

UNIVERSIDADE FEDERAL DA BAHIA

ESCOLA POLITÉCNICA DA UFBA

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA ELÉTRICA

DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA ELÉTRICA E DE COMPUTAÇÃO

Mestrado em Engenharia Elétrica

Absorvedores Reconfiguráveis baseados em materiais com mudança de fase

ISRAEL ALVES OLIVEIRA

Autor

VITALY FÉLIX RODRIGUEZ ESQUERRE

Orientador

IGOR LEONARDO GOMES DE SOUZA

Co-Orientador

SALVADOR

2021

Absorvedores Reconfiguráveis baseados em materiais com mudança de fase

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Elétrica, Escola Politécnica, Universidade Federal da Bahia - UFBA, como pré-requisito para obtenção do grau de Mestre em Engenharia Elétrica.

Autor: Israel Alves Oliveira

Orientadores:

Prof. Dr. Vitaly Felix Rodriguez Esquerre.

Prof. Dr. Igor Leonardo Gomes de Souza.

SALVADOR

2021

Ficha catalográfica elaborada pelo Sistema Universitário de Bibliotecas (SIBI/UFBA), com os dados fornecidos pelo(a) autor(a).

```
Alves Oliveira, Israel
Absorvedores Reconfiguráveis baseados em materiais
com mudança de fase / Israel Alves Oliveira. --
Salvador, 2021.
90 f.: il
```

Orientador: Vitaly Felix Rodriguez-Esquérre. Coorientador: Igor Leonardo Gomes de Souza. Dissertação (Mestrado - Engenharia Elétrica) --Universidade Federal da Bahia, Escola Politécnica, 2021.

1. Materiais com mudança de fase. 2. Reconfigurabilidade. 3. Absorvedores Plasmônicos. 4. Método dos Elementos Finitos. I. Felix Rodriguez-Esquérre, Vitaly. II. Gomes de Souza, Igor Leonardo. III. Título.



UNIVERSIDADE FEDERAL DA BAHIA ESCOLA POLITÉCNICA DA UFBA PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA ELÉTRICA DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA ELÉTRICA E DE COMPUTAÇÃO

Mestrado em Engenharia Elétrica

Absorvedores Reconfiguráveis baseados em materiais com mudança de fase

Dissertação de Mestrado

Autor: Israel Alves Oliveira

Orientadores:

Prof. Dr. Vitaly Felix Rodriguez Esquerre

Prof. Dr. Igor Leonardo Gomes de Souza

Banca Examinadora

Prof. Dr. Vitaly Felix Rodriguez Esquerre

Prof. Dr Igor Leonardo Gomes de Souza

Prof. Dr. Hugo Enrique Hernández Figueroa

Prof. Dr. Marco Isaías Alayo Chávez

Mauanol

Prof. Dr. Joaquim Junior Isidio de Lima

wimin latolio ob Oma

Agradecimentos

Agradeço a Deus pelo dom da vida e por todas as bênçãos.

Aos meus pais Daniel (in memorian) e Maria das Graças, por acreditarem no meu potencial desde sempre, principalmente o acadêmico e por me proporcionarem tudo o que é necessário em minha vida e a quem sou e sempre serei grato.

Às minhas irmãs Jaqueline e Vanessa, meus sobrinhos e minha recém chegada sobrinha Agnes e também a todos os meus familiares que se mostraram compreensíveis da minha ausência neste período de Mestrado.

À minha esposa Tacyra Vieira por todo o amor, compreensão, carinho e cumplicidade durante todo o período de pesquisas intensas. Ao meu enteado/filho Felipe Augusto e sua amiga Joice Santos pela confiança e por sempre se mostraram disponíveis para ajudar-me com as simulações.

Aos Docentes do Programa de Pós-Graduação de Engenharia Elétrica da UFBA em que tive a oportunidade de ser aluno e receber dicas uteis para o desenvolvimento das minhas pesquisas.

Aos companheiros de pesquisa, do Laboratório de pesquisa de Telecomunicações (Labtel), e em especial o Prof. Msc. Flávio Silva que, tive a oportunidade de discutir, analisar e projetar novas simulações e a quem eu considero como um verdadeiro irmão.

Ao Co-orientador Prof. Dr. Igor Souza, pela amizade e por, desde a graduação, me incentivar e desafiar a alcançar novas ideias para a busca e criação de novas perspectivas numa área em constante crescimento e até hoje tento responder de uma forma ideal a pergunta que ele me fez: "Você gosta de óptica?".

Ao Orientador Prof. Dr. Vitaly Felix Rodriguez Esquerre, pela grande oportunidade, dicas e lições muito valiosas, especialmente na área de Eletromagnetismo e Fotônica, e pela disponibilidade de sempre em ajudar no que for possível.

Por fim, agradeço a meu amigo e companheiro de trabalho Olmir Miranda, por ter disponibilizado para mim o seu notebook por vários meses, que foi fruto de vários trabalhos realizados.

"Tudo posso Naquele que me fortalece" Felipenses 4:13

Resumo

Os materiais com mudança de fase de calcogenetos são elementos potencialmente vantajosos e são conhecidos pela sua grande capacidade de retenção de dados. Ao serem integrados a estruturas absorvedoras eletromagnéticas, são capazes de controlar os efeitos da absorção em uma grande faixa de comprimentos de onda devido ao contraste óptico causado pela modulação de seus índices de refração. Nesta dissertação foram analisadas estruturas absorvedoras plasmônicas, utilizando uma camada de material de mudança de fase de calcogeneto (GeTe) na faixa de espectro infravermelho (1000-2200 nm). Através da relação de Lorentz-Lorenz foi possível controlar os picos de ressonância e da geometria através de funções nos dois casos estudados. Também foram analisados os mecanismos físicos dos absorvedores ao interagir com a luz incidente e os fenômenos causados. Os absorvedores foram analisados em incidência normal e oblíqua em modos de polarização Transversal Elétrica (TE) e Transversal Magnética (TM) e os resultados alcançados foram superiores a 93%. Estas estruturas são aplicações potenciais para várias tecnologias empregadas em dispositivos nanofotônicos reconfiguráveis.

Palavras-Chave: Materiais com mudança de fase, Reconfigurabilidade, Absorvedores Plasmônicos, Método dos Elementos Finitos.

Abstract

The Chalcogenide phase change materials are potentially advantageous elements and are known for their high data retention capacity. When integrated into electromagnetic absorber structures, they are able to control the effects of absorption over a wide range of wavelengths due to the optical contrast caused by the modulation of their refractive index. In this dissertation, plasmonic absorber structures were analyzed, using a layer of chalcogenide phase change material (GeTe) in the infrared spectrum range (1000-2200 nm). Through the Lorentz-Lorenz relation it was possible to control the resonance and geometry peaks through functions in the two studied cases. The physical mechanisms of absorbers interacting with incident light and the phenomena caused were also analyzed. The absorbers were analyzed in normal and oblique incidence in Transverse Electric (TE) and Transverse Magnetic (TM) polarization modes and the results achieved were higher than 93%. These structures are potential applications for several technologies employed in reconfigurable nanophotonic devices.

Key words: Phase change materials, Reconfigurability, Plasmonic Absorbers, Finite Element Method.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 - Funções dielétricas $\epsilon_1(\omega)$ e ϵ_2 (ω) como propriedades ópticas de PCMs amorfos. [26]
Figura 2 - Figura 2- Funções dielétricas $\epsilon_1(\omega)$ e ϵ_2 (ω) como propriedades ópticas de PCM's cristalinos. [26]
Figura 3 - Ilustração esquemática de transição de fase entre os estados amorfo e cristalino [30] adaptado
Figura 4 - Diagrama de fase do sistema Ge – Sb – Te [31] Adaptado
ouro [56] como funções do comprimento de onda da luz
Célula unitária do absorvedor [68]26
Figura 9 - Espectro de absorção da estrutura [68]
Figura 10 - (a) - (d) Densidade de corrente J (linha superior, barra de cores no plano x-z), (e) - (h) distribuições de campo elétrico E (barra de cores no plano x-z) e (i) - (l) campo magnético H [68]
Figura 11 - Discretização da célula unitária de um absorvedor em 3D
Figura 12 - Discretização do absorvedor planar em 2D
Figura 13 - a) Indice de refração e b) Coeficiente de extinção; dos metais Ag, Au e Ti do modelo Drude-Lorentz [77]
Figura 14 - a) Indice de refração e b) Coeficiente de extinção; efetivos e dependentes do
comprimento de onda do GeTe
reflexão com as camadas de GST em ambas as fases e sem a camada [81]
Cmpo elétrico da estrutura proposta sem camada GST inserida em 920 nm [81]
configuração sem blocos de Ouro. (d) Constantes ópticas do GST [82]
Figura 19 - Espectros de (a) reflexão (b) e absorção (b). O MD (c) e ER (d) para o dispositivo híbrido durante a transição de fase de a-GST para c-GST; o MD (e) e ER (f) para o dispositivo híbrido durante a transição de fase de c-GST para a-GST [82]
Figura 20 - Esquema do filtro do infravermelho médio sintonizável proposto composto por uma matriz de nanobastões de ouro incorporada em um filme Ge2Sb2Te5 espesso. [84]
de Ge2Sb2Te5. (b) Pico ressonante e fator de qualidade como funções da fração de cristalização [84]

Figura 22 - (a) Intensidade de campo elétrico em estado estacionário simulados e mapas de
vetor em (a, d) 3,197 μm, (b, e) 3,785 μm e (c, f) 4,795 μm, Vista superior no plano central do
nanobastão de ouro $(z = 0)$, e $(d - f)$ vista lateral em $y = 0$ [84]
Figura 23 - Absorvedor planar proposto com base em um nano-ressonador integrado com uma sobreposição dielétrica
Figura 24 – (a) – Evolução do espectro de absorção para diferentes níveis de cristalização do
absorvedor. (b) Ajuste por um polinômio de grau 3. As porcentagens mostradas na legenda
correspondem aos níveis de cristalização do GeTe
Figura 25 - Dependência da absorção para ângulos incidentes de 0 ° a 45 ° na faixa de 1000 a
, , ,
2200nm (a) Fase Amorfa (m = 0%), (b) m = 20% , (c) m = 40% , (d) m = 60% , (e) m = 80% , e (f)
Fase Cristalina (m = 100%)
Figura 26 - Dependência da absorção com à espessura do GeTe na faixa de 1000 a 2200nm (a)
Fase Amorfa, (b) Fase Semicristalina e (c) Fase Cristalina, (d) Dependência linear dos picos de
a, b e c com a espessura da camada GeTe (d _{GeTe})
Figura 27 - Mapa de absorção em relação à espessura de Titânio superior (dTi) varredura para
(a) Fase Amorfa, (b) Fase Semicristalina e (c) Fase Cristalina
Figura 28 - Mecanismo de acoplamento físico do absorvedor ressonante híbrido FPR,
incorporando uma sobreposição de compensação de fase, e são a mudança de fase de reflexão
nas duas interfaces de espaçador de metal, respectivamente
Figura 29 - Distribuição espacial do (a) campo elétrico normalizado, (b) campo magnético
normalizado e (c) Potência absorvida para o absorvedor híbrido FPR no comprimento de onda
de absorção de pico de 1964 nm da fase cristalina55
Figura 30 - Estrutura do absorvedor proposta em camadas periódicas cúbicas metálicas e sua
respectiva vista superior57
Figura 31 - Estrutura do absorvedor proposta em camadas periódicas baseadas em nanodiscos
metálicos e sua respectiva vista superior
Figura 32 - Estrutura do absorvedor proposta sem as camadas metálicas
Figura 33 - Espectro de absorção das estruturas analisadas em: a) Estado amorfo e em b) Estado
cristalino
Figura 34 - Célula unitária do absorvedor proposto 3.2
Figura 35 - Evolução do espectro de absorção para diferentes níveis de cristalização do
absorvedor proposto em 3.2. (b) Ajuste por um polinômio de grau 3. As porcentagens mostradas
na legenda correspondem aos níveis de cristalização do GeTe
Figura 36 - Variação da Largura total de meio máximo (FWHM) em função da cristalização do
GeTe
Figura 37 - Dependência da absorção para ângulos incidentes de 0 ° a 45 ° em polarização modo
TM na faixa de 1100 a 1900nm (a) Fase Amorfa (m = 0%), (b) m = 20% , (c) m = 40% , (d) m =
60%, (e) m = $80%$, e (f) Fase Cristalina (m = $100%$)
Figura 38 - Dependência da absorção para ângulos incidentes de 0 ° a 45 ° em polarização modo
TM na faixa de 1100 a 1900nm (a) Fase Amorfa (m = 0%), (b) m = 20% , (c) m = 40% , (d) m = 60% , (e) m = 80% , (f) Fase Crietaline (m = 100%)
60%, (e) m = 80%, e (f) Fase Cristalina (m = 100%)
Figura 39 - Mapa de absorção em relação à espessura da camada metálica de Ouro (hAu)
varredura para (a) Fase Amorfa, (b) Fase Semicristalina e (c) Fase Cristalina
Figura 41 - Gráfico de superfície da função multivariável da cristalização com a espessura
metálica
Figura 40 - Dependência da absorção com à largura da camada metálica wAu na faixa de 1100 a
1900nm (a) Fase Amorfa, (b) Fase Semicristalina (m = 25%) e (c) Fase Semicristalina (m =
50%),(d) Fase Semicristalina (m = 75%) e (e) Fase Cristalina

Figura 42 - Dependência da absorção com a espessura da camada dielétrica hSi3N4 na faixa de
1100 a 1900nm (a) Fase Amorfa, (b) Fase Semicristalina (m = 25%) e (c) Fase Semicristalina
(m = 50%), (d) Fase Semicristalina $(m = 75%)$ e (e) Fase Cristalina69
Figura 43 - Dependência da absorção com à largura do material de mudança de fase hGeTe na
faixa de 1100 a 1900nm (a) Fase Amorfa, (b) Fase Semicristalina (m = 25%) e (c) Fase
Semicristalina (m = 50%),(d) Fase Semicristalina (m = 75%) e (e) Fase Cristalina71
Figura 44 – Dependência linear dos picos da Figura 43 (a), (b), (c), (d), e (e) com a espessura da
camada GeTe72
Figura 45 - Dependência da absorção com à largura do Substrato de Silício h _{Substrato} na faixa de
1100 a 1900nm (a) Fase Amorfa, (b) Fase Semicristalina (m = 25%) e (c) Fase Semicristalina
(m = 50%), (d) Fase Semicristalina $(m = 75%)$ e (e) Fase Cristalina
Figura 46 - Dependência linear dos picos da Figura 45 (a), (b), (c), (d), e (e) com a espessura da
camada do substrato dielétrico74
Figura 47 - Dependência da absorção com periodicidade p na faixa de 1100 a 1900nm (a) Fase
Amorfa, (b) Fase Semicristalina (m = 25%) e (c) Fase Semicristalina (m = 50%),(d) Fase
Semicristalina (m = 75%) e (e) Fase Cristalina
Figura 48 - Dependência linear dos picos da Figura 47 (a), (b), (c), (d), e (e) periodicidade da
estrutura
Figura 49 - Distribuição espacial do a) Campo Elétrico; b) Densidade de Corrente e c) Campo
magnético do absorvedor 3.2 no comprimento de onda ressonante em 1550 nm e m=82,5% 77
Figura 50 - Distribuição espacial do a) Campo Elétrico; b) Densidade de Corrente e c) Campo
magnético do absorvedor 3.2 no comprimento de onda ressonante em 1550 nm com fase do
GeTe amorfa78

LISTA DE TABELAS

Γabela 1 - Dados técnicos e resultados da absorção do absorvedor híbrido proposto 3.1 49
Γabela 2 - Linearização do pico de ressonância do absorvedor híbrido proposto em 3.1 com a
espessura do GeTe5
Гabela 3 - Parâmetros geométricos das estruturas analisadas
labela 4 - Linearização dos picos ressonantes do absorvedor proposto em 3.2 com a espessura
do GeTe70
Γabela 5 - Linearização dos picos ressonantes do absorvedor proposto em 3.2 com a espessura
la camada do substrato dielétrico
Γabela 6 - Linearização dos picos ressonantes do absorvedor proposto em 3.2 com a
periodicidade da estrutura

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

PCM's Materiais com mudança de fase

MMs Metamateriais

nm nanômetros

SPPs Polaritons Plasmons de Superfície

FEM Método dos Elementos Finitos

PML Camadas perfeitamente combinadas

MPA Material Perfeitamente Absorvedor

FPR Ressonância de Fabry-Perot

THz Tera-hertz

IR Infravermelho

μm Micrômetros

SLRs Ressonância de superficie de rede

FWHM Largura Total da metade do máximo

LSPs Plasmons de Superficie Localizados

PSPs Propagação de Plasmons de Superficie

TE Modo transversal Elétrico

TM Modo transversal Magnético

ns nanossegundos

mW miliwatts

MD Modulação por comprimento de onda

ER Razão e extinção

Sumário

I. Capítulo	14
1 – Introdução	14
1.1 – Objetivo do Trabalho	15
1.1.1 – Objetivos específicos	16
1.1.2 – Metodologia	16
1.2 – Estado da Arte	16
1.3 – Organização da Dissertação	17
II. Capítulo	18
2.1 – Materiais com mudança de fase (PCM's)	18
2.2 – Absorvedores plasmônicos e metamateriais	22
2.3 – Formulação Matemática e Modelagem Computacional	28
2.4 – Constantes ópticas dos materiais	33
2.4.1 – Modelo de dispersão de Drude-Lorentz para metais	34
2.4.2 – Teoria do meio efetivo em materiais com mudança de fase	36
2.5 – Absorvedores baseados em materiais com mudança e fase	37
2.5.1 – Absorvedor plasmônico sintonizável usando uma matriz de nanofenda padronizada em uma camada de PCM em um ressonador de Fabry-Perot	
2.5.2 – Absorvedores plasmônicos perfeitos, seletivos de comprimento de ono sintonizáveis e comutáveis baseados em PCM Ge ₂ Sb ₂ Te ₅	
2.5.3 – Filtro de IR não volátil, reconfigurável e de banda estreita baseado e ressonância de superfície de rede com Ge ₂ Sb ₂ Te ₅	
III. Capítulo	46
3.1 – Absorvedor Híbrido de mudança fase baseado em um nanorressonad plasmônico – Simulações 2D	
3.2 – Projeto de absorvedor plasmônico reconfigurável de banda estreita utilizando camada de material com mudança de fase – Simulações 3D	57
IV. Capítulo	79
4.1 – Conclusões	
4.2 – Sugestões para Propostas futuras	80
4 3 – Pubicações associadas à dissertação	80

I. CAPÍTULO

1 – Introdução

Com a utilização de materiais de mudança de fase em circuitos elétricos e ópticos deu-se início a uma ampla inovação para aplicações em dispositivos plasmônicos e metamateriais, incluindo armazenamento de dados ópticos regraváveis, metassuperfícies e dispositivos optoeletrônicos. Os Materiais com mudança de fase são elementos utilizados industrialmente em memórias eletrônicas regraváveis, além de serem também utilizadas em sistemas optoeletrônicos convencionais como DVD e Bluray regraváveis. As mídias destes sistemas são consideradas como um tipo de memória óptica [1].

Os PCM's mais frequentemente utilizados na literatura são ligas de calcogenetos formados por Germânio (Ge), Antimônio (Sb) e Telúrio (Te) e são comumente adotados como ligas de GST. Estes materiais são não-voláteis, possuem confiável retenção de dados e respondem a estímulos externos (ópticos e térmicos) [2-5].

Sua principal propriedade é que as excitações térmicas e elétricas ou pulsos ópticos modificam sua fase de amorfa para cristalina [6] e como consequência, ocasiona uma grande mudança em seus índices de refração [7]. Eles são excelentes para aplicações em dispositivos baseados em metamateriais, nanoplasmônicos e nanofotônicos [8-9].

Metassuperfícies de mudança de fase que dependem das propriedades ópticas comutáveis dos PCMs desencadearam muitas aplicações encorajadoras, incluindo absorvedores perfeitos comutáveis, emissores térmicos, direcionamento do feixe e exibições coloridas. A exploração de novos PCM's com baixas perdas e respostas ópticas superiores de fato está acelerando o desenvolvimento de tecnologias das metassuperfícies de mudança de fase. Isso pode ser evidenciado pela criação das ligas de calcogenetos de GST, que permite transparência e baixa perda em uma faixa de banda extremamente ampla com um grande contraste óptico [10-12].

Apesar de utilizado há muito tempo em escala industrial, os PCM's têm recebido enorme atenção recentemente devido ao seu potencial de aplicação em chaveamento totalmente óptico. Um dispositivo capaz de modificar de estado a partir de um sinal

óptico, de maneira análoga à como uma corrente de base modifica o estado de um transistor é um dos objetivos intensamente buscados. Para exemplificar este interesse, este é objeto de investimentos milionários na União Europeia em um projeto que visa implementar e utilizar tais dispositivos em sistemas neuromórficos [13]. Em perspectivas de longo prazo, novas propostas e demonstrações iniciais surgiram para explorar as propriedades ópticas do GST para aplicações de modulação dinâmica de luz. Ao utilizar a diferença nas propriedades ópticas entre diferentes fases, os pesquisadores desenvolveram moduladores de luz reconfiguráveis baseados em GST [14], limitadores ópticos [15], chaves ópticas [16] e refletores de polarização [17].

Embora o estudo dos PCM's tenha sido amplamente pesquisado e analisado na literatura recentemente, ainda existe a necessidade de busca por novas estruturas que possam ser capazes de manter uma elevada absorção em uma grande faixa espectral. Uma opção viável seria controlar os picos de ressonância variando os estados metaestáveis de cristalização do material com mudança de fase. Nesta dissertação, inicialemente será realizado uma breve revisão bibliográfica sobre o estudo dos PCM's e das estruturas absorvedoras eletromagnéticas plasmonicas, enfocando conceitos básicos e condições para a geração de ressonâncias em campos incidentes.

1.1- Objetivo do Trabalho

O objetivo deste trabalho é por meio de análise bibliográfica e simulações numéricas, estudar o comportamento absorvedor em estruturas compostas por metais, dielétricos, e materiais com mudança de fase numa faixa espectral especificada e, utilizando-se de uma relação entre as fases (amorfa e cristalina), sintonizar tais respostas.

1.1.1 – Objetivos específicos

Os objetivos específicos são:

- Compreensão do comportamento físico das estruturas;
- Compreensão das técnicas de simulação;
- Realizar uma revisão bibliográfica de temas essenciais à pesquisa;
- Proposta de novas estruturas reconfiguráveis otimizadas e aplicáveis;
- Documentação e publicação dos resultados alcançados.

1.1.2 – Metodologia

As estruturas são simuladas numericamente através de algoritmos eficientes, que resolvem as equações de Maxwell no domínio da frequência/comprimentos de onda. Será utilizado o software COMSOL licenciado, que utiliza o método dos elementos finitos. Este software é reconhecido pela comunidade científica pela sua capacidade de propiciar resultados consistentes com os experimentais. Adicionalmente a este software e visando aumentar a qualidade dos dados gerados e, posteriormente a publicação dos resultados, ferramentas adicionais de pós-processamento serão utilizadas.

1.2- Estado da Arte

Em [18] um Material Perfeitamente Absorvedor dinâmico com capacidade de ajuste ativa foi alcançado usando o PCM como uma camada dielétrica. Os espectros de refletância e absorbância para o metadispositivo, híbrido e camada única de PCM foram simulados na incidência normal. A refletância do MPA era extremamente baixa em todo o espectro visível devido ao casamento de impedância com o vácuo. Consequentemente, a absorbância foi máxima em toda a faixa visível. Absorção quase perfeita de 96,8% e 96,2% foi obtida em comprimentos de onda de 610 nm e 870 nm, respectivamente. Em [19] foi proposta e fabricada uma estrutura por meio do novo conceito de metassuperfícies híbridas, em que a reconfigurabilidade é alcançada incorporando inclusões de subcomprimento de onda de materiais de mudança de fase de calcogeneto dentro do corpo de nanorressonadores de silício por posicionamento estratégico de uma camada ultrafina e comutação reversível de seu estado de fase. Em [20] uma cavidade óptica plana de múltiplas camadas usando Telureto de Germânio (GeTe) para produzir

cores reflexivas altamente ajustáveis foi analisada. Um absorvedor planar híbrido sintonizável baseado em três camadas PCM-Dielétrico-Metal foi demonstrado experimentalmente em [21] e apresentou grande modulação óptica de uma reflexão forte ~ 80% e uma absorção perfeita. Um híbrido planar reconfigurável utilizando PCM foi analisado em [22], a estrutura analisada teórica e experimentalmente permitiu o controle da absorção em todo o espectro visível, o estudo proposto abre um amplo caminho para o desenvolvimento de tecnologias de display não volátil e seleção de materiais. No próximo capítulo serão apresentadas estruturas reconfiguráveis baseadas em materiais com mudança de fase que serviram de fundamentação básica para proposta de novas estruturas.

No próximo capítulo, na seção 2.3, serão apresentadas estruturas absorvedoras baseadas em materiais com mudança de fase, as quais fundamentaram as ideias de pesquisa para a realização de projetos com duas estruturas reconfiguráveis elegíveis.

1.3- Organização da Dissertação

Esta dissertação está dividida em quatro capítulos da seguinte forma: no primeiro capítulo é realizada uma introdução sobre o estudo dos materiais com mudança de fase em absorvedores e os objetivos gerais e específicos, o capítulo 2 dedica-se à revisão bibliográfica, Modelagem computacional e formulação Matemática e aos aspectos geométricos das estruturas estudadas, analisadas e propostas, o capítulo 3 é reservado à análise de comportamento da absorção e seus resultados obtidos e no capítulo 4 a conclusão do trabalho é apresentada junto com as contribuições obtidas e as sugestões para propostas futuras.

II. CAPÍTULO

2.1 – Materiais com mudança de fase (PCM's)

Os PCM's são materiais que, através de estímulos externos, sejam eles térmicos, elétricos ou totalmente ópticos, comutam sua fase de amorfa para cristalina e vice-versa, modificando consequentemente suas propriedades ópticas. A existência de uma transição reversível entre um altamente estado resistivo e um estado condutivo induzido pela aplicação de um campo elétrico foi relatado pela primeira vez em 1968 por Ovshinsky [23] em um material de calcogeneto contendo Si, Ge, As e Te. Seguindo este relatório pioneiro, ligas localizadas na linha pseudo-binária conectando GeTe e Sb₂Te₃ no diagrama de fase ternário Ge-Sb-Te (Ligas GST) apresentaram uma cristalização muito rápida e uma pronunciada mudança de refletividade óptica entre a fase amorfa (estado de baixa refletividade) e a fase cristalina (estado de alta refletividade) [24, 25]. As últimas décadas demonstraram uma tendência de pesquisa dos calcogenetos de PCM's para passar da aplicação prática no armazenamento de dados ópticos para a memória elétrica com mudança de fase devido à sua velocidade de comutação, eficiência energética e escalabilidade [23-25].

Em materiais com mudança de fase, as propriedades da fase amorfa são divergentes da cristalina. Isto deve-se a forte ligação ressonante sofrida pelo estado cristalino, enquanto que o estado amorfo sofre mudanças para ligação covalente e consequentemente acentua notadamente a diferença entre suas propriedades ópticas. As duas fases dos materiais de mudança de fase de calcogenetos diferem significativamente em suas propriedades ópticas e elétricas. Ambas as partes de suas permissividades (real e imaginária) variam amplamente na faixa de energia de 0,05 a 3 eV. Em todos exemplos de PCM's de calcogenetos apresentados nas Figura 1 e 2, as funções dielétricas das fases cristalina e amorfa diferem amplamente [26].

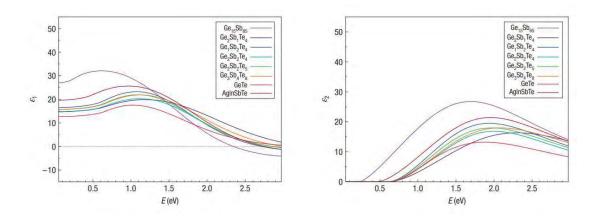


Figura 1 - Funções dielétricas $\varepsilon_1(\omega)$ e ε_2 (ω) como propriedades ópticas de PCMs amorfos. [26]

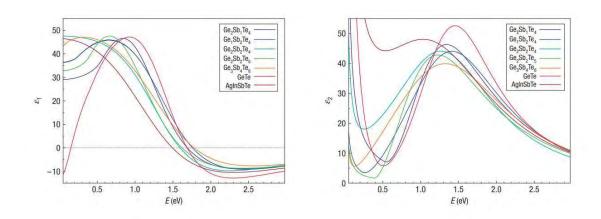


Figura 2 - Figura 2- Funções dielétricas $\varepsilon_1(\omega)$ e ε_2 (ω) como propriedades ópticas de PCM's cristalinos. [26]

A Figura 3 mostra esquematicamente a aplicação de um pulso de energia longa e moderada ao PCM estado amorfo. O material é aquecido até sua temperatura de transição vítrea, que conduz a transição de fase para seu estado cristalino. Por outro lado, a aplicação de um pulso de energia curta e alta aquece o PCM cristalino acima de sua temperatura de fusão e, em seguida, resfria-o repentinamente, produzindo o PCM amorfo pela extinção de fusão do PCM cristalino. Uma taxa de resfriamento típica de 1°C / ns é necessária para a temperatura de fusão da maioria dos PCM's baseados em ligas de calcogenetos de GST [27]. Possui temperatura de cristalização de 160 ° C e temperatura de fusão de 600 ° C, por isso é utilizado em memórias eletrônicas rápidas e reproduzíveis devido à sua estabilidade térmica, velocidade de chaveamento e reescrita [28]. Usando pulsos de laser de longa (450 ns) e baixa potência (72 mW), separados e distribuídos aleatoriamente, o filme fino de GST foi cristalizado de forma localizada por aquecê-lo acima da temperatura de transição vítrea. Cada área

cristalizada possui uma forma elíptica, cujo o tamanho pode ser ajustado alterando os parâmetros do laser (potência do pulso, duração do pulso e taxa de repetição) [29].

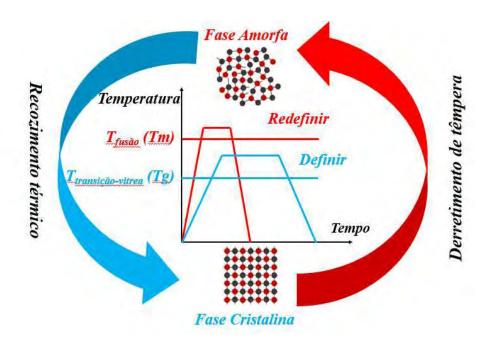


Figura 3 - Ilustração esquemática de transição de fase entre os estados amorfo e cristalino [30] adaptado

Os PCM's de calcogenetos são principalmente elementos químicos no grupo 16 (VI) da tabela periódica, como selênio (Se) e telúrio (Te), portanto, este termo é mais normalmente reservado para sulfetos, selenetos e teluretos, em vez de óxidos [30].

O diagrama de fase mostrado na Figura 4 a ajuda a classificar diferentes PCMs com base em ligas Ge – Sb – Te. GeTe foi o primeiro material de PCM baseado em calcogeneto a mostrar uma cristalização relativamente rápida com um grande contraste óptico. Posteriormente, várias ligas GST como Ge₁Sb₄Te₇, Ge₂Sb₂Te₅ e Ge₁Sb₂Te₄ foram identificadas ao longo de uma linha pseudo-binária que conecta os compostos GeTe e Sb₂Te₃. Movendo-se de GeTe para Sb₂Te₃ na linha pseudo-binária, a velocidade de cristalização aumenta, a temperatura de transição vítrea e a temperatura de fusão diminuem e a retenção de dados (isto é, a retenção do estado amorfo) diminui. Uma oportunidade adicional para personalizar as propriedades dos compostos na linha de ligação GeTe-Sb₂Te₃ é dopá-los com elementos como O, N, Si, etc. [31].

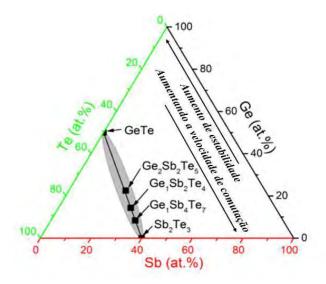


Figura 4 - Diagrama de fase do sistema Ge - Sb - Te [31] Adaptado

A estrutura cristalina do GeTe, material com mudança de fase que será utilizado neste trabalho (Figura 5-a), é uma configuração do tipo sal rochoso distorcida em formato romboédrico (grupo espacial R3m) com átomos de Ge e Te, que formam subredes cúbicas centradas na face (fcc) à temperatura ambiente [32-34]. No estado cristalino, o arranjo de átomos exibe uma coordenação octaédrica (sêxtupla) com três distâncias de ligação mais curtas (0,2843 nm) e três mais longas (0,3158 nm). Cada átomo possui três elétrons de valência que se esforçam para formar seis ligações covalentes com os vizinhos mais próximos. No entanto, o número de elétrons de valência é insuficiente para cumprir o estado de ligação covalente. Os elétrons são deslocalizados nesta rede ligada ressonantemente, levando a um aumento significativo da polarizabilidade eletrônica. Em contraste, após a transição estrutural do estado cristalino para o amorfo, as posições do átomo Ge exibem a troca de coordenação octaédrica para tetraédrica por meio da ruptura das ligações de ressonância Ge-Te mais longas e fortalecimento de ligações covalentes mais curtas (Figura 5-b). A estrutura amorfa do GeTe pode ser representada por um modelo de rede covalente aleatório [35].

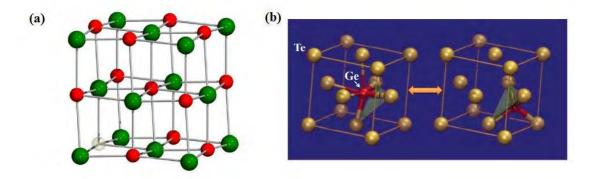


Figura 5 - a) Estrutura cristalina do GeTe romboédrico - As esferas vermelha, verde e branca simbolizam átomos de Ge, Te e vacâncias, respectivamente e b) Mecanismo de comutação estrutural típico de átomos de Ge em GST / GeTe cristalino e amorfo [36]

2.2 – Absorvedores plasmônicos e metamateriais

As primeiras pesquisas sobre absorvedores eletromagnéticos remontam a 1902, quando Wood observou as quedas anômalas nos espectros de reflexão de grades metálicas sob iluminação de uma fonte de luz branca [37]. Esses tipos de absorvedores metálicos são constituídos por matrizes de elementos metálicos com periodicidade da ordem do comprimento de onda incidente nas frequências ópticas [38-41]. Eles absorvem luz principalmente devido à excitação de polaritons de plasmon de superfície (SPPs), que são oscilações coletivas de elétrons livres apoiados na interface entre o metal e o dielétrico [42-43]. Devido à excitação de SPPs, a energia incidente pode ser firmemente presa na região do campo próximo de modo que a luz incidente possa ser totalmente absorvida em certos comprimentos de onda pelas estruturas metálicas / dielétricas com geometrias especialmente projetadas. Existem vários tipos de configurações sendo usados como absorvedores, como grades lamelares [44], ranhuras convexas [45], espaços vazios esféricos [46] e arranjos de orifícios [46-48]. Esses absorvedores são feitos de metais nobres e associados a plasmons que contêm fenômenos físicos associados a SPPs planos ou localizados [49-50]. Metamateriais são montagens artificiais de elementos estruturados de tamanho de sub-comprimento de onda (muito menor do que o comprimento de onda da luz incidente) [51]. Nas frequências ópticas, os metamateriais formados de estruturas metálicas de sub comprimento de onda são às vezes chamados de metamateriais plasmônicos quando a

excitação de modos SPP's localizados é essencial no processo de absorção de luz [52-53]. A maioria dos metais são opacos em frequências abaixo do ultravioleta porque a parte real de sua constante dielétrica é negativa, impossibilitando a propagação de ondas eletromagnéticas transversais. Consequentemente, uma onda eletromagnética incidente em uma interface metal-dielétrica do lado do dielétrico é quase totalmente refletido, sendo parcialmente absorvido devido a uma parte imaginária diferente de zero e positiva da permissividade dielétrica responsável pela perda ôhmica. No entanto, pode-se excitar um modo eletromagnético ligado a superfície, propagando-se ao longo de uma interface metal-dielétrica com a constante de propagação excedendo àquelas ondas que se propagam no dielétrico. Este modo, chamado de polariton de plasmon de superfície (SPP), apresenta um campo eletromagnético de polarização que decai exponencialmente em ambos os meios [42,49]. Na Figura 6, os modos SPP suportados por uma interface metal-dielétrica podem ser vistos como consistindo em duas ondas evanescentes decaindo exponencialmente em ambos os meios vizinhos. Uma vez que os componentes do campo tangencial são contínuos em toda a interface, o campo elétrico SPP pode ser escrito como segue:

$$E(z > 0) = (E_x^0, 0, E_z^d) e^{i(k_{SPP} - \omega t)} e^{i(k_{SPP} - \omega t)} e^{i(k_{SPP} - \varepsilon_d k_0^2)}$$
(1)

$$E(z<0) = (E_x^0, 0, E_z^m) \cdot e^{i(k_{SPP} - \omega t)} \cdot exp(z\sqrt{k_{SPP} - \varepsilon_m k_0^2})$$
 (2)

onde E_x^0 e $E_z^{d(m)}$ são as amplitudes dos componentes do campo elétrico correspondentes no dielétrico (metal) meio, ε_d e ε_m são as permissividades do dielétrico e do metal, respectivamente, k_0 é o número de onda da luz incidente, em que $k_0 = \frac{2\pi}{\lambda}$ e λ é o comprimento de onda da luz incidente e $k_{SPP} = k_x$ é a propagação do modo complexo constante ainda a ser determinada. Uma vez que os componentes do campo elétrico devem satisfazer a lei de Coulomb $\nabla .E = 0$, os componentes de campo normais, que são perpendiculares à interface, podem estar relacionados ao tangencial:

$$E_z^d = \frac{ik_{SPP}}{\sqrt{k_{SPP}^2 - \varepsilon_d k_0^2}} E_x^0 \tag{3}$$

$$E_z^m = -\frac{ik_{SPP}}{\sqrt{k_{SPP}^2 - \varepsilon_m k_0^2}} E_x^0 \tag{4}$$

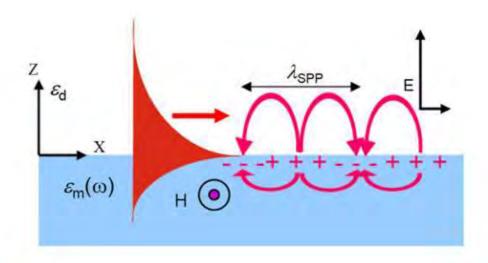


Figura 6 - Representação esquemática de uma distribuição de intensidade do campo magnético e componentes do campo de um SPP suportada por uma interface metal-dielétrica. [54]

Utilizando as condições de contorno apropriadas para os componentes normais do campo elétrico $E_z^d \varepsilon_d = \varepsilon_m E_z^m$, resultando na relação de dispersão do SPP:

$$k_{SPP}(\omega) = \frac{\omega}{c} \sqrt{\frac{\varepsilon_m(\omega) \cdot \varepsilon_d}{\varepsilon_m(\omega) + \varepsilon_d}}$$
 (5)

As condições necessárias para a existência de um SPP podem ser obtidas do requisito de que as expressões de raiz quadrada nas equações (1), (2) e (5) possuem uma parte real positiva, resultando em:

$$Re\left\{\varepsilon_{d}.\varepsilon_{m}(\omega)\right\}<0\tag{6}$$

$$Re\left\{\varepsilon_{d}+\varepsilon_{m}(\omega)\right\}<0\tag{7}$$

$$Re\left\{\varepsilon_{m}(\omega)\right\} < -\varepsilon_{d}$$
 (8)

Para a maioria dos metais e dielétricos, esta condição é satisfeita na parte de comprimento de onda do visível ao infravermelho longo. A parte real da constante de propagação determina o comprimento de onda $\lambda_{SPP}=\frac{2\pi}{Re(k_{SPP})}$ que é sempre menor do que o comprimento de onda da luz no dielétrico $\lambda_{SPP}<\lambda=\frac{\lambda_0}{\sqrt{\epsilon_d}}$ enquanto o comprimento de propagação SPP (intensidade) é $L_{SPP}=\frac{1}{\mathrm{Im}(2k_{SPP})}$.

Usando a relação de elétrons livres de Drude, aproximação para a permissividade do metal:

$$\varepsilon_m(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \tag{9}$$

sendo ω_p a frequência do plasma, onde é possível operar nas dependências de frequência das características do SPP no limite sem perdas [42,49,55].

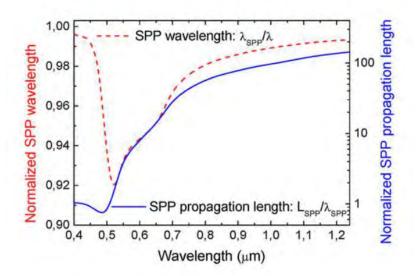


Figura 7 - Comprimento de onda de polariton de plasmon de superfície normalizado (SPP) e comprimento de propagação calculado para um ouro-ar interface usando a permissividade de ouro [56] como funções do comprimento de onda da luz

A Figura 7 mostra os comprimentos de onda de SPP e os modos de propagação de SPP. Na prática, o amortecimento SPP causado por perdas ôhmicas (ou seja, amortecimento das oscilações eletrônicas associado ao SPP) é um fator muito importante, limitando tanto a extensão da diminuição do SPP comprimento de onda (para comprimentos de onda curtos) e o comprimento de propagação do SPP. A última circunstância, ou seja, um comprimento de propagação de SPP bastante limitado, representa um problema sério ao desenvolver com base em SPP componentes de guia de ondas para aplicações práticas.

Para aplicações práticas, os absorvedores plasmônicos e de metamateriais podem ser divididos em dois tipos: banda estreita e de banda larga [57]. O primeiro pode facilmente encontrar aplicações em sensores lineares ou não lineares cobrindo regiões visíveis e infravermelhas [58-61]. Para os absorvedores de banda larga são encontradas

aplicações como fotodetectores [62], emissores térmicos [63-64], fotovoltaicos [65-66] e geração de pulsos ultracurtos [67]. Os absorvedores de banda larga são sempre necessários.

A Figura 8 apresenta um absorvedor de metamaterial plasmônico [68] baseado em uma matriz periódica de nanocubos de Titânio-Sílica diretamente conectados à uma superfície de alumínio. Como resultado das simulações, apresentou uma absorção em uma grande faixa espectral propiciando o estudo de confinamento da luz no absorvedor, que eles atribuíram ao SPP.

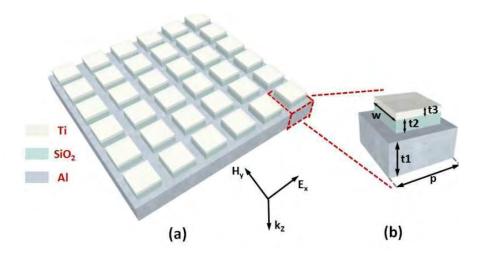


Figura 8 - Diagrama esquemático do absorvedor de metamaterial de banda larga proposto. (b) Célula unitária do absorvedor [68].

O espectro de absorção do absorvedor proposto é ilustrado na Figura 9 é observado a partir do espectro que o absorvedor exibe uma alta absorção acima de 90% em uma ampla faixa de comprimento de onda de 354 nm a 1066 nm, indicando uma largura de banda de 90% de 712 nm de visível ao infravermelho próximo. A absorbância média sobre esta banda é calculada como menor que 97% e um absorbância quase perfeita (mais de 99%) é alcançada de 804 nm a 921 nm. O pico a absorção é obtida até 99,8% em torno de 886 nm com uma largura de banda de 26 nm.

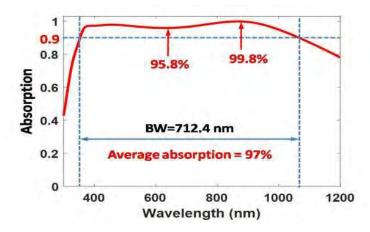


Figura 9 - Espectro de absorção da estrutura [68].

Na Figura 10, os autores apresentaram as distribuições espaciais de densidade de corrente (Figura 10 a-d), dos campos elétrico (Figura 10 e-h) e campo magnético (Figura 10 i-l) em vários comprimentos de onda ressonantes (isto é, 380 nm, 470 nm, 603 nm e 890 nm). Em geral, eles atribuíram o confinamento da luz aos modos SPP, alternativamente com os LSP e PSP e também devido ao baixo fator de qualidade e ressonância induzida por FPR.

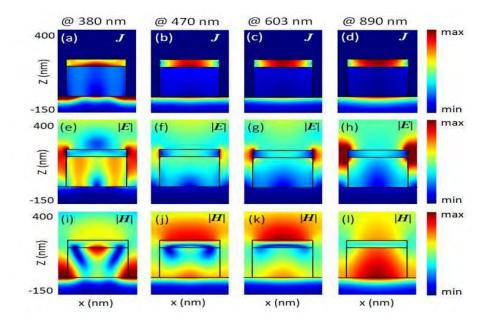


Figura 10 - (a) - (d) Densidade de corrente J (linha superior, barra de cores no plano x-z), (e) - (h) distribuições de campo elétrico |E| (barra de cores no plano x-z) e (i) - (l) campo magnético |H| [68].

2.3 – Formulação Matemática e Modelagem Computacional

A propagação de ondas eletromagnéticas em meios materiais e no vácuo é obtido através da solução das Equações de Maxwell com as condições de contorno devidas. Sua solução analítica, embora exata, pode ser obtida apenas em situações de pouca complexidade [69]. Nesta dissertação foram utilizadas estruturas compostas por metais, dielétricos e PCM's com propriedades físicas divergentes, inviabilizando assim a condição de solucionar as Equações de Maxwell analiticamente. Como alternativa, métodos numéricos computacionais são utilizados com o objetivo de alcançar robustez em seus resultados finais, ainda que numa solução aproximada [70]. O Método dos Elementos Finitos (FEM) é uma técnica bem estabelecida em que cálculos eletromagnéticos que são descritos através de equações diferenciais parciais. Podem ser formulados como minimização funcional. O termo 'elemento finito' deriva do procedimento em que uma estrutura física contínua é dividida em elementos pequenos, mas de tamanho finito. Os pontos finais ou pontos de canto do elemento são chamados de nós. Nestes pontos, funções desconhecidas devem ser determinadas. Para um problema linear, um sistema de equações algébricas deve ser resolvido. Valores dentro de elementos finitos podem ser recuperados usando valores nodais. O Método dos Elementos Finitos pode lidar com geometrias e materiais complexos [71-72]. O FEM surgiu na década de 40 e com o passar dos anos e devido aos avanços computacionais, têm sido amplamente utilizados [73], sendo ele uma modificação do Método de Ritz [74].

Para a solução de um problema utilizando o FEM inicialmente deve se seguir as seguintes etapas:

- Realizar uma definição geométrica da estrutura;
- Definir as equações que regem o problema computacional;
- Determinar as propriedades físicas do meio, neste caso para este caso são ópticas;
- Utilização das condições de limite e de período;
- Geração e refinamento de malhas para a discretização do modelo.

O discretização trata-se da subdivisão do domínio original em uma série de subdomínios menores e podem ser de uma forma geométrica qualquer, tais como

triângulos, retângulos, quadriláteros, pentágonos, entre outros. Também podem-se misturar subdomínios de formas geométricas distintas, tais como retângulos e triângulos. A forma mais simples de elemento utilizado na prática triangular. Ele pode aproximar domínios de formas quaisquer com precisão considerável. Em cada elemento são definidos pontos característicos, nos quais a solução será determinada; a escolha das grandezas a determinar também determina parcialmente o tipo de função de aproximação que pode ser utilizado. No caso mais simples de elementos triangulares são escolhidos os três vértices dos mesmo como pontos característicos, os quais são chamados de nós [75].

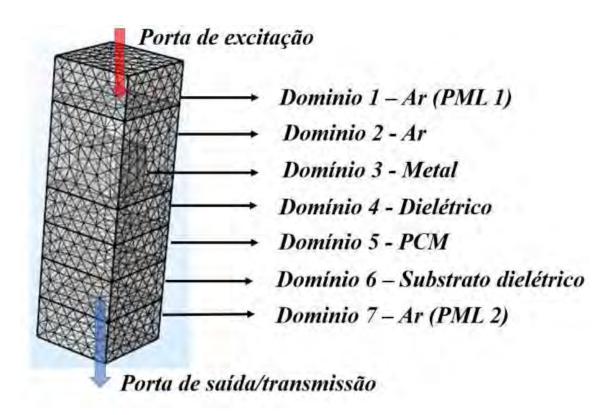


Figura 11 - Discretização da célula unitária de um absorvedor em 3D

A Figura 11 mostra uma das estruturas que será analisada nesta dissertação na etapa de discretização. Camadas perfeitamente combinadas (PML) foram colocadas atrás de cada porta para absorver a radiação que é refletida e transmitida do dispositivo, evitando reflexos internos. Baseado em formadas triangulares, sendo o tamanho mínimo de cada elemento 4 nm e o máximo, 55 nm. A malha completa consiste em 8501 elementos de domínio, 2096 elementos de contorno e 288 elementos de borda. A

geometria finalizada possui 7 domínios, 37 limites, 64 arestas e 36 vértices, resultando em 59495 graus de liberdade a serem solucionados computacionalmente.

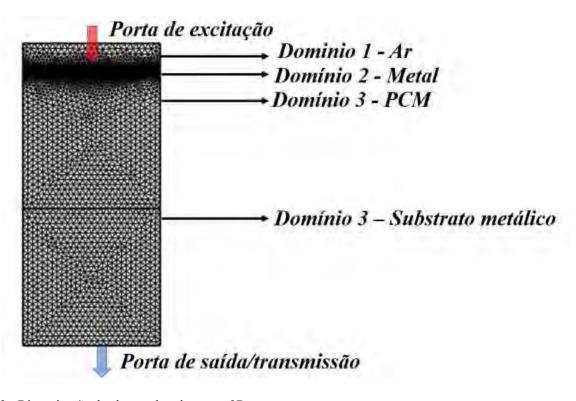


Figura 12 - Discretização do absorvedor planar em 2D

A Figura 12 também analisada em etapa de processamento, e por ser mais simples de ser caracterizada e projetada, apresentou uma quantidade muito superior de elementos em relação Figura 11 sem a necessidade de um custo computacional tão elevado quanto. A malha completa desta geometria consiste em 7004 elementos de domínio e 485 elementos de limite. A geometria finalizada possui 4 domínios, 13 limites e 10 vértices. Baseado em formas triangulares, sendo o tamanho mínimo de cada elemento 0.0331 nm e o máximo, 8.82 nm resultando em 34696 graus de liberdade para a solução. O número de elementos, varia de acordo com a alteração nas dimensões geométricas. As condições de limite e espalhamento foram definidas de forma a garantir uma resposta ideal para que o objetivo fosse alcançado. O software permite que o projetista determine ao seu modo, definir a malha de manualmente ou através dos padrões estabelecidos no COMSOL. Em geral a precisão da solução aumenta com o número de elementos utilizados, havendo, no entanto, um limite para o número de elementos, a partir do qual os erros de arredondamento se acumulam de tal forma que um aumento do número de elementos não traz uma melhora na precisão. Em

contrapartida, a precisão da solução também é dependente tipo do da função de aproximação utilizada e do tipo de elemento aplicado.

As Equações de Maxwell podem ser descritas na forma diferencial [56] como seguem:

$$\vec{\nabla}\vec{D} = \rho \tag{10}$$

$$\vec{\nabla}\vec{B} = 0 \tag{11}$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \tag{12}$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{H} = \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} + \vec{J} \tag{13}$$

em que (10), (11), (12) e (13) que são, respectivamente, a Lei de Gauss (Eletrostática), a Lei de Gauss (Magnetostática), a Lei de Faraday e a Lei de Ampère, e onde \vec{E} e \vec{H} são respectivamente as intensidades do campo elétrico e magnético; \vec{D} e \vec{B} representam a densidade de fluxo elétrico e a densidade de fluxo magnético, respectivamente e \vec{J} e ρ a densidade de corrente elétrica e carga elétrica.

Em adição às Equações de Maxwell, os vetores \vec{B} e \vec{J} relacionam-se através de três formas constitutivas:

$$\vec{D} = \varepsilon \vec{E} \tag{14}$$

$$\vec{B} = \mu \vec{H} \tag{15}$$

$$\vec{J} = \sigma \vec{E} \tag{16}$$

As constantes, μ e σ são respectivamente a permissividade dielétrica, a permeabilidade magnética e a condutividade elétrica e representam as propriedades físicas do meio. Admitindo que os campos elétrico e magnético oscilam harmonicamente com uma frequência angular ω , onde

$$\omega = 2\pi f \tag{17}$$

sendo f a frequência da onda incidente. As equações (12) e () podem ser expressas em domínio da frequência, ou seja fazendo com que tais equações sejam independentes do

tempo, logo a substituição do termo $\frac{\partial}{\partial t}$ por $j\omega$, sendo assim as equações (12) e (13) utilizando as relações [56] constitutivas (14)14) e () podem ser reescritas como

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} = -j\omega\mu \vec{H} \tag{18}$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{H} = j\omega \varepsilon \vec{E} \tag{19}$$

Nas equações (18) e (19), como \vec{E} e \vec{H} aparecem em ambas, pode-se aplicar o rotacional em ambos os membros de cada uma das equações e fazendo-se uso da identidade vetorial:

$$\vec{\nabla} \times (\vec{\nabla} \times \vec{A}) = \vec{\nabla} (\vec{\nabla} \cdot \vec{A}) - \vec{\nabla}^2 \vec{A} \tag{20}$$

Assim, as equações () e () podem ser reescritas como

$$\vec{\nabla}^2 \vec{E} + k^2 \vec{E} = 0 \tag{21}$$

$$\vec{\nabla}^2 \vec{H} + k^2 \vec{H} = 0 \tag{22}$$

que são as equações de onda dos campos elétricos e magnético de forma desacoplada, em que:

$$k^2 = \omega^2 \mu \varepsilon \tag{23}$$

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} \tag{24}$$

É possível reescrever uma única equação da onda generalizada para qualquer campo U, devido à semelhança:

$$\vec{\nabla}^2 \vec{U} + k^2 \vec{U} = 0 \tag{25}$$

2.4 – Constantes ópticas dos materiais

O índice de refração [56] é um parâmetro fundamental de qualquer material óptico. Normalmente, as equações de onda de Maxwell são a fonte básica para a derivação de importantes propriedades ópticas, definições, fórmulas e conceitos básicos dos materiais. Mas, para um material óptico, o índice de refração, n, é simplesmente definido como a razão da velocidade, c, da onda eletromagnética no vácuo para a velocidade de fase, v, da mesma onda no

$$n = \frac{c}{v} \tag{26}$$

Na prática, os materiais ópticos não são puramente um meio não absorvente, e é frequentemente conveniente definir um índice de refração complexo **n**:

$$\mathbf{n} = n + ik \tag{27}$$

onde k é o coeficiente de extinção ou o índice de absorção (ou parte imaginária do índice de refração complexo). Ambos n e k são dependentes da frequência, e, consequentemente, do comprimento de onda. As partes reais e imaginárias índice de refração complexo são as partes reais e imaginárias da permissividade complexa do material, ou seja:

$$\varepsilon_r = \varepsilon_1 + i\varepsilon_2 = (n^2 - k^2) + 2ink \tag{28}$$

$$n = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\sqrt{\varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^2} + \varepsilon_1^2} \tag{29}$$

$$k = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\sqrt{\varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^2} - \varepsilon_1^2} \tag{30}$$

A conversão de comprimento de onda em energia de qualquer onda eletromagnética é necessária em muitas aplicações optoeletrônicas. Esta equação é dada por:

$$\lambda = \frac{1,2398}{E_g} \tag{31}$$

onde λ é o comprimento de onda em μ m e E_g é a energia em eV.

2.4.1 – Modelo de dispersão de Drude-Lorentz para metais

O modelo de dispersão de Drude-Lorentz para parametrização das constantes dielétricas complexas dos metais será utilizado nas simulações e pode ser expresso da seguinte forma:

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_{Drude}(\omega) + \varepsilon_{Lorentz}(\omega) \tag{32}$$

que separa explicitamente o efeito intrabanda (geralmente referidos como efeitos de elétrons livres) de efeitos interbandas (referidos geralmente como efeitos de elétrons ligados).

A parte intrabanda ε_{Drude} (ω) da constante dielétrica pelo modelo de Drude ou também conhecido como modelo de elétrons livres [76]:

$$\varepsilon_{Drude}(\omega) = 1 - \frac{\Omega_{pi}}{\omega(\omega - i\Gamma_0)}$$
(33)

A parte interbanda $\epsilon_{Lorentz}$ (ω) da constante dielétrica pelo modelo semi-quântico de Lorentz:

$$\varepsilon_{\text{Lorentz}}(\omega) = \sum_{j=1}^{k} \frac{f_j \omega_p^2}{(\omega_j^2 + \omega^2) + i\omega r_j}$$
(34)

onde ωp é a frequência do plasma, k é o número de osciladores com frequência ω j. A força f_j e tempo de vida $1/\Gamma_J$, enquanto Ωp é a frequência de plasma associada às transições intrabanda com oscilador força f_0 e constante de amortecimento Γ_0 .

$$\Omega_{\rm p} = \sqrt{f_0 \omega_{\rm p}} \tag{35}$$

Em [76], Rakic apresentou modelos para funções ópticas em 11 metais que normalmente são usados como espelhos e contatos ópticos em dispositivos optoeletrônicos. Os metais nobres, ouro, prata e cobre, bem como alumínio e berílio e também metais de transição apresentaram boa concordância com os dados experimentais. A Figura 13 a-b mostram os índices de refração e coeficientes de extinção do modelo de Drude-Lorentz que podem ser obtidos em [77].

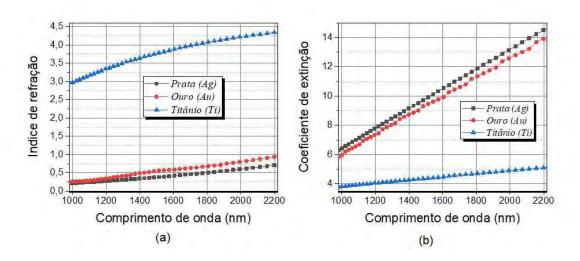


Figura 13 - a) Indice de refração e b) Coeficiente de extinção; dos metais Ag, Au e Ti do modelo Drude-Lorentz [77]

2.4.2 – Teoria do meio efetivo em materiais com mudança de fase

A Teoria do meio efetivo [78] determina a permissividade efetiva do PCM em qualquer nível de cristalização e é definida pela relação Lorentz-Lorenz como:

$$\frac{\varepsilon_{eff}(\lambda) - 1}{\varepsilon_{eff}(\lambda) + 2} = m \cdot \frac{\varepsilon_{c - GeTe}(\lambda) - 1}{\varepsilon_{c - GeTe}(\lambda) + 2} + (1 - m) \cdot \frac{\varepsilon_{a - GeTe}(\lambda) - 1}{\varepsilon_{a - GeTe}(\lambda) + 2}$$
(36)

em que m pode variar de 0 até 1. De acordo com a equação, quando m for 0, a permissividade efetiva será totalmente amorfa e quando for igual a 1, ela será totalmente cristalina. Esta relação que comuta entre os dois estados é denominada de hibridização [79-80]. Para estes diferentes valores de m (0 < m < 1), é possível obter níveis intermediários de cristalização, os quais serão analisados nas estruturas propostas.

As constantes dielétricas dos materiais puramente amorfos e cristalinos ($\varepsilon_{a\text{-}GeTe}$ e $\varepsilon_{c\text{-}GeTe}$) foram extraídos da Figura 2 (a e b) [26]. Suas permissividades relativas podem ser alcançadas através da equação (28) e seus índices de refração (reais e imaginários) através das equações (29) e (30). A Figura 14 a-b mostram os índices em diferentes níveis de cristalização na faixa de comprimentos de onda em que as estruturas serão analisadas.

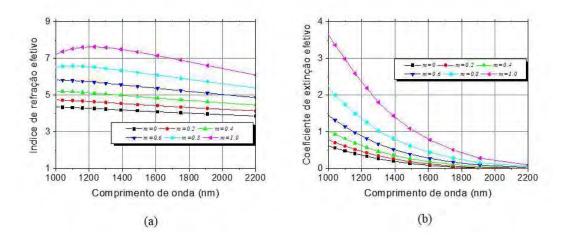


Figura 14 - a) Indice de refração e b) Coeficiente de extinção; efetivos e dependentes do comprimento de onda do GeTe.

2.5 – Absorvedores baseados em materiais com mudança e fase

2.5.1 — Absorvedor plasmônico sintonizável usando uma matriz de nanofendas padronizada em uma camada de PCM em um ressonador de Fabry-Perot

Jeong e Lee [81] propuseram um absorvedor que consiste numa camada inferior de ouro, depositada no substrato de Sìlica (SiO2) como refletor. Então, uma camada dielétrica para a cavidade Ressonante de Fabry-Perót (FPR) é colocada no metal inferior, onde um filme fino de GST é inserido. Por último, como uma camada superior semitransparente, matrizes periódicas são padronizadas na camada de ouro, como pode ser visto em Figura 15.

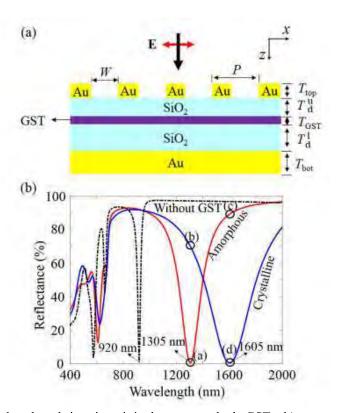


Figura 15 - a) Absorvedor plasmônico sintonizável com camada de GST e b) espectro de reflexão com as camadas de GST em ambas as fases e sem a camada [81]

Em Figura 15 b eles tinham como objetivo minimizar a queda da reflectância na condição FPR e maximizar a mudança de ressonância durante a mudança de fase da camada de GST.

A região dielétrica entre a matriz semitransparente e as camadas submetais pode ser usada como um ressonador de FPR na estrutura proposta. Uma queda acentuada de reflexão pode ser observada quando multiplicar a luz refletida dentro do dielétrico, a camada cancela perfeitamente a luz refletida diretamente. Portanto a condição de ressonância pode ser extremamente sensível ao comprimento de onda da camada de onda da camada dielétrica e a ressonância pode ser ajustada pela inserção do filme GST. Após a inserção da camada GST amorfa da estrutura otimizada, o mergulho de ressonância desvia do ponto 920 para 1305 nm. Além disso, o mergulho de ressonância no espectro infravermelho próximo muda ainda mais (de 1305 para 1605 nm) quando a fase GST muda de estado amorfo para cristalino, pois, seu índice de refração em estado cristalino é muito superior do que em estado amorfo.

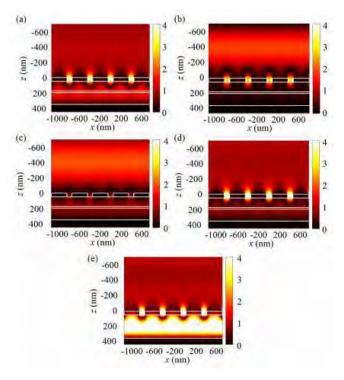


Figura 16 - Campo Elétrico em 1305 nm da estrutura com GST em fase a) amorfa e b) cristalina. Campo elétrico em 1605 nm com GST em fase c) amorfa e d) cristalina e em e) Cmpo elétrico da estrutura proposta sem camada GST inserida em 920 nm [81].

Em Figura 16 podem ser observados mais nitidamente através da distribuição do campo elétrico as condições de ressonância quando a camada GST está inserida em fase amorfa e cristalina e também quando não está inserida.

Os SPP's estão claramente confinados na camada superior, que suporta a criação de uma camada ressonância forte. Este resultado pode ser observado comparando os

casos ressonantes (Figura 16 a e d) com os casos não ressonantes (Figuras 16 b e c). Em 1305 nm, quando o filme GST inserido na camada dielétrica está no estado amorfo, forte ressonância SPP ocorre nas nano-fendas. Quando GST está no estado cristalino, ressonância relativamente fraca é observada, e como mostrado na Figura 16 b, não há campo penetrado dentro da camada dielétrica.

2.5.2 – Absorvedores plasmônicos perfeitos, seletivos de comprimento de onda, sintonizáveis e comutáveis baseados em PCM Ge₂Sb₂Te₅

Este absorvedor seletivo [82] de comprimento de onda na faixa espectral do infravermelho médio por meio da combinação do metamaterial plasmônico com os PCMs (GST) consiste em uma matriz de nano antenas quadradas de ouro (Au) empilhadas acima de uma camada espaçadora GST e um espelho de Au (Figura 17 a e b). Comparado com o dispositivo de controle planar (Figura 17 c), o dispositivo híbrido com um GST pode aumentar dramaticamente a absorbância devido aos modos elétricos e magnéticos induzidos na ressonância. Além disso, tal absorvedor híbrido pode realizar absorção espectral seletiva de comprimento de onda arbitrária na região do infravermelho médio simplesmente alterando o comprimento lateral das nano antenas quadradas.

A Figura 18 a exibe o espectro de absorção calculado do absorvedor híbrido otimizado com a-GST sob o caso de incidente normal. Para efeito de comparação, a absorbância do dispositivo de controle planar também é fornecida. O projeto híbrido com a-GST exibe absorbância muito alta com um valor de pico de até 98,2% na ressonância de 3287 nm, devido à impedância correspondente ao vácuo. No entanto, o dispositivo de controle planar mostra absorbância bastante baixa em toda a faixa de comprimento de onda observada. Para obter uma visão sobre o mecanismo físico subjacente, o campo eletromagnético e as distribuições de corrente de deslocamento (JD) na ressonância são calculados como mostrado na Figura 18, b e c, respectivamente. Isso mostra claramente que o campo elétrico está principalmente concentrado na camada GST amorfa para excitar os momentos de ressonância elétrica. Além disso, o modo magnético fundamental também é induzido na ressonância,

o que é causado pelo JD anti-paralelo criando um loop entre o arranjo de antenas quadradas de Au e o espelho de Au inferior.

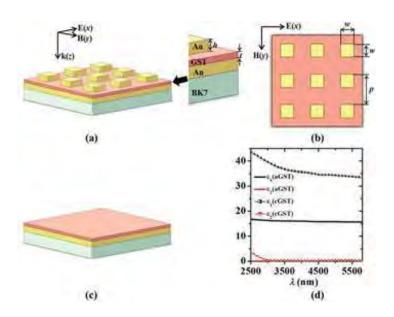


Figura 17 - (a) Representação esquemática e (b) Vista superior do absorvedor. (c) A configuração sem blocos de Ouro. (d) Constantes ópticas do GST [82]

Claramente, pode-se observar nas Figuras 18 (d e e) que o esquema híbrido mantém o desempenho de absorção robusto dentro de uma ampla faixa angular de 0 ° a 80 ° em ambas as polarizações. Um leve deslocamento para o azul da ressonância com o aumento do ângulo de incidência para a polarização TM é possivelmente causado pelo efeito de oscilação fora de fase em cada célula unitária. Assim, o esquema híbrido proposto possui a virtude de alta absorção de polarização insensível à grandes ângulos através da região do infravermelho médio.

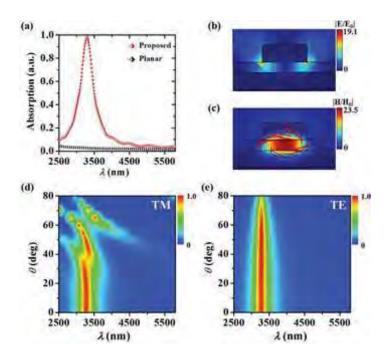


Figura 18 - (a) Espectro de absorção do absorvedor, b) Campos elétrico normalizado (b) e magnético (c) Espectro de absorção no ângulo incidente de 0 a 80 graus sob luz polarizada TM (d) e TE (e), respectivamente [82]

]

Para quantificar a eficácia do modulador [83] GST / metamaterial resultante, definimos a profundidade de modulação dependente do comprimento de onda (MD) e a razão de extinção (ER) como:

$$MD(\lambda) = \frac{R_{on}(\lambda) - R_{off}(\lambda)}{R_{on}(\lambda)}$$
(37)

$$ER(\lambda) = -10.\log \frac{R_{on}(\lambda)}{R_{off}(\lambda)}$$
 (38)

em que $R_{on}(\lambda)$ e $R_{off}(\lambda)$ são as reflectâncias máxima e mínima, respectivamente.

Como resultados de simulação para MD e ER durante a transição de fase de a-GST para c-GST na Figura 19 (c e d) indicam que estes dois requisitos podem de fato ser satisfeitos por um metamaterial ressonante de plasmon integrado com material ativo GST. Com precisão, na ressonância de a-GST, um MD superado de 98% e ER de pode ser obtido, o que satisfaz muito bem a meta de projeto típica para moduladores

práticos. Também foram mostrados resultados da simulação para MD e ER durante a transição de fase de c-GST para a-GST, conforme plotado na Figura 19 (e e f).

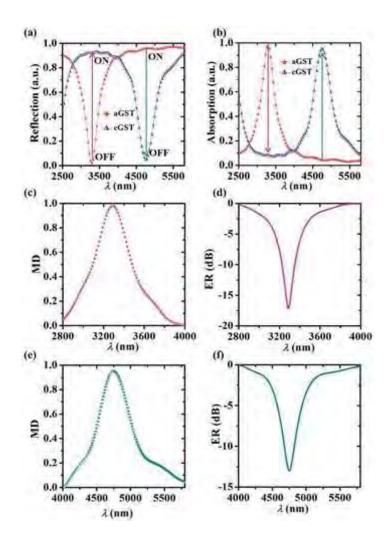


Figura 19 - Espectros de (a) reflexão (b) e absorção (b). O MD (c) e ER (d) para o dispositivo híbrido durante a transição de fase de a-GST para c-GST; o MD (e) e ER (f) para o dispositivo híbrido durante a transição de fase de c-GST para a-GST [82]

2.5.3 – Filtro de IR não volátil, reconfigurável e de banda estreita baseado em ressonância de superfície de rede com Ge₂Sb₂Te₅

Os autores propuseram um filtro composto [84] por uma matriz de nanobastões de ouro bidimensional incorporada em um filme Ge₂Sb₂Te₅ espesso, como pode ser observado em Figura 20.

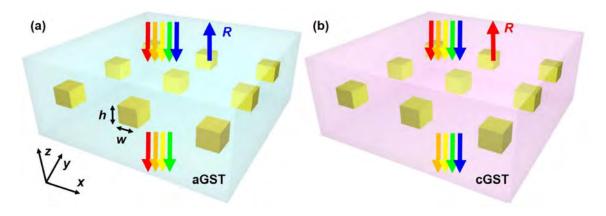


Figura 20 - Esquema do filtro do infravermelho médio sintonizável proposto composto por uma matriz de nanobastôes de ouro incorporada em um filme Ge2Sb2Te5 espesso. [84]

Para as simulações os autores utilizaram a teoria do meio efetivo (36) e alcançaram os resultados demonstrados em Figura 21, em que o espectros de reflexão calculados do filtro proposto para diferentes frações cristalinas de Ge₂Sb₂Te₅. Os resultados mostram que à medida que a fração de cristalização m aumenta Ge₂Sb₂Te₅ de 0 (o estado amorfo) a 1 (o estado cristalino), os espectros de reflexão são fortemente desviados para o vermelho: o comprimento de onda para o pico de refletância muda de 3,197 μm para 4,795 μm.

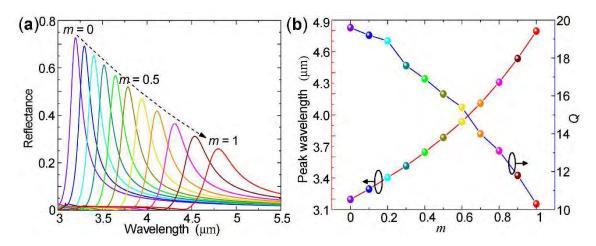


Figura 21 - (a) Espectros de reflexão simulada do filtro proposto para diferentes cristalizações de Ge2Sb2Te5. (b) Pico ressonante e fator de qualidade como funções da fração de cristalização [84]

Por outro lado, à medida que a fração cristalina Ge₂Sb₂Te₅ aumenta de m = 0 para 1, o pico a refletância diminui de 72,6% para 25,8%, a largura da linha aumenta de 163 nm para 467 nm, e o o fator de qualidade correspondente diminui de 19,6 para 10,3, conforme mostrado na Figura 21-b. Os autores obtiveram fator de qualidade superiores do que os baseados em absorvedores perfeitos, e são comparáveis ou maiores que aqueles baseados em extraordinários efeitos de transmissão óptica.

Em Figura 22, as distribuições da intensidade de campo elétrico em estado estacionário simulado são apresentadas em três comprimentos de onda de 3,197 μm, 3,785 μm e 4,795 μm, que correspondem ao refletância de pico para m = 0, 0,5 e 1, respectivamente. Para todos esses três comprimentos de onda, os resultados mostram que dipolos no plano estão excitados no nanobastão de ouro e que os campos elétricos são bastante aumentados ao longo um grande volume, sugerindo a excitação de SLRs no plano. Além disso, as distribuições de campo elétrico mostram curvaturas particulares dentro e fora do nanobastão de ouro e são fortemente assimétricas na direção z, consistente com a literatura de Ressonância de Superfície de Rede (SLRs).

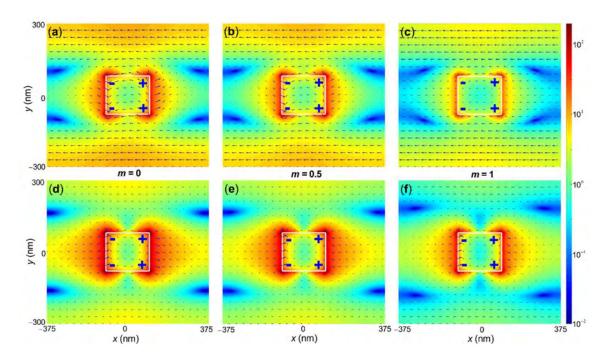


Figura 22 - (a) Intensidade de campo elétrico em estado estacionário simulados e mapas de vetor em (a, d) 3,197 μm , (b, e) 3,785 μm e (c, f) 4,795 μm , Vista superior no plano central do nanobastão de ouro (z = 0), e (d - f) vista lateral em y = 0 [84].

III. CAPÍTULO

Neste Capítulo serão discutidas individualmente as duas estruturas analisadas nesta dissertação, assim como seus e parâmetros físicos, materiais utilizados e resultados. Os índices de refração do Silício (Si) e do nitreto de Silício (Si $_3$ N $_4$) são 3,5 e 2,0, respectivamente, na faixa de comprimento de onda analisada. Em todas as simulações realizadas não serão consideradas perdas ópticas por condutividade do material (σ = 0). Os meios de propagação são não-magnéticos (μ_r = 1) e as constantes ópticas dos metais e do PCM foram demonstradas e calculadas em capítulos anteriores. A potência depositada na porta de excitação das estruturas é o equivalente a 1 mW. Os estudos de casos destas estruturas se baseiam em analisar qual fração desta potência inserida é absorvida ou refletida uma vez que estas estruturas foram projetadas especificamente para que não haja transmissão. Para o cálculo da absorção [56] do material em função dos comprimentos de onda incidentes, a equação utilizada é:

$$A(\lambda) = 1(\lambda) - R(\lambda) \tag{39}$$

em que $A(\lambda)$ sendo a potência absorvida, ou melhor, a absorção, e $R(\lambda)$ como a potência refletiva, ou a reflexão.

3.1 — Absorvedor Híbrido de mudança fase baseado em um nanorressonador plasmônico — Simulações 2D

A Figura 23 mostra o absorvedor híbrido planar proposto baseado em PCM. A estrutura é composta por três camadas planas, consistindo de uma fina película metálica na parte superior, abaixo de uma camada de PCM e um substrato metálico. O filme metálico superior foi o Titânio devido à baixa perda de absorção óptica no infravermelho curto do espectro eletromagnético, abaixo o Telureto de Germânio (GeTe), e no substrato metálico da Prata (Ag). d_{Ti} e d_{GeTe} são as espessuras das camadas de Ti e GeTe do absorvedor, respectivamente. Para este absorvedor híbrido, as espessuras das camadas de titânio e GeTe foram respectivamente d_{Ti} = 5nm e d_{GeTe} = 200nm.

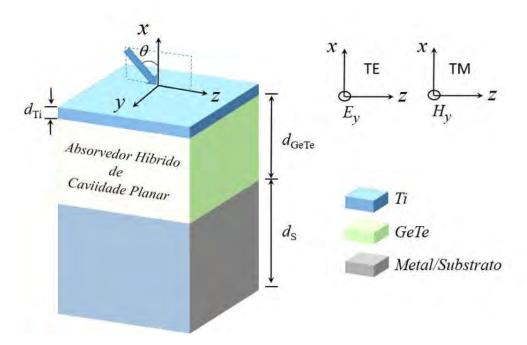
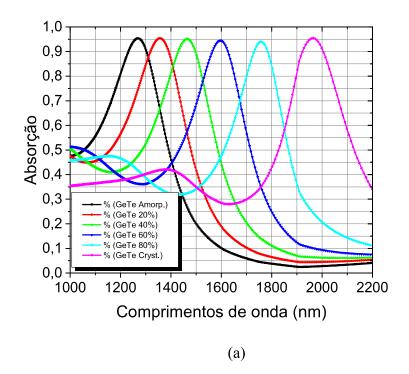


Figura 23 - Absorvedor planar proposto com base em um nano-ressonador integrado com uma sobreposição dielétrica

A Figura 24-a mostra a evolução do espectro de absorção conforme o nível de cristalização do GeTe aumenta. É possível observar que o primeiro pico de 1267 nm é deslocado para a direita com o aumento do nível de cristalização do GeTe. A mudança de fase do GeTe de amorfo para cristalino (ou vice-versa), produz uma excepcionalmente grande modulação do índice de refração. Também foi analisado numericamente o comportamento do pico ressonante com a fração de cristalização do GeTe (Figura 24-b). A curva amarela mostra a absorção em cada pico. É possível observar que a estrutura possui absorção acima de 90% para todos os picos ressonantes. A curva azul mostra que o primeiro pico é deslocado para a direita com o aumento da fração de cristalização do GeTe. Usando métodos estatísticos precisos de linearização, foi possível alcançar uma função que pode obter o pico de ressonância em função da fração de cristalização do PCM de GeTe:

$$\lambda(m_{\%}) = 1267.34 + 4.27m + 0.009m^2 + 1.76.10^{-4}m^3$$
(40)

onde, $m_{\%}$ é a fração de cristalização do GeTe. Esta equação pode ser usada para modular qualquer pico de ressonância em função de m naquele intervalo de 1000 a 2200 nm.



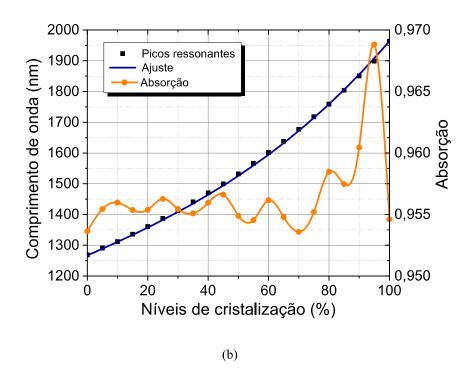


Figura 24 – (a) – Evolução do espectro de absorção para diferentes níveis de cristalização do absorvedor. (b) Ajuste por um polinômio de grau 3. As porcentagens mostradas na legenda correspondem aos níveis de cristalização do GeTe.

A Tabela 1 mostra um resumo dos parâmetros teóricos da fração de cristalização (*m*), os valores dos picos de absorção e a largura total na metade do máximo (FWHM) do absorvedor híbrido proposto.

Fração de cristalização (m)	Picos ressonantes/Absorção	FWHM(nm)
<i>m</i> =0% - Fase amorfa	1268nm –95.3%	340
<i>m</i> =20% - Fase semicristalina	1356nm – 95.2%	350
<i>m</i> =40%- Fase semicristalina	1495nm –95.1%	402
<i>m</i> =60%- Fase semicristalina	1597nm –94.4%	290
<i>m</i> =80%- Fase semicristalina	1756nm – 93.4%	275
<i>m</i> =100% - Fase Cristalina	1963nm –95.5%	332

Tabela 1 - Dados técnicos e resultados da absorção do absorvedor híbrido proposto 3.1.

As curvas de dispersão simuladas exibem que a ressonância permanece no comprimento de onda de ressonância ao longo de uma grande faixa angular incidente para a polarização TM, conforme exibido na Figura 25 (a – f). Os resultados numéricos mostram absorção próxima de uma unidade para todas as fases analisadas da incidência normal ($\theta = 0^{\circ}$) e ângulos de incidência oblíquos até 45°, confirmando a teoria insensível ao ângulo dos absorvedores planos do tipo Fabry-Perot [85-87]. Absorvedores de insensibilidade angular são promissores para várias aplicações, incluindo fotodetectores, fotovoltaicos, termo fotovoltaicos, gravação magnética assistida por calor, coleção de elétrons quentes, sensoriamento bioquímico e emissão térmica [88].

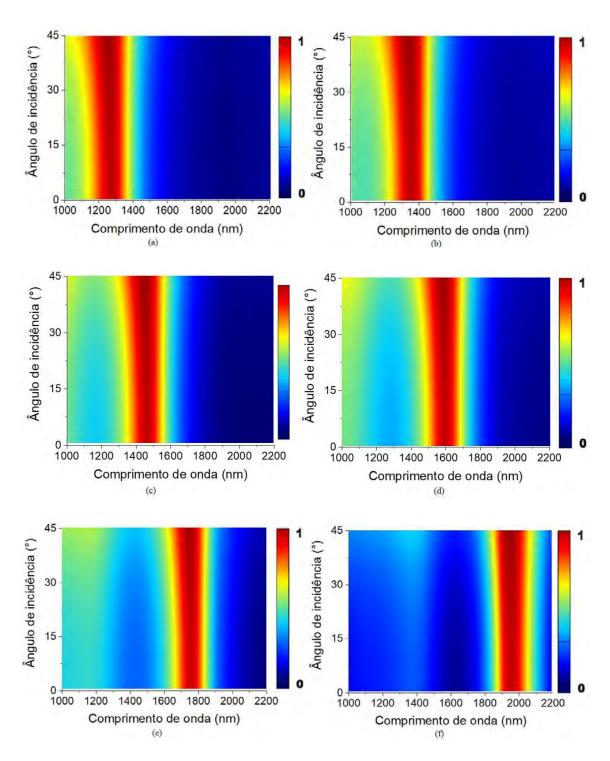


Figura 25 - Dependência da absorção para ângulos incidentes de 0° a 45 $^{\circ}$ na faixa de 1000 a 2200nm (a) Fase Amorfa (m = 0%), (b) m = 20%, (c) m = 40%, (d) m = 60%, (e) m = 80%, e (f) Fase Cristalina (m = 100%).

A capacidade de pico de ressonância deste absorvedor planar híbrido também ser sintonizada com a espessura do GeTe nas fases amorfa, semicristalina (m = 50%) e cristalina. A Figura 26 mostra os resultados numéricos da análise. Também foram analisadas as variações acima e abaixo do valor ideal ($d_{GeTe} = 200$ nm). Os resultados

mostraram uma alta sensibilidade da estrutura com este parâmetro geométrico, em que pôde ser observado um deslocamento dos picos de ressonância para comprimentos de onda menores quando reduzimos a espessura do GeTe e um comportamento oposto quando aumentamos a espessura. Embora haja uma pequena diminuição na absorção para valores mais baixos de d_{GeTe} (Figura 26 a- b), e em todos os casos analisados, a absorção do ressonador híbrido foi acima de 90%. Os resultados também mostram a alta capacidade de sintonizar o absorvedor planar com a espessura do PCM utilizado (GeTe). O comportamento do pico de ressonância com a espessura do GeTe para os três casos: fase Amorfa (curva preta), Fase semicristalina - m = 50% (curva vermelha) e fase cristalina (curva azul), podem ser visos na Figura 26 a-c. Tais comportamentos podem ser claramente observados nas três fases analisadas. Adicionalmente e utilizando métodos matemáticos, as curvas foram linearizadas e foi possível determinar uma função com os coeficientes lineares e angulares para ajustar qualquer pico de ressonância com a espessura do PCM, os resultados são mostrados na Tabela 2.

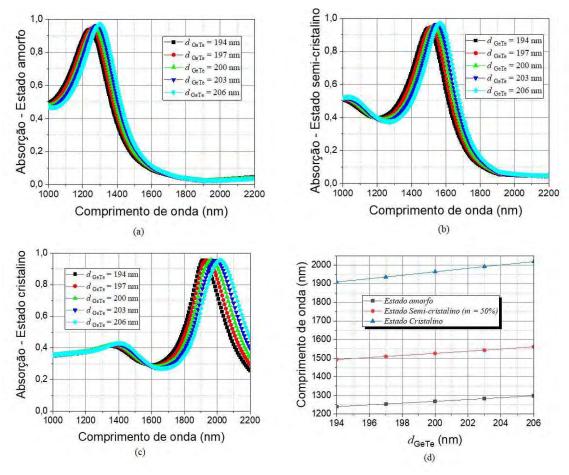


Figura 26 - Dependência da absorção com à espessura do GeTe na faixa de 1000 a 2200nm (a) Fase Amorfa, (b) Fase Semicristalina e (c) Fase Cristalina, (d) Dependência linear dos picos de a, b e c com a espessura da camada GeTe (d_{GeTe}) .

Fase do PCM - GeTe	Função Linear	
<i>m</i> =0% - Fase Amorfa	$\lambda (d_{a\text{-}GeTe}) = 4,83 \ d_{a\text{-}GeTe} + 301,93$	(41)
m=50% - Fase Semicristalina	$\lambda d_{m=50\%\text{-}GeTe}$) = 5,67 $d_{m=50\%\text{-}GeTe}$ + 393,06	(42)
<i>m</i> =100% - Fase Cristalina	$\lambda (d_{c\text{-}GeTe}) = 9,13 \ d_{c\text{-}GeTe} + 137,13$	(43)

Tabela 2 - Linearização do pico de ressonância do absorvedor híbrido proposto em 3.1 com a espessura do GeTe.

Para analisar a tolerância de fabricação do absorvedor ressonante híbrido foi analisado o comportamento da espessura metálica do tampo do Titânio. Os resultados numéricos podem ser vistos na Figura 27 a-c. Os resultados mostram uma alta absorção para todas as fases do GeTe de 1 a 5 nm, para valores maiores, a absorção diminui e o pico de ressonância é deslocado para a direita. O aumento da espessura do Titânio resulta em picos e quedas de absorção pronunciados ao longo do comprimento de onda de interesse, devido à cavidade ressonante de Fabry-Perot. Este fato foi analisado numericamente e experimentalmente em [89]. Para espessuras superiores a 10 nm de filme de Titânio, a transmissão através da camada de Titânio é significativamente reduzida, com maior refletividade, portanto, a FPR se torna mais fraca e a intensidade de absorção diminui.

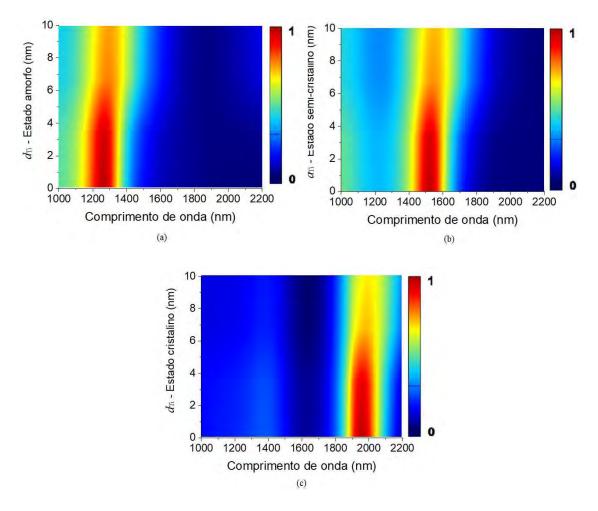


Figura 27 - Mapa de absorção em relação à espessura de Titânio superior (dTi) varredura para (a) Fase Amorfa, (b) Fase Semicristalina e (c) Fase Cristalina

A Figura 28 ilustra o mecanismo de acoplamento físico do absorvedor ressonante híbrido FPR. De acordo com [86], quando os parâmetros físicos e geométricos da estrutura são satisfeitos, o deslocamento de fase agregado nas interfaces metal / dielétrico ($\varphi_{ref1} + \varphi_{ref2}$) é cancelado com o mudança de fase na direção perpendicular às interfaces na região dielétrica $\varphi_{\perp} = 4\pi n_{GeTe} d_{GeTe} \cos\theta/\lambda$

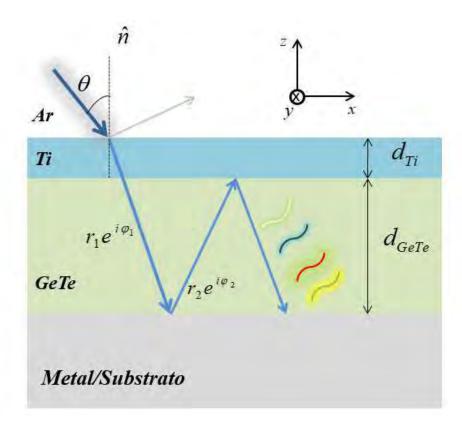


Figura 28 - Mecanismo de acoplamento físico do absorvedor ressonante híbrido FPR, incorporando uma sobreposição de compensação de fase, e são a mudança de fase de reflexão nas duas interfaces de espaçador de metal, respectivamente

Ao usar um substrato metálico espesso [90], a transmissão será nula e a condição perfeita de interferência construtiva entre a onda incidente e a onda refletida é dada [89-91] por:

$$\varphi_{ref1} + \varphi_{ref2} + 4\pi n_{GeTe} d_{GeTe} \cos \theta / \lambda = 2m\pi$$
(44)

Em que n_{GeTe} é o indice de refração do GeTe, d_{GeTe} a espessura da camada, θ o ângulo de incidência e $m=0,\pm 1,\pm 2...$

Campo Elétrico Campo Magnético Potência Absorvida

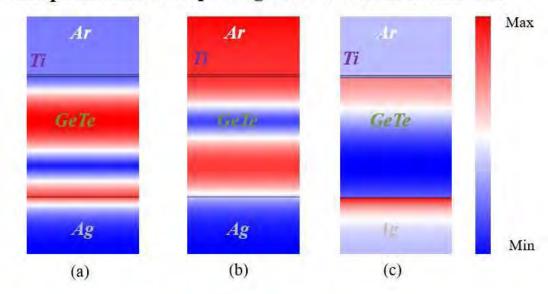


Figura 29 - Distribuição espacial do (a) campo elétrico normalizado, (b) campo magnético normalizado e (c) Potência absorvida para o absorvedor híbrido FPR no comprimento de onda de absorção de pico de 1964 nm da fase cristalina.

Para melhor compreender e visualizar o mecanismo de acoplamento físico do absorvedor ressonante híbrido FPR, foram calculados o campo elétrico normalizado (E), o campo magnético normalizado (E) e a potência óptica absorvida (E) no pico de absorção de GeTe no cristalino fase, $\lambda = 1964$ nm, Figura 29 (a - c). A E0 determinada multiplicando a intensidade do campo elétrica e a parte imaginária da permissividade do metal:

$$P_{abs} = \alpha. \operatorname{Im}(\varepsilon). |E|^2 \tag{45}$$

onde α é o coeficiente normalizado e E é a amplitude do campo elétrico calculado numericamente usando FEM.

A Figura 29 a mostra a forte concentração do campo E na região dielétrica entre o filme metálico e o substrato, devido à interferência construtiva e à formação de uma onda estacionária na região. Essa interferência construtiva foi ocasionada pela escolha dos parâmetros físicos e geométricos da estrutura para compensação de fase, resultando em absorção total no pico ressonante. A Figura 29 b mostra a distribuição espacial do campo magnético normalizado **H**, neste caso é possível observar uma forte intensidade

na interface metal / GeTe. Este fato pode ser atribuído à excitação de SPPs que ocorrem para a polarização do TM. Devido ao aumento do campo elétrico resultante do efeito de cavidade, a maior parte da potência óptica é absorvida dentro do filme metálico superior e inferior (Figura 29 c). A distribuição espacial da absorção revela que a absorção é maior nas interfaces metal-dielétrico. É bastante interessante conseguir uma absorção quase perfeita usando filmes metálicos contínuos.

Estes resultados foram recentemente publicados conforme referência que segue:

Gomes de Souza, I.L., Rodriguez-Esquerre, V.F. and Alves Oliveira, I. (2021), "Design of Planar Reconfigurable, Tunable, and Wide Angle Resonant Absorbers for Applications in the IR Spectrum". Adv. Theory Simul. 2100002. https://doi.org/10.1002/adts.202100002

3.2 — Projeto de absorvedor plasmônico reconfigurável de banda estreita utilizando camada de material com mudança de fase — Simulações 3D

Esta estrutura consiste numa matríz periódica de Silício (Si), periodicidade p e espessura $h_{\text{Substrato}}$, superposta pela camada de material com mudança de fase do Telureto de Germânio (GeTe), de espessura h_{GeTe} e seguida pela camada dielétrica do Nitreto de Silício (Si₃N₄) de espessura h_{Si3N4} . Para completar a estrutura, serão analisadas três propostas: uma com camadas periódicas cúbicas de ouro (Figura 30), uma segunda que consiste em camadas baseadas em nanodiscos (Figura 31) de raio R_{Au} , e uma outra análise sem camadas metálicas e aperiódicas (Figura 32). A Tabela 3 apresenta os valores dos parâmetros.

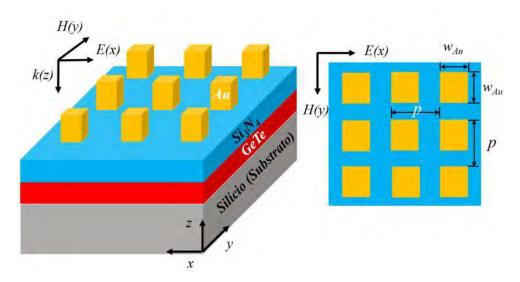


Figura 30 - Estrutura do absorvedor proposta em camadas periódicas cúbicas metálicas e sua respectiva vista superior.

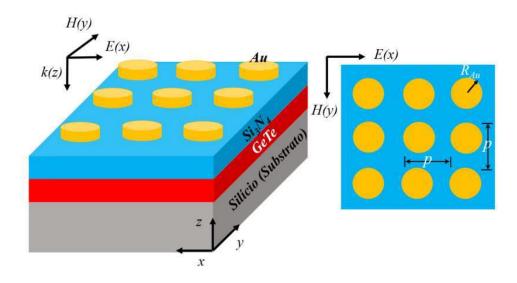


Figura 31 - Estrutura do absorvedor proposta em camadas periódicas baseadas em nanodiscos metálicos e sua respectiva vista superior.

Parâmetros geométricos	Valores (nm)
p	300
h _{Substrato}	145
h_{GeTe}	130
h_{Si3N4}	125
w_{Au} – camada cúbica	160
h_{Au} – camada cúbica	150
h_{Au} – camada em nanodiscos	70
R_{Au}	100

Tabela 3 - Parâmetros geométricos das estruturas analisadas

.

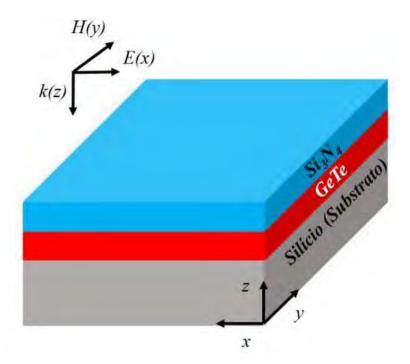


Figura 32 - Estrutura do absorvedor proposta sem as camadas metálicas.

Após realização das simulações, foram analisadas as estruturas conforme pode se verificar na Figura 33 (a-b). A estrutura da Figura 30 apresentou elevada absorção em estado amorfo no comprimento de onda de 1281 nm, bem como em estado cristalino, em 1671 nm. Com a camada do PCM em estado amorfo, as estruturas das Figuras 31 e 32, as quais apresentaram comportamento muito semelhantes, apresentaram um comportamento de reflexão ao longo do deslocamento para comprimentos de onda mais elevados. Em estado cristalino estas estruturas apresentaram queda da absorção até 1600 nm. Após este ponto, sua absorção aumentou até alcançar 90%. Com base nesta análise, a estrutura ideal e que será analisada é a que apresentou alta absorção nas duas fases do GeTe. As outras duas estruturas para efeito de análise nesta dissertação foram utilizadas para comparação e análise de resultados, com o objetivo de alcançar um projeto ideal para aplicação de absorção em grande faixa espectral, especialmente na região em que os sistemas de comunicações estão inseridos.

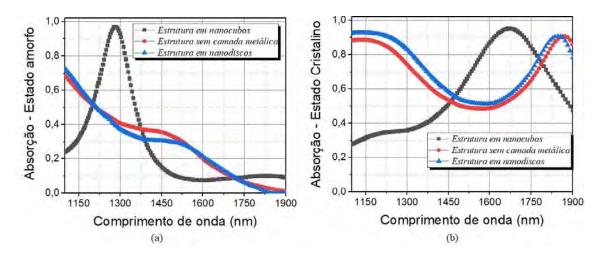


Figura 33 - Espectro de absorção das estruturas analisadas em: a) Estado amorfo e em b) Estado cristalino.

Com a estrutura em seu formado definido, a célula unitária que será utilizada para as simulações é mostrada na Figura 34. Os parâmetros geométricos constam na Tabela 03. As condições de contorno periódicas são usadas para as camadas laterais perfeitamente combinadas (PML) e estas são aplicadas ao longo da direção z para eliminar a dispersão de limite. Como o filme de substrato é mais espesso que a profundidade de penetração da luz incidente, esta será bloqueada e a transmitância (T) da estrutura é quase nula.

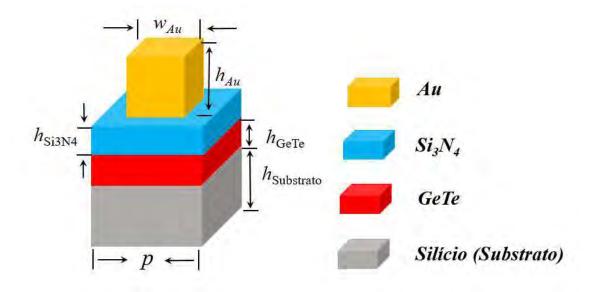
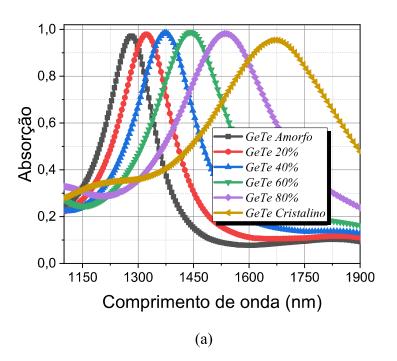


Figura 34 - Célula unitária do absorvedor proposto 3.2.

Da mesma forma como foi analisado o absorvedor proposto em 3.1, a Figura 35a mostra a evolução do espectro de absorção conforme o nível de cristalização do GeTe aumenta. Neste caso, observa-se que o primeiro pico de absorção, alcançado em 1281 nm, é deslocado para a direita com o aumento do nível de cristalização do GeTe. A mudança de fase do GeTe de amorfo para cristalino (ou vice-versa), produz uma excepcionalmente grande modulação do índice de refração. Também foi analisado numericamente o comportamento do pico ressonante com a fração de cristalização do GeTe (Figura 34 b). A curva vermelha mostra o coeficiente de absorção em cada pico, é possível observar que a estrutura possui absorção, possui, no mínimo, de 95% para todos os picos ressonantes. A curva azul mostra que o primeiro pico é deslocado para a direita com o aumento da fração de cristalização do GeTe. Usando métodos estatísticos precisos, foi possível alcançar uma função que pode obter o pico de ressonância em função da fração de cristalização do PCM de GeTe:

$$\lambda(m\%) = 1279.15 + 2.32m - 7.87.10^{-2}m^2 + 2.38.10^{-4}m^3 \tag{46}$$

onde, m% é a fração de cristalização do GeTe. Esta equação pode ser usada para modular qualquer pico de ressonância em função de m naquele intervalo de 1100 a 1900 nm.



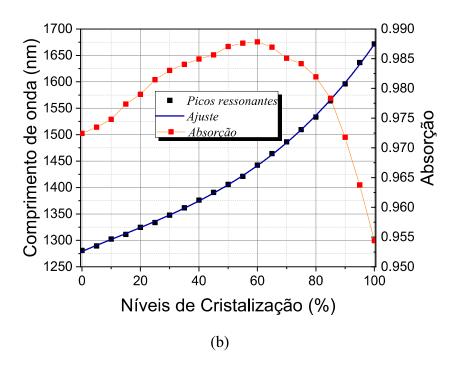


Figura 35 - Evolução do espectro de absorção para diferentes níveis de cristalização do absorvedor proposto em 3.2. (b) Ajuste por um polinômio de grau 3. As porcentagens mostradas na legenda correspondem aos níveis de cristalização do GeTe.

Os resultados da Figura 35 revelaram um crescimento da largura total do meio máximo, ao longo da variação de cristalização do GeTe. De forma análoga à obtenção do comportamento deste parâmetro, pode-se expressar esta evolução pela equação como segue:

$$FWHM(m_{\%}) = 156.15 + 9.5.10^{-1} m - 3.97.10^{-8} m^2 + 1.89.10^{-4} m^3$$
(47)

onde, $m_{\%}$ é a fração de cristalização do GeTe. Esta equação pode ser usada para analisar qual o tamanho da FWHM em qualquer fração de cristalização do GeTe. A Figura 36 apresenta o comportamento de FWHM. Este comportamento causará interferência e todos os resultados demonstrados a seguir.

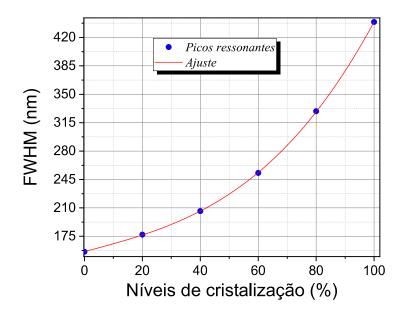


Figura 36 - Variação da Largura total de meio máximo (FWHM) em função da cristalização do GeTe.

Também foram analisadas as respostas da absorção para diferentes ângulos e de incidência e fases do PCM. Para a polarização TE, a ressonância se mantém no comprimento de onda ressonante e após 30° desloca-se de forma quase insensível para comprimentos de onda mais curtos, conforme apresentado na Figura 37 (a – f). Com a mudança da fase do PCM, a absorção em comprimentos de onda próximos ao ressonante aumentam devido ao crescimento da largura total pela metade no máximo FHWM, bem como pelo deslocamento de pico. Os resultados numéricos mostram absorção próxima de uma unidade para todas as fases analisadas da incidência normal ($\theta = 0^{\circ}$) e ângulos de incidência oblíquos até 45°

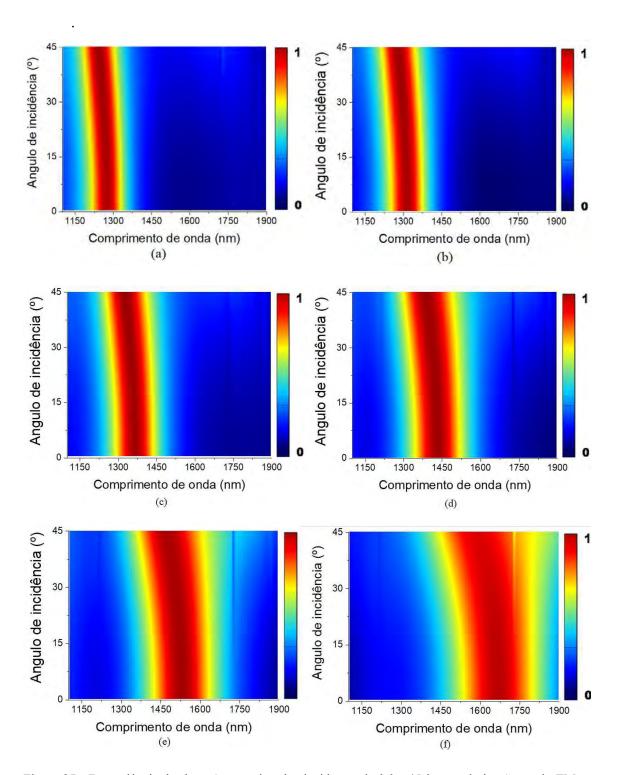


Figura 37 - Dependência da absorção para ângulos incidentes de 0 $^{\circ}$ a 45 $^{\circ}$ em polarização modo TM na faixa de 1100 a 1900nm (a) Fase Amorfa (m = 0%), (b) m = 20%, (c) m = 40%, (d) m = 60%, (e) m = 80%, e (f) Fase Cristalina (m = 100%).

Os mapas de dispersão do desempenho da absorção em polarização TM são exibidos na Figura 38 (a - f). Os resultados numéricos mostram absorção elevada para todos os ângulos apresentados (de 0 a 45 $^{\circ}$), apresentando grande insensibilidade

angular, ideal para várias aplicações práticas. Os resultados mostram também que há uma absorção elevada em comprimentos de onda próximos ao pico ressonante aumentam em função da elevação dos ângulos de incidência. Desta forma, o esquema híbrido proposto possui a virtude de alta absorção de polarização insensível e grandes ângulos através da região espectral infravermelho.

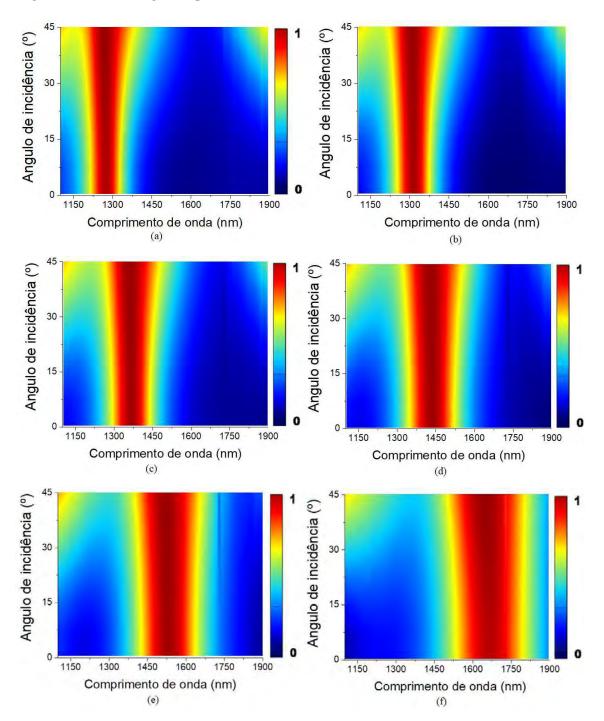


Figura 38 - Dependência da absorção para ângulos incidentes de 0 $^{\circ}$ a 45 $^{\circ}$ em polarização modo TM na faixa de 1100 a 1900nm (a) Fase Amorfa (m = 0%), (b) m = 20%, (c) m = 40%, (d) m = 60%, (e) m = 80%, e (f) Fase Cristalina (m = 100%).

Para analisar o efeito da absorção a partir da variação da espessura da camada metálica $h_{\rm Au}$, foi realizada uma varredura entre do valor inicialmente calculado entre 75 a 225 nm com, ou seja, para valores menores e maiores que o valor ideal (150 nm), e os resultados podem ser vistos na Figura 39 a-c. Os resultados demonstram que a alta absorção permanece elevada e o deslocamento de pico é proporcional à variação da espessura da camada metálica $h_{\rm Au}$. Além disso, o deslocamento de pico e o aumento da FHWM ocasionados pela variação da cristalização, não causam interferência nesta eficiência da absorção mesmo para espessuras considevalmente grandes ou pequenas.

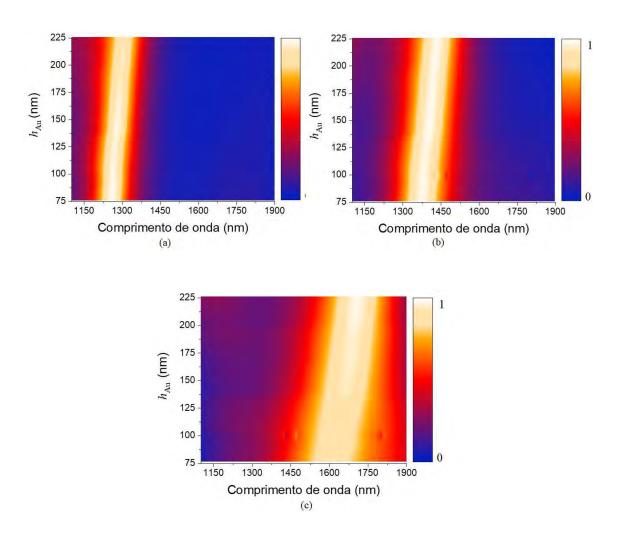


Figura 39 - Mapa de absorção em relação à espessura da camada metálica de Ouro (hAu) varredura para (a) Fase Amorfa, (b) Fase Semicristalina e (c) Fase Cristalina

A largura camada metálica deste absorvedor também foi analisada variando entre 150 a 170 nm. A sua capacidade de pico de ressonância pode ser sintonizada com o PCM nas fases totalmente amorfa, semicristalina (m = 25%), semicristalina (m = 50%), semicristalina (m = 75%) e totalmente cristalina. A Figura 40 (a - e) demonstra os resultados numéricos da análise. Os resultados mostraram que há o deslocamento do pico de ressonância para comprimentos de onda mais elevados devido ao aumento da largura da camada em todas as fases do GeTe. Adicionalmente e utilizando métodos matemáticos de regressão linear, as curvas foram ajustadas para determinar uma função que a fração de cristalização do GeTe e espessura da camada metálica são variáveis independentes e podem ser sintonizadas pela equação:

$$\lambda(m_{0_0}, w_{Au}) = 3.74.10^{-2} m^2 + 9.76.10^{-1} w_{Au} + 1142.98 \tag{48}$$

em que, $m_{\%}$ é a fração de cristalização do GeTe e w_{Au} a espessura do Ouro. Para análise do comportamento dos picos de ressonância durante a evolução, foi apresentado na Figura 41, um gráfico superfície em que reúne estas duas variáveis independentes.

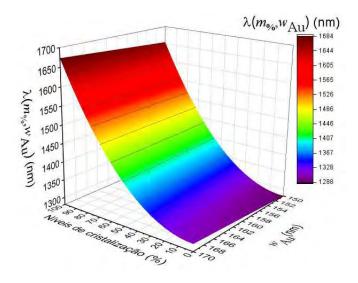


Figura 40 - Gráfico de superfície da função multivariável da cristalização com a espessura metálica

Também foram analisados os efeitos da absorção variando a espessura da camada dielétrica h_{Si3N4} e seus resultados foram mostrados na A Figura 42 (a – e). Os resultados mostram que houve insensibilidade com a sintonização deste parâmetro geométrico, que pode estar atribuído ao seu valor constante de índice de refração e por essa razão não

houve necessidade de linearização. Apesar disto, a absorção se manteve elevada para todas as fases do PCM.

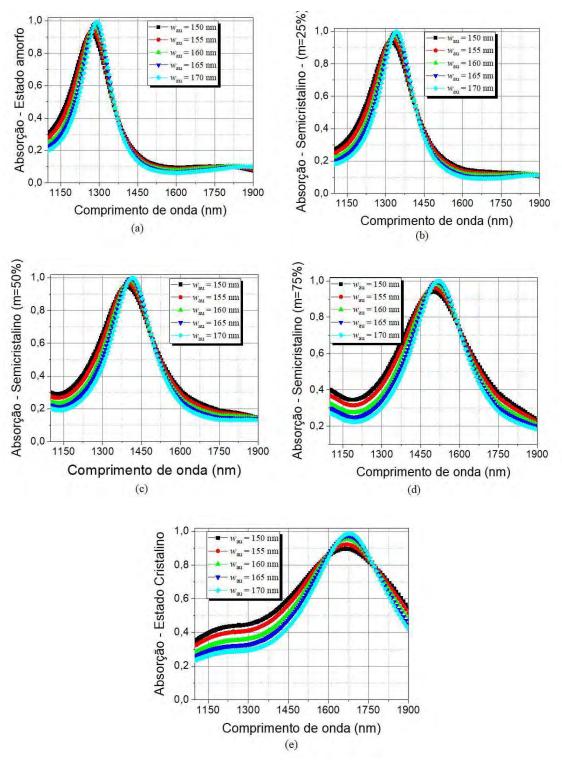


Figura 41 - Dependência da absorção com à largura da camada metálica wAu na faixa de 1100 a 1900nm (a) Fase Amorfa, (b) Fase Semicristalina (m = 25%) e (c) Fase Semicristalina (m = 50%),(d) Fase Semicristalina (m = 75%) e (e) Fase Cristalina

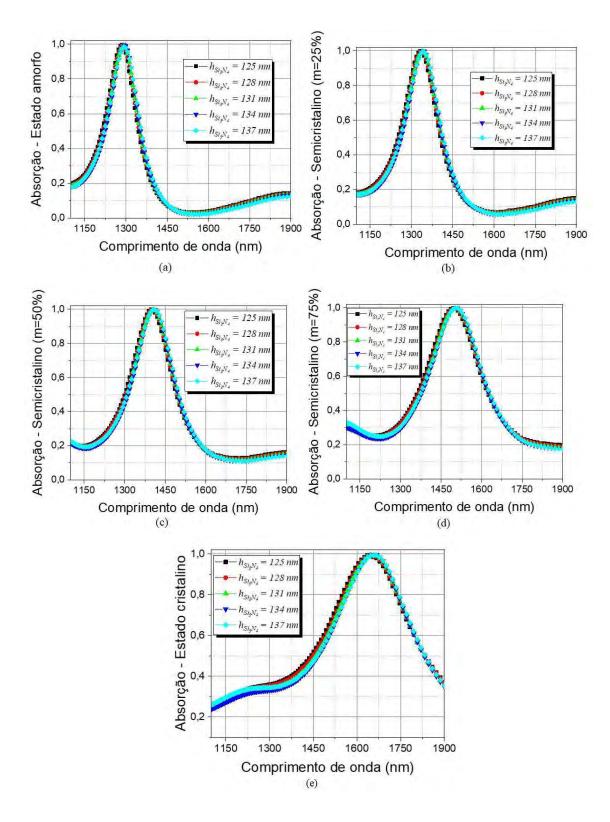


Figura 42 - Dependência da absorção com a espessura da camada dielétrica hSi3N4 na faixa de 1100 a 1900nm (a) Fase Amorfa, (b) Fase Semicristalina (m = 25%) e (c) Fase Semicristalina (m = 50%),(d) Fase Semicristalina (m = 75%) e (e) Fase Cristalina

Também foram analisados os efeitos da absorção variando a espessura da camada do material com mudança de fase e os resultados foram apresentados na A Figura 43 (a – e). Os resultados mostram que ao aumentar a camada do PCM, há deslocamento para comprimentos de onda mais elevados, devido a mudança da espessura do material e da modulação óptica causada pela cristalização. Os resultados também revelam que destes deslocamentos são ligeiramente espaçados. As curvas foram linearizadas como pode ser analisado na Figura 44, possibilitando alcançar funções lineares para ajustar comprimentos de onda ressonantes com a espessura do PCM e os expressões lineares foram apresentadas na Tabela 04.

Fase do PCM - GeTe	Função Linear	
<i>m</i> =0% - Fase Amorfa	$\lambda(h_{\text{GeTe}}) = 3.61h_{\text{GeTe}} + 814.79$	(49)
<i>m</i> =25% - Fase Semicristalina	$\lambda(h_{\text{GeTe}}) = 4.14h_{\text{GeTe}} + 796.30$	(50)
<i>m</i> =50% - Fase Semicristalina	$\lambda(h_{\text{GeTe}}) = 5.08h_{\text{GeTe}} + 740.45$	(51)
<i>m</i> =75% - Fase Semicristalina	$\lambda(h_{\text{GeTe}}) = 6.11h_{\text{GeTe}} + 705.91$	(52)
<i>m</i> =100% - Fase Cristalina	$\lambda(h_{\text{GeTe}}) = 6.32h_{\text{GeTe}} + 827.05$	(53)

Tabela 4 - Linearização dos picos ressonantes do absorvedor proposto em 3.2 com a espessura do GeTe

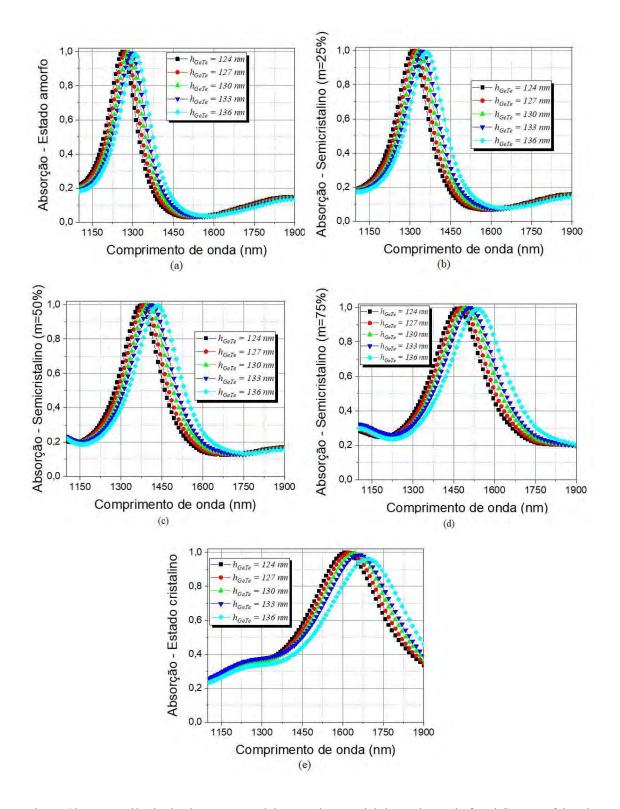


Figura 43 - Dependência da absorção com à largura do material de mudança de fase hGeTe na faixa de 1100 a 1900nm (a) Fase Amorfa, (b) Fase Semicristalina (m = 25%) e (c) Fase Semicristalina (m = 50%),(d) Fase Semicristalina (m = 75%) e (e) Fase Cristalina

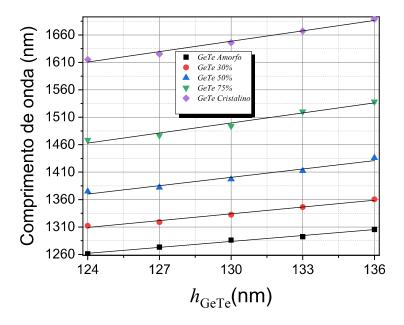


Figura 44 – Dependência linear dos picos da Figura 43 (a), (b), (c), (d), e (e) com a espessura da camada GeTe.

Também foram analisados os efeitos da absorção variando a espessura da camada do material do substrato de Silício e os resultados foram apresentados na A Figura 45 (a – e). Seus resultados também revelam que a sua variação causa interferência na absorção, e que há deslocamento dos picos ressonantes. As curvas também foram linearizadas, permitindo controle de pico através de funções lineares que podem ser observadas na Tabela 05. Os resultados da dependência linear dos picos ressonantes com a variação da espessura da camada do substrato podem ser observados na Figura 46.

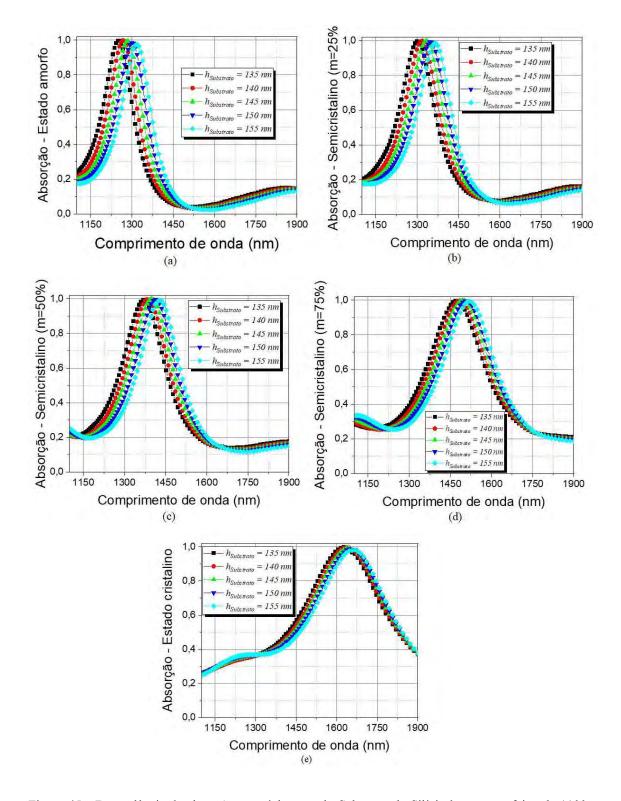


Figura 45 - Dependência da absorção com à largura do Substrato de Silício $h_{Substrato}$ na faixa de 1100 a 1900nm (a) Fase Amorfa, (b) Fase Semicristalina (m = 25%) e (c) Fase Semicristalina (m = 50%), (d) Fase Semicristalina (m = 75%) e (e) Fase Cristalina

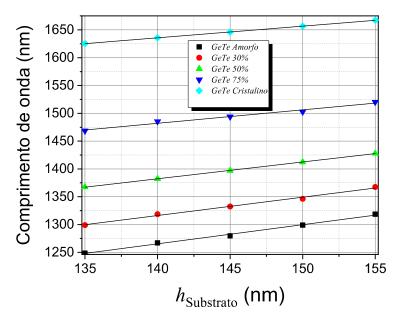


Figura 46 - Dependência linear dos picos da Figura 45 (a), (b), (c), (d), e (e) com a espessura da camada do substrato dielétrico.

Fase do PCM - GeTe	Função Linear	
<i>m</i> =0% - Fase Amorfa	$\lambda(h_{Substrato}) = 3.44h_{Substrato} + 784.12$	(54)
<i>m</i> =25% - Fase Semicristalina	$\lambda(h_{Substrato}) = 3.30h_{Substrato} + 854.78$	(55)
<i>m</i> =50% - Fase Semicristalina	$\lambda(h_{Substrato}) = 3.02h_{Substrato} + 959.54$	(56)
m=75% - Fase Semicristalina	$\lambda(h_{Substrato}) = 2.42h_{Substrato} + 1143.70$	(57)
<i>m</i> =100% - Fase Cristalina	$\lambda(h_{Substrato}) = 2.10h_{Substrato} + 1342.35$	(58)

Tabela 5 - Linearização dos picos ressonantes do absorvedor proposto em 3.2 com a espessura da camada do substrato dielétrico

Os efeitos da absorção com a variação da periodicidade da estrutura também foram analisados conforme podem ser analisados na Figura 47 (a – e). Seus resultados mostraram que o aumento da periodicidade ocasiona o deslocamento de pico para comprimentos de onda mais curtos, indicando um decrescimento linear, apresentado na Figura 48. Baseando-se nos resultados apresentados, as curvas foram linearizadas, sendo possível controlar os picos de ressonância em função da variação da periodicidade do absorvedor que podem ser analisados na Tabela 06.

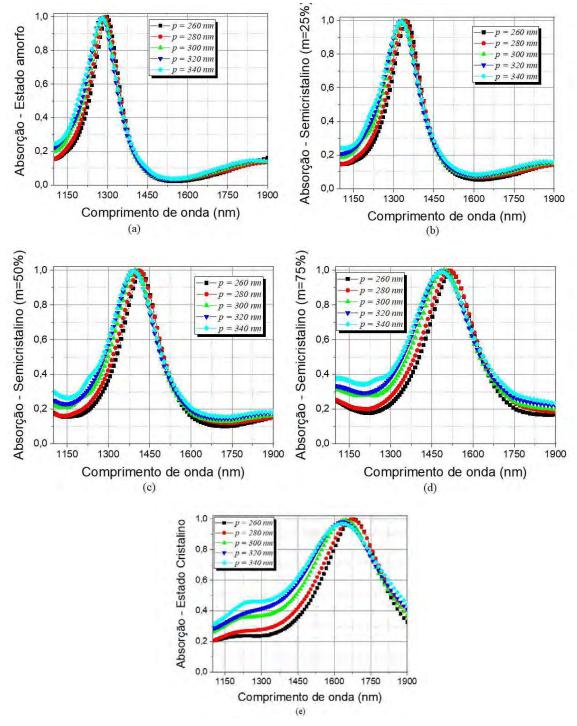


Figura 47 - Dependência da absorção com periodicidade p na faixa de 1100 a 1900nm (a) Fase Amorfa, (b) Fase Semicristalina (m = 25%) e (c) Fase Semicristalina (m = 50%),(d) Fase Semicristalina (m = 75%) e (e) Fase Cristalina.

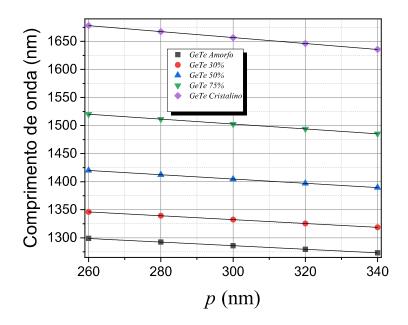


Figura 48 - Dependência linear dos picos da Figura 47 (a), (b), (c), (d), e (e) periodicidade da estrutura.

Fase do PCM - GeTe	Função Linear	
<i>m</i> =0% - Fase Amorfa	$\lambda(p) = -0.32 p + 1381.93$	(59)
<i>m</i> =25% - Fase Semicristalina	$\lambda(p) = -0.34 p + 1435.35$	(60)
<i>m</i> =50% - Fase Semicristalina	$\lambda(p) = -0.38 p + 1519.21$	(61)
m=75% - Fase Semicristalina	$\lambda(p) = -0.43 p + 1633.67$	(62)
<i>m</i> =100% - Fase Cristalina	$\lambda(p) = -0.53 p + 1815.92$	(63)

Tabela 6 - Linearização dos picos ressonantes do absorvedor proposto em 3.2 com a periodicidade da estrutura.

Para revelar o mecanismo físico do absorvedor, a Figura 49 (a-c) mostra a distribuição espacial dos campos Elétrico, Magnético e da densidade de Corrente para o comprimento de ressonante em 1550 nm no plano x-z, com a fração de cristalização m = 82,5%. Os resultados também mostram uma intensidade do campo elétrico entre no espaçamento lateral da camada superior metálica. A densidade de corrente está distribuída entre o semicondutor e na parte inferior da camada metálica. O campo magnético intenso gerado na camada do PCM favorece a interação entre a camada

dielétrica do nitreto de silício e a camada metálica, causando interferência e gerando os SPP's, devido a característica de semicondutor para que a absorção permaneça elevada.

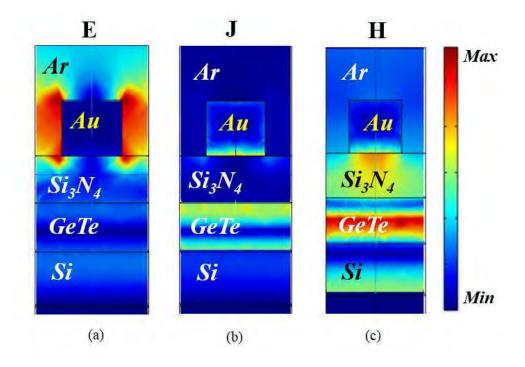


Figura 49 - Distribuição espacial do a) Campo Elétrico; b) Densidade de Corrente e c) Campo magnético do absorvedor 3.2 no comprimento de onda ressonante em 1550 nm e m=82,5%

Da mesma forma, foram apresentadas as distribuições espaciais dos campos dos campos elétrico, magnético e densidade de corrente, para o mesmo comprimento de onda, porém, com a fase do PCM em estado amorfo e os resultados podem ser analisados na Figura 50 (a-c), portanto, comprimento de onda não ressonante. Os resultados mostram que na Figura 50-a um enfraquecimento do campo elétrico nas laterais da camada metálica da estrutura. A densidade de corrente é quase totalmente eliminada, ficando concentrada em pontos específicos da camada superior. E na Figura 50-c, a intensidade do campo magnético aumenta causando reflexão e eliminando a ressonância da estrutura [80].

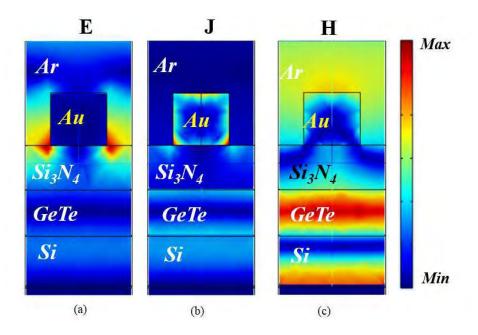


Figura 50 - Distribuição espacial do a) Campo Elétrico; b) Densidade de Corrente e c) Campo magnético do absorvedor 3.2 no comprimento de onda ressonante em 1550 nm com fase do GeTe amorfa.

IV. CAPÍTULO

4.1 – Conclusões

Baseando-se nas análises dos resultados obtidos através das simulações numéricas dos absorvedores reconfiguráveis propostos, pôde-se concluir que:

- A capacidade de sintonizar os picos de ressonância dos absorvedores variando os níveis de cristalização e parâmetros geométricos, permite o controle através de funções (polinomiais e multivariáveis), especialmente pela contribuição da relação Lorentz-Lorenz.
- Para incidência oblíqua e polarização TM, as duas estruturas apresentaram insensibilidade angular, ideal para várias aplicações práticas;
- O absorvedor proposto em 3.2 possui elevada absorção independente da polarização;
- As duas estruturas apresentaram picos de ressonância acima de 93% em espectro eletromagnético infravermelho;
- A mudança das propriedades do material de mudança de fase GeTe possibilita que seu uso como isolante;
- Estas estruturas podem ser uma alternativa aos absorvedores comuns (sem PCM's) de banda larga.
- As estruturas propostas podem ser utilizadas em dispositivos optoeletrônicos incluindo sensores, absorvedores perfeitos, fotodetectores, entre outros projetos.

4.2 – Sugestões para propostas futuras

Apesar das simulações numéricas para as estruturas analisadas apresentarem resultados satisfatórios, em trabalhos futuros poderiam ser analisadas outras geometrias, com outros materiais com mudança de fase e controle de outras variáveis como por exemplo o fator de qualidade Q e efeitos diretos da temperatura dos PCM's nestas estruturas. A fabricação destas estruturas pode ser uma sugestão viável para dispositivos reconfiguráveis. Outra sugestão seria analisar o controle da absorção em comprimentos de onda curtos, além de mesclar a alta eficiência do COMSOL a outras linguagens de alto nível como o Phyton. O contexto atual dos PCM's em dispositivos nanofotônicos e nanoplasmônicos sugerem projetos cada vez mais avançados em metassuperfícies de controle dinâmicos reconfiguráveis [92].

4.3 – Publicações associadas à dissertação

Alves Oliveira, I. Rodriguez-Israel L. Gomes de Souza, and V. F. Esquerre "Wavelength-tunable planar plasmonic absorber based on PCM's nanoresonators", Proc. SPIE 11467, Nanoengineering: Fabrication, Properties, Optics, Thin Films. and **Devices** XVII, 114670S (21)August 2020); https://doi.org/10.1117/12.2568966

Israel Alves Oliveira, I. L. Gomes de Souza, and V. F. Rodriguez-Esquerre "Narrowband plasmonic absorber with phase-change-material layer", Proc. SPIE 11467, Nanoengineering: Fabrication, Properties, Optics, Thin Films, and Devices XVII, 114672A (21 August 2020); https://doi.org/10.1117/12.2568963

Gomes de Souza, I.L., Rodriguez-Esquerre, V.F. and Alves Oliveira, I. (2021), "Design of Planar Reconfigurable, Tunable, and Wide Angle Resonant Absorbers for Applications in the IR Spectrum". Adv. Theory Simul. 2100002. https://doi.org/10.1002/adts.202100002

Referências Bibliográficas

- [1] M. Chen, K. A. Rubin, e R. W. Barton, "Compound materials for reversible, phase-change optical data storage", Appl. Phys. Lett., vol 49, n° 9, p. 502-504, set. 1986, doi: 10.1063/1976
- [2] M. Wuttig, "Towards a universal memory?", Nature Mater, vol. 4, n° 4, p. 265-266, abr. 2005, doi: 10.1038/nmat1359
- [3] M. H. R. Lankhorst, B. W. S. M. M. katelaars, e R. A. M. Wolters, "Low-cost and nanoscale non-volatile memory concept for future silicon chips", Nature Mater, vol.4, n° 4, p. 347-352, mar. 2005, doi: 10.1038/nmat1350
- [4] M. A. Caldwell, R. G. D. Jeyasingh, H. S. P. Wong, e D. J. Milliron, "Nanoscale phase change memory materials", Nanoscale, vol. 4, n° 15, p. 4382, 2012, doi: 10.1039/c2nr30541k
- [5] P. Hosseini, C. D. Wright, e H. Bhaskaran, "Na optoelectronic framework enabled by low-dimensional phase-change films", Nature, vol. 511, n° 7508, p. 206-211, jul. 2014, doi: 10.1038/nature13487
- [6] D. Lencer, M. Salinga, e M. Wuttig, "Design Rules for Phase-Change Materials in Data Storage Applications", Adv. Mater., vol. 23, n° 18, p. 2030-2058, abr. 2011, doi: 10.1002/adma.201004255
- [7] A. -K. U. Michel et al., "Using Low-Loss Phase-Change Materials for Mid-Infrared Antenna Resonance Tuning", Nano lett., vol. 13, n° 8, p. 3470-3475, jul. 2013, doi: 10.1021/nl4006194
- [8] N. I. Zheludev, "The Road Ahead for Metamaterials", Science, vol. 328, n° 5978, p. 582-583, abr. 2010, doi: 10.1126/science.1186756
- [9] K. F. MacDonald, Z. L. Sámson, M. I. Stockman, e N. I. Zheludev, "Ultrafast active plasmonics", Nature Photon, vol. 3, n° 1, p. 55-58, dez. 2008, doi: 10.1038/nphoton.2008.249
- [10] Raoux S. Phase Change Materials. Springer; New York, NY, USA: (2009)

- [11] A. Forouzman e H. Mosallei, "Dynamic beam control via Mie-resonance based phase-change metasurface: a theoretical investigation". Opt. Express, vol. 26, no 14, p.17948, jun. 2018, doi: 10.1364/oe.26.017948
- [12] Y. Zhang et al., "Broadband transparent optical phase change materials for high-performance nonvolatile photonics", Nat Commun, vol. 10, n° 1, set. 2019, doi: 10.1038/s41467-019-12196-4
- [13] Functionally scaled computing technology: From novel devices to non-von Neumann architectures and algorithms for a connected intelligent world, https://cordis.europa.eu/project/id/780848, último acesso em 22/06/2021
- [14] T. Kozacki, "Holographic display with titled spatial light modulator", Appl. Opt., vol. 50, n° 20, p. 3579, jul. 2011, doi: 10.1364/ao.50.003579
- [15] A. Sarangan, J. Duran, V. Vasilyev, N. Limberopoulos, I. Vitebskiy, e I. Anisimov, "Broadband Reflective Optical Limiter Using GST Phase Change Material", IEEE Photonics J., vol. 10, n° 2, p. 1-9, abr. 2018, doi: 10.1109/jphot.2018.2796448
- [16] B. Gholipour, J. Zhang, K. F. MacDonald, D. W. Hewak, e N. I. Zheludev, "An All-Optical, Non-volatile, Bidirectional, Phase-Change Meta-Switch", Adv. Mater., vol. 25, n° 22, p. 3050-3054, abr. 2013, doi: 10.1002/adma.201300588
- [17] P. E. Seiber e D. H. Werner, "Reconfigurable broadband infrared circularly polarizing reflectors based on phase changing birefringent metasurfaces" Opt. Express, vol. 21, n° 1, p.1087, jan. 2013, doi: 10.1364/oe.21.001087
- [18] T. Cao, C. Wei, R. E. Simpson, L. Zhang, e M. J. Cryan, "Broadband Polarization-Independent Perfect Absorber Using a Phase-Change Metamaterial at Visible Frequencies" Sci Rep, vol. 4, n° 1, fev. 2014, doi: 10.1038/srep03955
- [19] C. Ruiz de Galarreta et al., "Reconfigurable multilevel control of hybrid all-dielectric phase-change metasurfaces", Optica, vol. 7, n° 5, p. 476, maio 2020, doi: 10.1364/optica.384138
- [20] M. Jafari, L. J. Guo, e M. Rais-Zadeh, "A Reconfigurable Color Reflector by Selective Phase Change of GeTe in a Multilayer Structure", Advanced Optical Materials, vol. 7, n° 5, p. 1801214, jan. 2019, doi: 10.1002/adom.20181214

- [21] S. Cueff et al., "Reconfigurable Flat Optics with Programmable Reflection Amplitude Using Lithography-Free Phase-Change Material Ultra-Thin Films (Advanced Opticl Materials 2/2021)", Adv. Optical Mater., vol. 9, n° 2, p. 2170006, jan. 2021, doi: 10.1002/adom202170006
- [22] S. Tao et al., "Phase Change Materials for Nonvolatile, Solid-State Reflective Displays: From New Structural Design Rules to Enhanced Color-Changing Performance", Adv. Optical Mater., vol. 8, n° 10, p. 2000062, mar. 2020, doi: 10.1002/adom.202000062
- [23] S. R. Ovshinsky, "Reversible Electrical Switching Phenomena in Disordered Structures", Phys. Rev. Lett., vol. 21, n° 20, p. 1450-1453, nov. 1968, doi: 10.1103/physrevlett.21.1450
- [24] N. Yamada, E. Ohno, N. Akahira, K. Nishiuchi, K. Nagat, M. Takao, Jpn. J. Appl. Phys. (1987)
- [25] N. Yamada e T. Matsunaga, "Structure of laser-crystallized Ge₂Sb₂+xTe₅ sputtered thin films for use in optical memory", Journal of Applied Physics, vol. 88, n° 12, p. 7020-7028, dez. 2000, doi: 10.1063/1.1314323
- [26] K. Shportko, S. Kramers, M. Woda, D. Lencer, J. Robertson, e M. Wuttig, "Resonant bonding in crystalline phase-change materials", Nature Mater, vol. 7, n° 8, p. 653-658, jul. 2008, doi: 10.1038/nmat2226
- [27] M. Wuttig, H. Bhaskaran, e T. Taubner, "Phase-change materials for non-volatile photonic applications", Nature Photon, vol. 11, n° 8, p. 465-476, ago. 2017, doi: 10.1038/nphoton.2017.126
- [28] B. J. Eggleton, "Chalcogenide photonics: fabrication, devices and applications Introduction", Opt. Express, vol. 18, n° 25, p. 26632, dez. 2010, doi: 10.1364/oe.18.026632
- [29] A. U. Michel et al., "Advanced Optical Programming of Individual Meta-Atoms Beyond the Effective Medium Approach", Adv. Mater., vol. 31, n° 29, p. 1901033, maio 2019, doi: 10.1002/adma.201901033

- [30] J. Wang, L. Wang, e J. Liu, "Overview of Phase-Change Materials Based Photonic Devices", IEEE Acess, vol. 8, p. 121211-121245, 2020, doi: 10.1109/acess.2020.3006899
- [31] S. Abdollahramezani et al., "Tunable nanophotonics enabled by chalcogenide phase-change materials", Nanophotonics, vol. 9, n° 5, p. 1189-1241, jun. 2020, doi: 10.1515/nanoph-2020-0039
- [32] A. Pawbake et al., "Pressure-Induced Phase Transitions in Germanium Telluride: Raman Signatures of Anharmonicity and Oxidation", Phys. Rev. Lett., vol. 122, n° 14, abr. 2019, doi: 10.1103/physrevlett.122.145701
- [33] T. Chattopadhyay, JX Boucherle, e HG vonSchnering, "Neutron diffraction study on the structural phase transition in GeTe", J. Phys. C: Solid State Phys., vol. 20, n° 10, p. 1431-1440, abr. 1987, doi: 10.1088/0022-3719/20/10/012
- [34] F. Tong et al., "Lattice strain induced phase selection and epitaxial relaxation in crystalline GeTe thin film", Thin Solid Films, vol. 568, p. 70-73, out. 2014, doi: 10.1016/j.tsf.2014.08.006
- [35] M. Wuttig e N. Yamada, "Phase-change materials for rewriteable data storage", Nature Mater, vol. 6, n° 11, p. 824-832, nov. 2007, doi: 10.1038/nmat2009
- [36] K. Perumal, "Epitaxial growth of Ge-Sb-Te based phase change materials", Ph.D. thesis, Humboldt-Universität zu Berlin, (2013).
- [37] R. W. Wood, "XLII. On a remarkable case of uneven distribution of light in a diffraction grating spectrum", The londo, Edinburghm and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science, vol. 4, n° 21, p. 396-402, set. 1902, doi: 10.1080/14786440209462857
- [38] J. Hagglund e F. Sellberg, "Reflection, Absorption, and Emission of Light by Opaque Optical Gratings", J. Opt. Soc. Am., vol. 56, no 8, p. 1031, ago. 1966, doi: 10.1364/josa.56.001031
- [39] R. Ritchie, E. Arakawa, J. Cowan, e R. Hamm, "Surface-Plasmon Resonance Effect in Grating Diffraction", Phys. Rev. Lett., vol. 21, n° 22, p. 1530-1533, nov. 1968, doi: 10.1103/physrevlett.21.1530

- [40] M. B. Sobnack, W. C. Tan, N. P. Wanstall, T. W. Preist, e J. R. Sambles, "Stationary Surface Plasmons on a Zero-Order Metal Grating", Phys. Rev. Lett., vol. 80, n° 25, p. 5667-5670, jun. 1998, doi: 10.1103/physrevlett.80.5667
- [41] J. Le Perchec, P. Quémerais, A. Barbara, e T. López-Rios, "Why Metallic Surfaces with Grooves a Few Nanometers Deep and Wide May Strongly Absorb Visible Light", Phys. Rev. Lett., vol. 100, n° 6, fev. 2008, doi: 10.1103/physrevlett100.066408
- [42] H. Raether, "Surface plasmons in thin films. Surfaces and on Gratings" (Springer, Berlin, Germany) (1988).
- [43] J. A. Schuller, E. S.Barnard, W. Cai, Y. C. Jun, J. S. White, e M. L. Brongersma, "Plasmonics for extreme light concentration and manipulation", Nature Mater, vol. 9, n° 3, p. 193-204, fev. 2010, doi: 10.1038/nmat2630
- [44] T. López-Rios, D. Mendoza, F. J. García-Vidal, J. Sánchez-Dehesa, e B. Pannetier, "Surface Shape Resonances in Lamellar Metallic Gratings", Phys. Rev. Lett., vol. 81, n° 3, p. 665-668, jul. 1998, doi: 10.1103/physrevlett.81.665
- [45] T. Sondergaard et al., "Plasmonic black gold by adiabatic nanofocusing and absorption of light in ultra-sharp convex grooves", Nat Commun, vol. 3, n° 1, jan. 2012, doi: 10.1038/ncomms1976
- [46] M. Wang et al., "Truncated spherical voids for nearly omnidirectional optical absorption", Opt. Express, vol. 19, n° 21, p. 20642, out. 2011, doi: 10.1364/oe.19.020642
- [47] J. Braun, G. Gompf, G. Kobiela, e M. Dressel, "How Holes Can Obscure The View: Supressed Transmission through an Ultrathin Metal Film by a Subwavelentgh Hole Array", Phys. Rev. Lett., vol. 103, n° 20, nov. 2009, doi: 10.1103/physrevlett.103.203901
- [48] C. Hu, L. Liu, Z. Zhao, X. Chen, e X. Luo, "Mixed plasmons coupling for expanding the bandwidth of near-perfect absorption at visible frequencies", Opt. Express, vol. 17, n° 19, p. 16745, set. 2009, doi: 103.1364/oe.17.016745
- [49] S. A. Maier, Plasmonics: Fundamentals and Applications (Springer, New York) (2007)

- [50] E. Ozbay, "Plasmonics> Merging Photonics and Electronics at Nanoscale Dimensions", Science, vol. 311, n° 5758, p. 189-193, jan. 2006, doi: 10.1126/science.1114849
- [51] D. R. Smith, "Metamaterials and Negative Refractive Index", Science, vol. 305, n° 5685, p. 788-792, ago. 2004, doi: 10.1126/science.1096796
- [52] J. Hao, J. Wang, X. Liu, W. J. Padilla, L. Zhou, e M. Qiu, "High performance optical absorber based on a plasmonic metamaterial", Appl. Phys. Lett., vol. 96, n° 25, p. 251104, jun. 2010, doi: 10.1063/1.3442904
- [53] M. K. Hadeyate, et al., "Design of a Perfect Black Absorber at Visible Frequencies Using Plasmonic Metamaterials", Adv. Mater., vol. 23, n° 45, p. 5410-5414, out. 2011, doi: 10.1002/adma.201102646
- [54] A. V. Zayats, I. I. Smolyaninov, e A. A. Maradudin, "Nano-optics of surface plasmon polaritons", Physics Reports, vol. 408, n° 3-4, p. 131-314, mar. 2005, doi: 10.1016/j.physrep.2004.11.001
- [55] E. N. Economou, "Surface Plasmons in Thin Films", Phys. Rev., vol. 182, n° 2, p. 539-554, jun. 1969, doi: 10.1103/physrev.182.539
- [56] Palik, E. D. "Handbook of Optical Constants of Solids." Academic Press, San Diego. (1985).
- [57] P. Yu et al., "Broadband Metamaterial Absorbers", Advanced Optical Materials, vol. 7, n° 3, p. 1800995, out. 2018, doi: 10.1002/adom.201800995
- [58] Z. Yong, S. Zhang, C. Gong, e S. He, "Narrow band perfect absorber for maximun localized magnetic and electric field enhancement and sensing applications", Sci Rep, vol. 6, n°1, abr. 2016, doi: 10.1038/srep24063
- [59] S. Luo, J. Zhao, D. Zuo, e X. Wang, "Perfect narrow band absorber for sensing applications", Opt. Express, vol. 24, n° 9, p. 9288, abr. 2016, doi: 10.1364/oe.24009288
- [60] C. Argyropoulos, K. Q. Le, N. Mattiucci, G. D'Aguanno, e A. Alù, "Broadband absorbers and selective emitters based on plasmonic Brewster metasurfaces", Phys. Rev. B, vol. 87, n° 20, maio 2013, doi: 10.1103/physrevb.87.205112

- [61] Y. Gong et al., "Highly efficient and broadband mid-infrared metamaterial thermal emmiter for optical gas sensing", Opt. Lett., vol. 42, n° 21, p. 4537, out. 2017, doi: 10.1364/ol.42.004537
- [62] A. Vora, J. Gwamuri, N. Pala, A.Kulkarni, J. M. Pearce, e D. O. Guney, "Exchanging Ohmic Losses in Metamaterial Absorbers with Useful Optical Absorption for Photovoltaics", Sci Rep, vol. 4, n° 1, maio 2014, doi: 10.1038/srep04901
- [63] C. Hagglund, G. Zeltzer, R. Ruiz, A. Wangperawong, K. E. Roelofs, e S. F. Bent, "Strong Coupling of Plasmon and Nanocavity Modes for Dual-Band, Near-Perfect Absorbers and Ultrathin Photovoltaics", ACS Photonics, vol. 3, n° 3, p. 456-463, fev. 2016, doi: 10.1021/acsphotonics.5b00651
- [64] D. Li et al., "Polarization and Thickness Dependent Absorption Properties of Black Phosphorus: New Saturable Absorber for Ultrafast Pulse Generation", Sci Rep, vol. 5, n° 1, out. 2015, doi: 10.1038/srep.15899
- [65] J. Sotor, G. Sobon, W. Macherzynsky, P. Paletko, e K. M. Abramsky, "Black phosphorus saturable absorber for ultrashort pulse generation", Appl. Phys. Lett., vol. 107, n° 5, p. 051108, ago. 2015, doi: 10.1063/1.4927673
- [66] Kreibig, U.; Vollmer, M. Optical Properties of Metal Clusters; Springer Science & Business Media, 2013.
- [67] K. L. Kelly, E. Coronado, L. L. Zhao, e G. C. Schatz, "The Optical Properties of Metal Nanoparticles: The Influence of Size, Shape, and Dielectric Environment", J. Phys. Chem. B, vol. 107, n° 3, p. 668-677, dez. 2002, doi: 10.1021/jp026731y
- [68] L. Lei, S. Li, H. Huang, K. Tao, e P. Xu, "Ultra-broadband absorber from visible to near-infrared using plasmonic metamaterial", Opt. Express, vol. 26, n° 5, p. 5686, fev. 2018, doi: 10.1364/oe.26.005686
- [69] J. Isídio e Esquerre. V. Cosme Rubio-Mercedes, "Características de Propagação de Grades Metálicas Nanométricas," CONNEPI- IFBA, (2013)
- [70] J. A. Monsoriu, Carlos J. Zapata-Rodríguez, E. Silvestre and W. D. Furlan, "Fractal Photonic Crystal Waveguides" Universidad Politécnica de Valencia, E-46022 Valencia, Spain, (2004)
- [71] G. P. Nikishkov, "Introduction to the Finite Element Method," Lecture Notes. University of Aizu, (2004).

- [72] J. E. Akin, "Application and Implementation of Finite-element Methods" (Academic Press, New York, (1982)
- [73] M. Sadiku, Numerical techniques in electromagnetics, 2nd ed. Boca Raton: CRC Press, (2000).
- [74] J.-M. Jin e V. V. Liepa "Application of hybrid finite element method to electromagnetic scattering from coated cylinders", IEEE Trans. Antennas Propagat., vol. 36, n° 1, p. 50-54, 1988, doi: 10.1109/8.1074
- [75] D. H. Norrie, G. de Vries, "An Introduction to finite element analysis" Academic Press (1978)
- [76] A. D. Rakic, A. B. Djurisic, J. M. Elazar, e M. L. Majewsky, "Optical properties of metallic films for vertical-cavity optoelectronic devices", Appl. Opt., vol. 37, n° 22, p. 5271, ago. 1998, doi: 10.1364/ao.37.005271
- [77] Refractive index database, https://refractiveindex.info//, acessado em 11/06/2021
- [78] D. E. Aspnes, "Local-field effects and effective-medium theory: A microscopic perspective", American Journal of Physics, vol. 50, n° 8, p. 704-709, ago. 1982, doi: 10.1119/1.12734
- [79] O. Abed e L. Yousefi, "Tunable metasurfaces using phase change materials and transparente graphene heaters", Opt. Express, vo. 28, n° 23, p.33876, out. 2020, doi: 10.1364/oe.404103
- [80] J. Zhang, Y. Zhang, Q. Hong, W. Xu, Z. Zhu, e X. Yuan, "Near-Infrared Rewritable, Non-Volatile Subwavelength Absorber Based on Chalcogenide Phase Change Materials", Nanomaterials, vol. 10, n° 6, p. 1222, jun. 2020, doi: 10.3390/nano10061222
- [81] H.-D. Jeong e S.-Y. Lee, "Tunable Plasmonic Absorber Using a Nanoslit Array Patterned on a Ge₂Sb₂Te₅ Inserter Fabry-Pérot Resonator", J. Lightwave Technol., vol.36, n° 24, p. 5857-5862, dez. 2018, doi: 10.1109/jlt.2018.2878861.
- [82] X. Tian et al., "Wavelength-seletive, tunable and switchable plasmonic perfect absorbers based on phase change materials Ge₂Sb₂Te₅", EPL, vol. 128, n° 6, p.67001, fev.2020, doi: 10.1209/0295-5075/128/67001
- [83] W. Cai, J. S. White, e M. L. Brongersma, "Compact, High-Speed and Power-Efficient Electrooptic Plasmonic Modulators", Nano Lett, vol. 9, no 12, p. 4403-4411, out: 2009, doi: 10.1021/nl902701b

- [84] X. Shi, C. Chen, S. Liu, e G. Li, "Nonvolatile, Reconfigurable and Narrowband Mid-Infrared Filter Based on Surface Lattice Resonance in Phase Change Ge₂Sb₂Te₅", Nanomaterials, vol.10, no 12, p.2530, dez. 2020, doi: 10.3390/nano10122530
- [85] H. Shin, M. F. Yanik, S. Fan, R. Zia, e M. L. Brongersma, "Omnidirectional resonance in a metal-dielectric-metal geometry", Appl. Phys. Lett., vol. 84, n° 22, p. 4421-4423, maio 2004, doi: 10.1063/1.1758306
- [86] H. Kocer, S. Butun, Z. Li, e K. Aydin, "Reduced near-infrared absorption using ultra-thin lossy metals in Fabry-Perot cavities", Sci Rep, vol. 5, no 1, fev. 2015, doi: 10.1038/srep08157
- [87] I. L. Gomes de Souza, V. F. Rodriguez-Esquerre, e D. F. Rêgo, "Wide-angle filters based on nanoresonators for the visible spectrum", Appl. Opt., vol. 57, n° 23, p.6755, ago. 2018, doi: 10.1364/ao.57.006755
- [88] J. Raty, M. Schumacher, P. Golub, V. L. Deringer, C. Gatti, e M. Wuttig, "A Quantum-Mechanical Map for Bonding and Properties in Solids", Adv. Mater., vol. 31, n° 3, p.1806280, nov. 2018, doi: 10.1002/adma.201806280
- [89] S. G.-C. Carrilo, A. M. Alexeev, Y.-Y. Au, e C.D. Wright, "Reconfigurable phase-chang meta-absorbers with on-demand quality factor control", Opt. Express, vol. 26, no 20, p. 25567, set. 2018, doi: 10.1364/oe.26.025567
- [90] K. -T. lee, S. Seo, e L. J. Guo, "High-Color-Purity Subtractive Color Filters with a Wide Viewing Angle Based on Plasmonic Perfect Absorbers", Advanced Optical Materials, vol. 3, n° 3, p. 347-352, jan. 2015, doi: 10.1002/adom.201400533
- [91] Macleod, H. A.Thin-Film Optical Filters, CRC Press.Institute of Physics, BR, USA, 2001.
- [92] S. Abdollahramezani et al., "Dynamic Hybrid Metasurfaces", Nano Lett., Vol 21, n°3, pág. 1238-1245, jan 2021, doi 10.1021/acs.nanolett.0c03625