 array
    # the first dimension express the x, y and z axis
    # 0 -> x-axis
    # 1 -> y axis
    # 2 -> z axis
    # the second dimension express the four modes of the
        eigenmodes
    # There is four roots of the polinomial

```

```

# 0, 1, 2, 3 express those four roots.
# the third dimension express the four kinds of fields
# 0 -> D field
# 1 -> E field
# 2 -> H field
# 3 -> B field

degenerate = degen(roots) # Check for degeneracy in roots
k0 = freq / c
for j in range(4):
    kz = roots[j] * k0
    rj = roots[j]

    # Handle degenerate modes
    if degenerate[j % 2]:
        q = np.sqrt(qx ** 2 + qy ** 2)

        # Set polarization vectors for degenerate modes ( by
        # convention )
        if abs(q) <= tol:
            if j % 2 == 0:
                Dx = 1
                Dy = 0
            else:
                Dx = 0
                Dy = 1
        else:
            if j % 2 == 0:
                Dx = qx / q
                Dy = qy / q
            else:
                Dx = -qy / q
                Dy = qx / q

    else:
        # Calculate coefficients for non-degenerate modes
        T1 = -(alpha[0, 0, 0] * rj ** 2 + alpha[0, 0, 1] * rj
            + alpha[0, 0, 2] + alpha[0, 0, 3] / rj)
        T2 = alpha[0, 1, 0] * rj ** 2 + alpha[0, 1, 1] * rj +
            alpha[0, 1, 2] + alpha[0, 1, 3] / rj

```

```

        # Check if the polarization vectors are already
        diagonal
    if abs(T2) <= tol:
        if j % 2 == 0:
            Dx = 1
            Dy = 0
        else:
            Dx = 0
            Dy = 1
    else:
        # Normalize the polarization vectors
        Dy = T1 / np.abs(T1)
        Dx = T2 / np.abs(T1)

    # Calculate the third component of polarization vector

    Dz = -(qx * Dx + qy * Dy) / kz
    k = np.array([qx, qy, kz])

    # Store the eigenmodes in the u array
    u[:, j, 0] = np.array([Dx, Dy, Dz]) # D
    u[:, j, 1] = solve(eps, (u[:, j, 0])) # E
    u[:, j, 3] = np.cross(k, u[:, j, 1]) / freq # B
    u[:, j, 2] = solve(mu, u[:, j, 3]) # H

    return u

# -----
def Poyting_vector(a1, a3, mu, ui1, ui3, vi1, vi3):
    # Calculate the Poyting vector for a given polarization state
    t1 = a1 * np.conjugate(a1) * np.cross(ui1, np.conjugate(solve(
        mu, np.conjugate(vi1))))
    t1 += a3 * np.conjugate(a3) * np.cross(ui3, np.conjugate(solve(
        mu, np.conjugate(vi3))))
    t1 += a1 * np.conjugate(a3) * np.cross(ui1, np.conjugate(solve(
        mu, np.conjugate(vi3))))
    t1 += a3 * np.conjugate(a1) * np.cross(ui3, np.conjugate(solve(
        mu, np.conjugate(vi1))))
    return np.real(t1)

# -----
# degen

```

```

# Check for degeneration in roots
def degen(roots):

    roots = np.sort(roots)
    degenerate = []
    if (np.abs(roots[0] - roots[1]) < 1.0e-7):
        degenerate.append(True)
    else:
        degenerate.append(False)
    if (np.abs(roots[2] - roots[3]) < 1.0e-7):
        degenerate.append(True)
    else:
        degenerate.append(False)
    return degenerate

# -----
# transfer_matrix_interface
def transfer_matrix_interface(u1, u2): # interface transfer
    matrix

    B1 = np.zeros([4, 4], dtype=np.complex128)
    B2 = np.zeros([4, 4], dtype=np.complex128)
    # continuity of Ex and Ey
    B1[0:2, :] = u1[0:2, :, 1] # .transpose()
    B2[0:2, :] = u2[0:2, :, 1] # .transpose()
    # continuity of Bx and By
    B1[2:4, :] = u1[0:2, :, 3] # .transpose()
    B2[2:4, :] = u2[0:2, :, 3] # .transpose()
    return solve(B2, B1)

# -----
# scattering_matrix_interface
def scattering_matrix_interface(u1, u2): # interface transfer
    matrix

    J1 = np.zeros([4, 4], dtype=np.complex128)
    J2 = np.zeros([4, 4], dtype=np.complex128)
    # Remember our convention: it will be important for us.
    # u[direction, mode label, kind]
    # u is an 3*4*4 array
    # the first dimention express the x, y and z axis
    # 0 -> x axis
    # 1 -> y axis

```

```

# 2 -> z axis
# the second dimension express the four modes of the
  eigenmodes
# There is four roots of the polynomial
# 0, 1, 2, 3 express those four roots.
# the third dimension express the four kinds of fields
# 0 -> D field
# 1 -> E field
# 2 -> H field
# 3 -> B field

# We want to find here the Scattering Matrix. So that:
# [L1;R2] = [S11 S12; S21 S22]@[R1;L2]

# To do this we can solve for J1 and J2
# J1@[L1;R2]= J2@[R1;L2]
# S = J2@(J1)^-1

J1[0, 0:2] = -u2[0, 2:4, 1] # .transpose()
J1[0, 2:4] = u1[0, 0:2, 1] # .transpose()

J1[1, 0:2] = -u2[1, 2:4, 1] # .transpose()
J1[1, 2:4] = u1[1, 0:2, 1] # .transpose()

J1[2, 0:2] = -u2[0, 2:4, 2] # .transpose()
J1[2, 2:4] = u1[0, 0:2, 2] # .transpose()

J1[3, 0:2] = -u2[1, 2:4, 2] # .transpose()
J1[3, 2:4] = u1[1, 0:2, 2] # .transpose()

J2[0, 0:2] = u2[0, 0:2, 1] # .transpose()
J2[0, 2:4] = -u1[0, 2:4, 1] # .transpose()

J2[1, 0:2] = u2[1, 0:2, 1] # .transpose()
J2[1, 2:4] = -u1[1, 2:4, 1] # .transpose()

J2[2, 0:2] = u2[0, 0:2, 2] # .transpose()
J2[2, 2:4] = -u1[0, 2:4, 2] # .transpose()

J2[3, 0:2] = u2[1, 0:2, 2] # .transpose()
J2[3, 2:4] = -u1[1, 2:4, 2] # .transpose()

```

```
    return solve(J2, J1)

#
-----

# propagation along media by convention  $\exp(i*k_0*root*thickness)$ 
def propagation_matrix(r1, L):
    return np.diag(np.exp(1.j * r1 * L))

# -----
# obtention of the fresnel coefficients from the transfer matrix
def fresnel(M):
    fresnel_a = np.zeros([4], dtype=np.complex128) # [taa tab
        raa rab]
    fresnel_b = np.zeros([4], dtype=np.complex128) # [tba tbb
        rba rbb]

    # modo a 1 0
    # modo b 0 1
    P = np.zeros([4, 4], dtype=np.complex128)
    Q = np.zeros([4, 4], dtype=np.complex128)

    P[0:2, 2:4] = -M[0:2, 0:2]
    P[2, 0] = 1
    P[3, 1] = 1
    P[2:4, 2:4] = -M[2:4, 0:2]

    Q[0:2, 0:2] = M[0:2, 2:4]
    Q[2:4, 2:4] = M[2:4, 2:4]

    P_inv = inv(P)
    T = P_inv.dot(Q)
    fresnel_a = T.dot([1, 0, 1, 0])
    fresnel_b = T.dot([0, 1, 0, 1])

    return fresnel_a, fresnel_b

#
-----
```

```

# obtention of the fresnel coefficients from the scattering matrix
# def fresnel(S):
#     fresnel_a = np.zeros([4], dtype=np.complex128) # [taa tab
#         raa rab]
#     fresnel_b = np.zeros([4], dtype=np.complex128) # [tba tbb
#         rba rbb]

#     T=np.zeros([4,4], dtype=np.complex128)
#     T[:,0]=M[:,0]
#     T[:,1]=M[:,1]
#     T[2,2]=-1
#     T[3,3]=-1

#     T_inv = inv(T)

#     fresnel_a = T_inv[:,0]
#     fresnel_b = T_inv[:,1]

#     return fresnel_a, fresnel_b

# -----

# Calculate the determinant of the plasmon matrix
def plasmon_determinant(M):
    Mred = np.zeros([2, 2], dtype=np.complex128)
    Mred[:, :] = M[0:2, 2:4]
    return det(Mred)

# -----

# Calculate the Scattering Matrix for a given Transfer Matrix M 4
# x4
def scattering(M):

    S = np.zeros([4, 4], dtype=np.complex128)

    # if abs(det(M[0:2, 0:2]) <= tol):
    #     print('error', det(M[2:4, 2:4]))

    X = inv(M[0:2, 0:2])
    S[0:2, 0:2] = M[2:4, 0:2].dot(X)
    S[0:2, 2:4] = M[2:4, 2:4] - S[0:2, 0:2].dot(M[0:2, 2:4])

```

```
S[2:4, 0:2] = X
S[2:4, 2:4] = -solve(M[0:2, 0:2], M[0:2, 2:4])
return S

# -----

# Given two scattering matrices S1 and S2
# obtain the composition S1xS2
def redheffer_star(S1, S2):
    I2 = np.eye(2, dtype=np.complex128)
    St = np.zeros([4, 4], dtype=np.complex128)
    X = inv(I2 - S1[2:4, 2:4].dot(S2[0:2, 0:2]))

    # By the equations on the article
    St[0:2, 0:2] = S1[0:2, 0:2] + S1[0:2, 2:4].dot(X.dot(S2[0:2,
        0:2].dot(S1[2:4, 0:2])))
    St[0:2, 2:4] = S1[0:2, 2:4].dot(X.dot(S2[0:2, 2:4]))
    St[2:4, 0:2] = S2[2:4, 0:2].dot(X.dot(S1[2:4, 0:2]))
    St[2:4, 2:4] = S2[2:4, 2:4] + S2[2:4, 0:2].dot(X.dot(S1[2:4,
        2:4].dot(S2[0:2, 2:4])))

    return St
```

Apêndice C - Relação entre o maior autovalor da matriz de espalhamento e estados evanescentes

Para obter o maior autovalor da matriz de espalhamento, consideraremos um sistema simples em que os meios inicial e final são o ar. Portanto, podemos relacionar as ondas que entram e as ondas que saem como:

$$\begin{pmatrix} L_1 \\ R_2 \end{pmatrix} = \mathbf{S} \begin{pmatrix} R_1 \\ L_2 \end{pmatrix}, \quad (\text{C.1})$$

onde as ondas que saem e que entram dependem do k_z :

$$L_1 \propto e^{-ik_z}, \quad (\text{C.2a})$$

$$R_2 \propto e^{ik_z}, \quad (\text{C.2b})$$

$$R_1 \propto e^{ik_z}, \quad (\text{C.2c})$$

$$L_2 \propto e^{-ik_z}, \quad (\text{C.2d})$$

possuindo k_z o mesmo valor em todas as equações. Portanto, temos que:

$$k_z^2 = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 - q^2. \quad (\text{C.3})$$

Podemos alterar k_z aumentando q . Quando $q > \frac{\omega}{c}$, a componente k_z se torna um imaginário puro:

$$k_z = \pm i \sqrt{q^2 - \left(\frac{\omega}{c}\right)^2}. \quad (\text{C.4})$$

Iremos considerar a raiz positiva, de forma que as ondas que saem passam a ser ondas crescentes e as ondas que entram passam a ser evanescentes. Logo, temos:

$$R_1(z \rightarrow -\infty) \Rightarrow 0, \quad (\text{C.5a})$$

$$L_2(z \rightarrow +\infty) \Rightarrow 0, \quad (\text{C.5b})$$

$$L_1(z \rightarrow -\infty) \Rightarrow \infty, \quad (\text{C.5c})$$

$$R_2(z \rightarrow +\infty) \Rightarrow \infty. \quad (\text{C.5d})$$

Nessa convenção, estados evanescentes correspondem às ondas que entram, portanto, ao anular as ondas que saem, resulta em estados confinados ao meio em questão. Portanto ao fazer:

$$L_1 = R_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{C.6})$$

temos a relação:

$$\mathbf{S} \begin{pmatrix} R_1 \\ L_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{C.7})$$

para que a Eq. (C.7) tenha solução, o determinante da matriz \mathbf{S} deve ser nulo. Além disso, considerando a relação unitária da matriz \mathbf{S} , temos:

$$\mathbf{S}\mathbf{S}^\dagger = 1 \quad (\text{C.8})$$

o que implica que o produto dos autovalores da matriz \mathbf{S} deve satisfazer a relação:

$$|\lambda_1\lambda_2\lambda_3\lambda_4| = 1 \Rightarrow |\lambda_1\lambda_2\lambda_3| = \frac{1}{|\lambda_4|}, \quad (\text{C.9})$$

Nota-se ainda que, pela Eq. (C.7), um dos autovalores da matriz \mathbf{S} deve ser nulo. Assim, pela Eq. (C.9), se um dos autovalores é zero (por exemplo, λ_4), um dos outros deve ser infinito.

FOLHA DE REGISTRO DO DOCUMENTO

1. CLASSIFICAÇÃO/TIPO DM	2. DATA 18 de março de 2025	3. DOCUMENTO Nº DCTA/ITA/DM-011/2025	4. Nº DE PÁGINAS 86
5. TÍTULO E SUBTÍTULO: Plasmon-fônon polaritons anisotrópicos em heteroestruturas de van der Waals: um estudo via método da matriz de espalhamento			
6. AUTORA(ES): Ana Beatriz Monteiro dos Santos			
7. INSTITUIÇÃO(ÕES)/ÓRGÃO(S) INTERNO(S)/DIVISÃO(ÕES): Instituto Tecnológico de Aeronáutica – ITA			
8. PALAVRAS-CHAVE SUGERIDAS PELA AUTORA: Polaritons; Materiais bidimensionais anisotrópicos; Modos hibridizados; Heteroestruturas de Van der Waals;			
9. PALAVRAS-CHAVE RESULTANTES DE INDEXAÇÃO: Polaritons; Estruturas bidimensionais; Heteroestruturas de van der Waals; Grafeno; Materiais anisotrópicos; Física.			
10. APRESENTAÇÃO: <input checked="" type="checkbox"/> Nacional <input type="checkbox"/> Internacional ITA, São José dos Campos. Curso de Mestrado. Programa de Pós-Graduação em Física. Área de Física Atômica e Molecular. Orientador: Prof. Dr. André Jorge Carvalho Chaves. Defesa em 06/03/2025. Publicada em 2025.			
11. RESUMO: Polaritons são quasipartículas resultantes do forte acoplamento entre um campo eletromagnético e excitações materiais, como plasmons, fônons, éxcitons e mágnons, em materiais bidimensionais (2D). Esses modos polaritônicos, como os plasmon-polaritons no grafeno e os fônon-polaritons no nitreto de boro hexagonal (hBN), permitem o confinamento da luz em nanoescala, possibilitando avanços na nanofotônica e optoeletrônica. Nesta dissertação, foram investigados modos de polaritons de superfície em diferentes heteroestruturas de Van der Waals compostas por materiais bidimensionais anisotrópicos, como grafeno, fósforo negro e hBN. Utilizamos o formalismo 4×4 dos métodos da matriz de transferência e da matriz de espalhamento para calcular as respostas eletromagnéticas de empilhamentos unidimensionais de materiais anisotrópicos. Os autovalores da matriz de espalhamento revelam a presença de polaritons, que foram calculados para os sistemas propostos, sendo analisada a relação de dispersão dos diferentes polaritons. Para isso, foi usada uma ferramenta computacional desenvolvida pelo grupo de pesquisa do ITA, o Polaripy. Estudamos a dispersão de plasmon-polaritons através da matriz de espalhamento em uma monocamada de grafeno e em um filme fino de fósforo negro, além de fônon-polaritons numa camada de 30nm de hBN. Também foram analisados os modos hibridizados resultantes dos empilhamentos dois a dois das camadas de grafeno, fósforo negro e hBN especificadas. Por fim, com o empilhamento dos três materiais simultaneamente, foi feita a análise dos modos hibridizados de plasmon-fônon polaritons anisotrópicos. Os resultados podem ser de grande interesse para futuras aplicações em sensores, guias de onda e tecnologias de comunicação óptica.			
12. GRAU DE SIGILO: <input checked="" type="checkbox"/> OSTENSIVO <input type="checkbox"/> RESERVADO <input type="checkbox"/> SECRETO			