

UNIVERSIDADE FEDERAL DE MINAS GERAIS
TESE DE DOUTORADO

**Forças óticas em guias de onda
acoplados e fabricação de
nano-ilhas de MoS₂ via SPM**

Autor: Thales Fernando Damasceno Fernandes

Orientador: Bernardo Ruegger Almeida Neves

Coorientador: Pierre-Louis de Assis

Tese apresentada à Universidade Federal de Minas

Gerais como requisito parcial para a obtenção do

grau de Doutor em Ciências - Física

Área de concentração: Física

16 de Outubro de 2018

«The most beautiful thing we can experience is the mysterious. It is the source of all true art and science. He to whom the emotion is a stranger, who can no longer pause to wonder and stand wrapped in awe, is as good as dead — his eyes are closed. The insight into the mystery of life, coupled though it be with fear, has also given rise to religion. To know what is impenetrable to us really exists, manifesting itself as the highest wisdom and the most radiant beauty, which our dull faculties can comprehend only in their most primitive forms — this knowledge, this feeling is at the center of true religiousness.»

Albert Einstein

Resumo

Esta tese é dividida em duas partes: na primeira, estudamos fotônica integrada e forças óticas em sistemas de guias de onda e, na segunda, estudamos as alterações propositais de um semicondutor 2D visando customizar suas propriedades óticas.

Para a primeira parte, um estudo detalhado das forças óticas, que ocorrem em sistemas de guias de onda acoplados, é feito, onde explicamos e calculamos a força de batimento que surge nesse sistema. Essa força ótica até então era ignorada ou apenas mal interpretada na literatura. Essa força ótica difere drasticamente das forças óticas usuais nesse tipo de sistema, que podem ser ou atrativas ou repulsivas. Já a força de batimento não é nem atrativa ou repulsiva, mas pode atuar no centro de massa do sistema, dessa maneira possibilitando acelerar os guias de onda em uma certa direção. A origem dessa força de batimento é devido a transferência de momento transversal que ocorre em guias de onda acoplados quando eles são excitados em uma superposição de modos normais do sistema. Dessa maneira, a energia irá oscilar entre um guia de onda e o outro, o que irá gerar uma troca de momento entre luz e matéria e, conseqüentemente, uma força nos guias de onda. O estudo dessa força foi realizado tanto analiticamente quanto por simulações por elementos finitos (FEM - *Finite Element Method*) e foi observado que esta força varia com a direção de propagação. Como a força em sistemas eletromagnéticos varia com o quadrado dos campos eletromagnéticos, quando se excita uma soma de modos normais do sistema, haverá sempre um batimento no sistema. Cálculos explícitos dessa força ótica concordam com uma modelagem heurística, derivada a partir da transferência de momento entre

os guias de onda. Nosso resultado demonstram que nesse tipo de sistema o momento associado pode ser o de Minkowski. Posteriormente, o calculo da força de batimento é generalizado para o caso de guias curvos e superposições arbitrárias e comparada com diferentes modelos de forças, onde as principais diferenças entre cada modelo são demonstradas.

Para a segunda parte da tese, foi usado o processo de oxidação local (LAO – *Local Anodic Oxidation*) via técnicas de microscopia de varredura por sonda (SPM – *Scanning Probe Microscopy*) para oxidar MoS₂ multicamadas. Foi visto que sem um ajuste fino do processo de LAO é possível criar monocamadas de MoS₂ de tamanhos, geometrias e posicionamento variados. Essas monocamadas estão cobertas em óxido de molibdênio, criando uma heteroestrutura MoS₂-MoO₃. Foi observado que nessas heteroestruturas há um aumento na luminescência (PL - *Photoluminescence*) de até duas ordens de magnitude. A origem desse aumento está relacionada à retirada de cargas do MoS₂ pelo MoO₃, dessa maneira fazendo a emissão do MoS₂ ser predominantemente de éxcitons neutros ao invés de trions, o que consiste de uma emissão muito mais eficiente.

Abstract

This thesis is divided into two parts: in the first part, we have studied integrated photonics and optical forces in coupled waveguide systems and, in the second part, the tuning in the optical properties of 2D semiconductors.

For the first part, a detailed study of the optical forces, that appear in coupled waveguide systems, is made, where we explained and calculated correctly the beating force that appears in this system. Where this force, until then, was ignore or badly interpreted in the literature. This optical force differs drastically from the usual optical forces in this type of system, which can be either attractive or repulsive. The beating force is neither attractive nor repulsive, but it can acts in the center of mass of the system, thus, making it possible to accelerate the waveguides in a certain direction. The origin of this beating force is due to transverse moment transfer occurring in coupled waveguides when they are excited in a superposition eigenmodes. This way, the energy will oscillate between one waveguide and another, which will generate a momentum exchange between light and matter and, consequently, a force in the waveguides. The study of this force was performed both analytically and by finite element simulations (FEM - Finite Element Method) and it was observed that this force varies with the direction of propagation. As the force in electromagnetic systems varies with the square of the electromagnetic fields, when a sum of modes of the system is excited, there will always be a beating in the system. Explicit calculations of this optical force agree very well with the heuristics conception derived from the momentum transfer between the waveguides. Our results demonstrate that in this type of system the associated moment is probably Minkowski's one.

Later, the calculation of the beating force is generalized for the case of curved waveguides with arbitrary superpositions and compared with different force models, where it was shown the main differences among the models.

For the second part of this work, Local Anodic Oxidation (LAO) was used via scanning probe microscopy (SPM) techniques to oxidize multilayer MoS₂. It was seen that without a fine tuning of the LAO process it is possible to create MoS₂ monolayers of varying sizes, geometries, and positioning. These monolayers are covered with molybdenum oxide, creating a MoS₂-MoO₃ heterostructure. It has been observed that in these heterostructures, there is an increase in luminescence (PL) of up to two orders of magnitude. The origin of this increase is related to the charges withdrawal from MoS₂ by MoO₃, thus making the MoS₂ emission predominantly originated from neutral excitons rather than trions, which consists of a much more efficient emission.

Agradecimentos

À Karina, por ter me incentivado a ingressar na iniciação científica e assim dar início a essa nova formação e uma mudança de vida bastante promissora.

Por sempre estar ao meu lado me apoiando, dando sentido e propósito a minha vida.

Ao professor Bernardo, pela oportunidade a mim dada, me orientando e aconselhando sempre que preciso e por ter me mostrado essa nova área da ciência.

Ao professor Pierre-Louis, por ter me mostrado sobre esse mundo da fotônica e estar sempre disponível 24/7 no *Hangouts*.

Ao professor Luiz Cury, por ter sempre disponibilizado o laboratório e me ajudado.

Aos meus pais, por terem me embarcado nessa formação acadêmica de qualidade.

À todo o pessoal do Labnano e demais laboratórios, por sempre estarem dispostos a ajudar.

À UFMG pela infraestrutura.

À CNPq, CAPES e FAPEMIG pelo financiamento.

Conteúdo

Resumo	ii
Abstract	iv
Agradecimentos	vi
I Fotônica	1
1 Introdução	2
2 Força Ótica	9
2.1 Tensor de <i>stress</i>	9
2.2 Média temporal	10
2.3 Força total	12
2.4 Densidade de força	14
2.5 Força de dipolo	16
3 Deformação de Sólidos	19
4 Força de Batimento	21
4.1 Superposição	21
4.2 Centro de energia	25
4.3 Heurística	29

4.4	Simulação Ótica	30
4.5	Simulação Estrutural	38
4.6	Conclusão	44
5	Força Ótica em Meios Dielétricos	48
5.1	Introdução	48
5.2	Tensor de Stress Geral	49
5.2.1	Densidade de Força	50
5.3	Simulação	54
5.4	Conclusão	60
II	Fabricação de Nano-ilhas de MoS₂ via SPM	64
6	Introdução	65
7	Material e Técnicas	68
7.1	MoS ₂	68
7.2	Microscopia de Força Atômica (AFM)	70
7.2.1	Modos de Operação	71
	Modo Contato	73
	Modo Não-Contato e <i>tapping</i>	74
7.3	Oxidação Anódica Local (LAO)	77
7.4	Espectroscopia Raman	80
7.4.1	Espectro Raman do MoS ₂	81
7.5	Espectroscopia de Fotoluminescência	83
7.5.1	Éxciton em MoS ₂	85
7.5.2	Trions em MoS ₂	86

	ix
7.5.3 Espectro de Fotoluminescência do MoS ₂	87
8 Preparação de Amostras e Métodos	91
8.1 Substrato de Ouro	91
8.2 MoS ₂	91
8.3 AFM	93
8.4 LAO	93
8.5 Micro-fotoluminescência e micro-Raman	94
9 Nanofabricação de monocamadas de MoS₂	95
9.1 Conclusão	109
Conclusão Geral e Perspectivas	110
A Ortogonalidade de <i>eigenmodes</i>	114
B Guias de Onda Duplamente Ancorados	117
C Guias de Onda Ancorados em Apenas uma Extremidade	120
Bibliografia	122

Parte I

Fotônica

Capítulo 1

Introdução

Circuitos Integrados Fotônicos (PICs – *Photonic Integrated Circuits*) têm se tornado uma área muito importante no desenvolvimento tecnológico nas últimas décadas [1–7] por oferecerem vantagens sobre circuitos eletrônicos convencionais a base de silício, como: altas velocidades de processamento [8], não possuir aquecimento devido ao efeito Joule, poderem ser integrados junto com circuitos eletrônicos para funções adicionais, alta largura de banda (*bandwidth*) [9, 10], funcionamento em frequências óticas e possibilidade de serem fabricados de uma gama variada de materiais que podem ser calibrados para aplicações bem específicas.

Um dos elementos mais importantes em PICs são guias de onda óticos, que consistem de uma estrutura que confina luz na direção transversa à direção de propagação. Para a luz ser confinada, é necessário ter um meio dielétrico com um índice de refração n_1 maior do que o meio n_2 ao seu redor ($n_1 > n_2$), de forma que ocorra reflexão interna total. Na Fig. 1.1 temos um exemplo de reflexão interna total acontecendo em um guia de onda. Se o ângulo que a luz faz com a normal dentro do material (θ_1) é maior do que

o ângulo crítico¹, a luz não consegue sair do guia de onda e então propagará dentro do dielétrico, conforme ilustrado na Fig. 1.1(b). Caso o ângulo seja menor que o ângulo crítico, a luz poderá deixar o guia de onda e a propagação ocorrerá com perdas no sistema como mostrado na Fig. 1.1(a).

Essa é uma descrição do sistema usando puramente ótica geométrica, que, devido ao tamanho e geometria que são comparáveis ou menores do que o comprimento de onda da luz, não captura totalmente as características do sistema [11]. Nesse caso, a natureza ondulatória da luz deve ser levada em consideração, pois, devido a interferências que podem ocorrer quando a luz propaga em um guia de onda, haverá uma discretização dos possíveis ângulos que a permitem propagação: apenas ângulos onde há uma propagação coerente são possíveis [11]. Devido aos ângulos de propagação serem diferentes, a velocidade de propagação de cada modo também será diferente e ditada pelo ângulo. Dessa maneira, as características geométricas do guia de onda, assim como o material que é feito, são de extrema importância para se determinar como os modos vão propagar.

Outra característica muito importante em guias de onda, além de sua discretização em modos, é o fato de haver campos evanescentes. Ou seja, o campo fora do guia de onda decai exponencialmente. Assim sendo, a luz não propaga inteiramente dentro do guia de onda, mas sim parcialmente fora do guia. Isso possibilita que guias de onda próximos um ao outro interajam mediante a sobreposição de seus campos evanescentes. Esse sistema de guias de onda acoplados (CWS – *Coupled Waveguide Systems*) possui o seu

¹Pela lei de Snell temos $n_1 \sin \theta_1 = n_2 \sin \theta_2$. Se $\theta_2 = \pi/2$, temos que a luz não consegue escapar do material e temos o fenômeno de reflexão interna total. O ângulo θ_1 para que isso ocorra chama-se ângulo crítico.

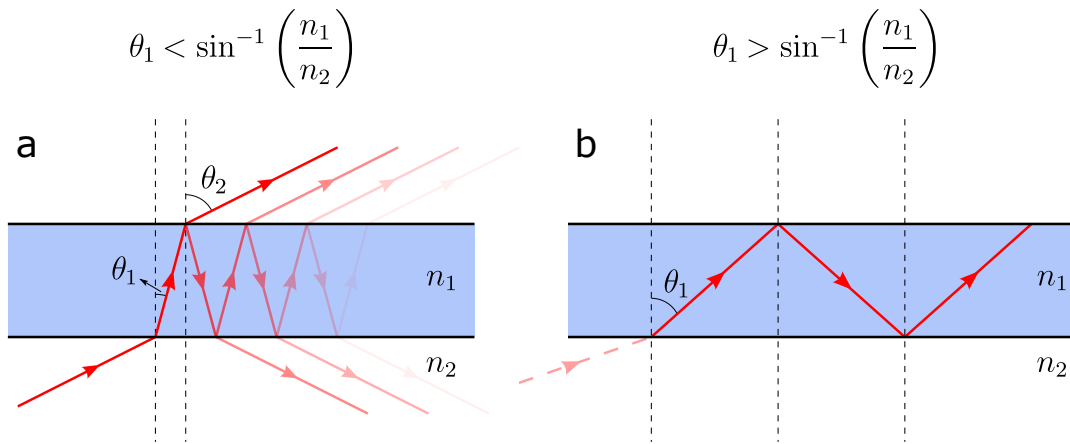


FIGURA 1.1: Diagrama do caminho óptico da luz em um guia de onda de índice de refração n_1 em um meio de índice de refração n_2 , de tal maneira que $n_1 > n_2$. Em (a) tem-se que o ângulo θ_1 com a normal do material é menor que o ângulo crítico $\sin^{-1}(n_1/n_2)$, dessa maneira a luz escapa parcialmente a cada reflexão. Em (b) tem-se que o ângulo θ_1 é maior do que o ângulo crítico, dessa maneira a luz fica para sempre confinada dentro do guia de onda e a propagação ocorre sem perdas.

próprio conjunto de modos, que são diferentes dos modos dos guias de onda individuais. Para o caso de dois guias de onda idênticos, os modos do sistema total poderão ser simétricos ou antissimétricos em relação ao centro dos guias de onda, podendo ter polarização TE ou TM [12]. Devido à diferente velocidade de propagação dos modos, quando o sistema é excitado em uma superposição de modos a energia poderá ser trocada entre os guias de onda, analogamente ao que acontece a um sistema quântico excitado em uma superposição de modos. Nestes casos, a diferença na energia dos modos irá fazer com que população de cada nível oscile no tempo. Para o caso de guias de onda acoplados evanescentemente, apesar da energia total do sistema ser constante, a energia de cada guia de onda irá oscilar com a direção de propagação assim como o momento, para uma determinada escolha de modos. A habilidade do CWS de transferir a energia injetada de um guia de onda para o outro é a base do funcionamento de divisores de feixe [13, 14] assim como

acopladores direcionais [15, 16], que são elementos básicos para o roteamento e direcionamento da luz em circuitos fotônicos.

As Figs. 1.2(a, b) mostram o modo simétrico (magenta) e antissimétrico (amarelo) de dois guias de onda acoplados, assim como o modo de cada guia individualmente, vermelho e azul. Para esse caso específico, o modo total do sistema Fig. 1.2(b) pode ser pensado como uma soma (simétrico) e uma subtração (antissimétrico) dos modos individuais como os da Fig. 1.2(a). Tal aproximação é a base da teoria de modos acoplados (CMT – *Coupled-Mode Theory*) [17–19] e é uma ferramenta extremamente útil para obter resultados rápidos sem necessidade de cálculos computacionais muito intensos. A Fig. 1.2(c) mostra o índice efetivo para um par de guias de onda acoplados. O índice efetivo, assim como o índice de refração, está relacionado a velocidade de propagação da luz no meio. Devido ao fato de que o meio não é homogêneo, a distribuição de campos irá mudar a velocidade de propagação da luz, e, conseqüentemente, o índice efetivo. Quando a separação entre os guias de onda aumenta, o sistema deixa de ser acoplado evanescentemente e passa a se comportar como guias de onda isolados degenerados.

Se a superposição dos modos é propagada, temos a formação de batimento, mostrada na Fig. 1.3. Nesse caso, energia e momento são trocados entre os guias de onda na direção transversal à propagação. Devido à energia de cada guia de onda oscilar, haverá um momento transversal oscilante entre os guias de onda. Esse é um ponto crucial na análise que irá se seguir posteriormente.

Para um único guia de onda de seção quadrada, o campo eletromagnético irá ter magnitude idêntica em faces opostas. Para um par de guias de onda,

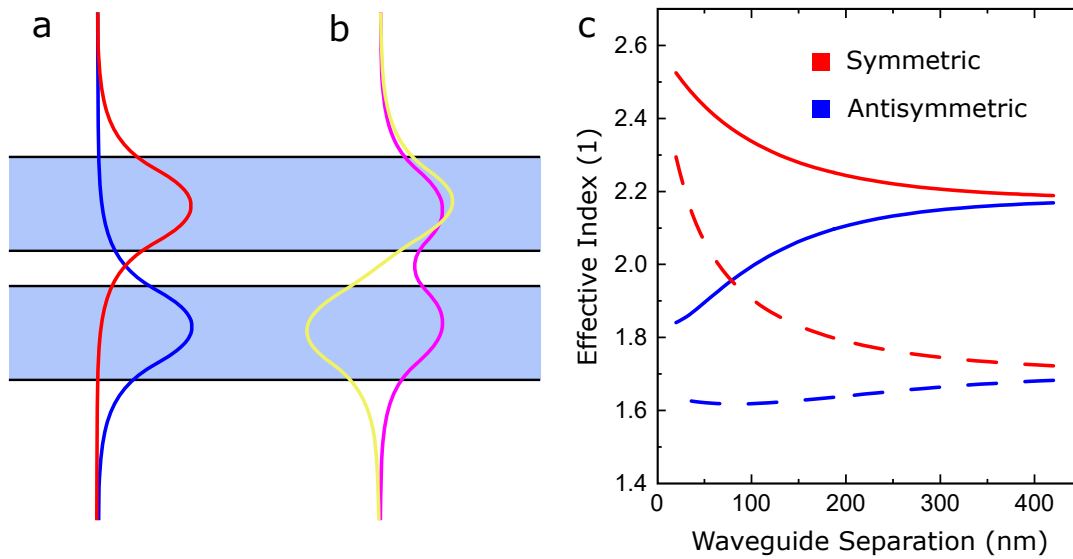


FIGURA 1.2: Modos de um sistema de guias de onda acoplados. Em (a) são mostrados os modos dos guias de onda isolados em vermelho e azul. Em (b) são mostrados os modos do sistema total, com o modo simétrico em magenta e o modo antissimétrico em amarelo. Em (c) é mostrado o índice efetivo para um par de guia de onda acoplados. Em vermelho é mostrado o modo simétrico e em azul o antissimétrico, sendo que a curva solida mostra o modo TE, enquanto a curva tracejada o TM.

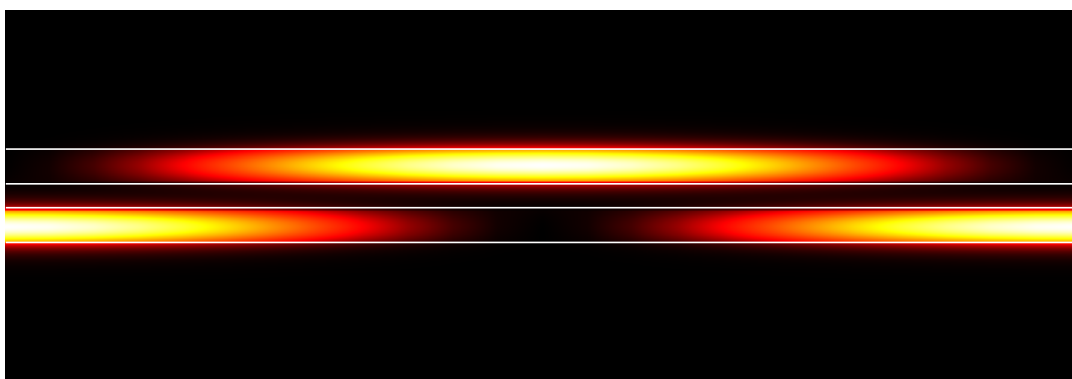


FIGURA 1.3: Simulação de um par de guias de onda acoplados onde é injetado superposição de modos. Em cores é mostrado a energia do sistema, onde preto indica nenhuma energia e amarelo e branco alta energia. As linhas horizontais brancas indicam a fronteira dos guias de onda.

o mesmo não ocorre devido a quebra de simetria dessas faces opostas. Dessa maneira, o campo vai ser mais intenso em uma das faces de um guia de onda do que em sua face oposta. Essa diferença de intensidade em faces opostas do guia de onda cria uma pressão de radiação que gera uma força entre os guias de onda. Para os modos do sistema, essa força poderá ser atrativa para modos simétricos ou repulsiva para modos antissimétricos [20, 21]. Se os guias de onda se encontram suspensos ao invés de serem ancorados a um substrato, eles poderão se atrair ou repelir segundo o modo excitado no sistema. Isso é um fenômeno extremamente interessante e que possibilita gerar não-linearidades mecânicas de Kerr com ordens de magnitude maiores do que convencionais não-linearidades de Kerr [22–24], ou criar memórias não-voláteis devido à flambagem em guias de onda [25]. Na Fig. 1.4 temos dois guias de onda onde um modo simétrico/antissimétrico (a/b) é propagado, o que gera uma deformação no sistema, aproximando/repelindo os guias de onda. A deformação do guia irá mudar a velocidade de propagação naquela seção transversal, assim como os perfis do modo, o que em contrapartida irá mudar as forças no sistema. Logo para um entendimento completo é necessário acoplar deformações mecânicas com onda eletromagnéticas em uma única simulação.

Uma pergunta importante a ser feita nesse sistema: caso a propagação não seja um modo do sistema, mas sim uma superposição de modos, como isso irá afetar as forças do sistema? Superposição de modos no contexto de força ótica é um assunto raramente abordado e geralmente mal interpretado ou apenas ignorado completamente [26, 27]. Esse é um ponto que é mais estudado no contexto de espalhamento Brillouin [28–30]. A dificuldade no

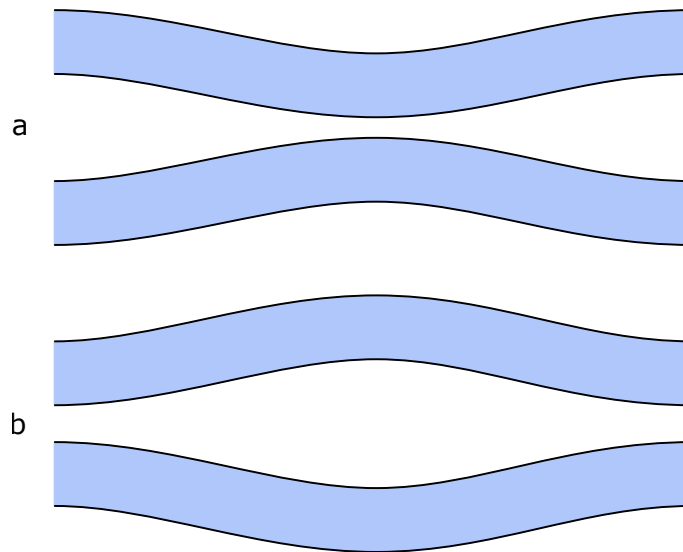


FIGURA 1.4: Diagrama demonstrando um sistema de guias de onda sendo deformado por forças óticas. Em (a) é mostrado as forças do modo simétrico (força atrativa). Em (b) é mostrado as forças do modo antissimétrico (força repulsiva).

tratamento de superposição vem do fato de que forças óticas dependem do quadrado dos campos, como será visto nas próximas seções, dessa maneira a força resultante não é apenas a soma das forças dos modos individuais, existirá um termo adicional que deve ser levado em consideração e apropriadamente calculado para se ter uma análise correta do sistema. É importante ressaltar que a análise que faremos trata apenas de situações estáticas, dessa maneira diferindo drasticamente do tratamento usual em espalhamento Brillouin, onde deformações dinâmicas do sistema são acopladas e os fótons nos guias de onda são espalhados por fônons, provenientes de vibrações mecânicas dos guias de onda. Com isso, para se ter espalhamento Brillouin, é estritamente necessário ter vibrações no sistema. Porém, no nosso sistema, não existem fônons e a força que surge é de outra origem e não do espalhamento fóton-fônon.

Capítulo 2

Força Ótica

Nesse capítulo será abordado como é feito o cálculo da força ótica em meios dielétricos. Apresentaremos o formalismo do tensor de *stress* de Maxwell e o das forças de dipolo induzidas por campos inomogêneos, onde será mostrado o processo de média temporal e o calculado da densidade de força.

2.1 Tensor de *stress*

Forças óticas é um assunto que gera controvérsias há mais de um século, onde até hoje não existe um consenso geral de qual é o modelo correto para se calcular forças em meios diferentes do vácuo [31–35]. Isso se dá pelo fato de que diferentes formulações predizem a mesma força quando aplicadas para o vácuo, porém predizem forças completamente diferentes quando aplicadas a matéria. Forças óticas não são grandezas deriváveis a partir das equações de Maxwell, mas sim algo que deve ser postulado [31]. Logo, sistemas diferentes requerem modelos de forças diferentes para serem consistentes com experimentos.

Então a pergunta principal que devemos fazer é: qual é o modelo de força correto para o sistema estudado? Historicamente, para o caso de guias

de onda acoplados, os modelos de força mais usados são o modelo de Lorentz [20, 21, 36], e o de Minkowski [37, 38], onde ambos são ambigualmente chamados de tensor de *stress* de Maxwell (MST – *Maxwell Stress Tensor*)¹, assim como um modelo derivado por Povinelli et al. [20] que tem como base o princípio variacional.

O tensor de Maxwell [11] \mathcal{T} pode ser escrito como:

$$\mathcal{T} = \varepsilon_0 \left(\boldsymbol{\mathcal{E}} \otimes \boldsymbol{\mathcal{E}} - \frac{\mathbb{1}}{2} \boldsymbol{\mathcal{E}} \cdot \boldsymbol{\mathcal{E}} \right) + \mu_0 \left(\boldsymbol{\mathcal{H}} \otimes \boldsymbol{\mathcal{H}} - \frac{\mathbb{1}}{2} \boldsymbol{\mathcal{H}} \cdot \boldsymbol{\mathcal{H}} \right), \quad (2.1)$$

onde $\boldsymbol{\mathcal{E}}$ e $\boldsymbol{\mathcal{H}}$ são os campos elétrico e magnético dependentes do tempo, respectivamente, $\mathbb{1}$ é a matriz identidade, e ε_0 e μ_0 são a permissividade e permeabilidade do vácuo, respectivamente.

2.2 Média temporal

Para deformações mecânicas, apenas a média temporal das quantidades eletromagnéticas é relevante, devido ao fato da luz oscilar em frequências muito altas em comparação às frequências mecânicas típicas. Dessa maneira, para o cálculo de forças óticas a partir do tensor de Maxwell é necessário tomar médias temporais em um período ótico, dessa maneira eliminando oscilações rápidas do sistema. Como a grande maioria das grandezas que serão utilizadas constituem grandezas quadráticas no campo, iremos derivar como o operador média temporal $\langle \rangle$ opera em uma quantidade quadrática qualquer.

¹Para o cálculo do MST parte-se da força de Lorentz para se achar um tensor que é capaz de gerar essa distribuição de forças, dessa maneira, ambos reproduzem a mesma força, apesar de um ser representado como tensor de *stress* (MST) enquanto outro como densidade de força (Lorentz) [11]. Porém, algumas vezes o tensor de Minkowski também é chamado de MST, e cada fonte atribui diferente nomenclatura a esse tensor [37, 38].

Seja \otimes um operador bilinear qualquer, podendo constituir de multiplicação, produto escalar, produtor tensorial, produto vetorial, ou qualquer outro operador com essas propriedades, seja também $\mathcal{A}(t) = \mathbf{A} \exp(i\omega t)$ e $\mathcal{B}(t) = \mathbf{B} \exp(i\omega t)$ duas grandezas que oscilam harmonicamente no tempo t com frequência ω , a média temporal de $\mathcal{C} = \mathcal{A} \otimes \mathcal{B}$ é:

$$\begin{aligned}
\langle \mathcal{C} \rangle &= \int_0^{\frac{2\pi}{\omega}} \text{Re}(\mathcal{A}) \otimes \text{Re}(\mathcal{B}) dt, \\
&= \int_0^{\frac{2\pi}{\omega}} \text{Re}(\mathbf{A}e^{i\omega t}) \otimes \text{Re}(\mathbf{B}e^{i\omega t}) dt, \\
&= \frac{1}{4} \int_0^{\frac{2\pi}{\omega}} (\mathbf{A}e^{i\omega t} + \mathbf{A}^*e^{-i\omega t}) \otimes (\mathbf{B}e^{i\omega t} + \mathbf{B}^*e^{-i\omega t}) dt, \\
&= \frac{1}{4} \int_0^{\frac{2\pi}{\omega}} (\mathbf{A} \otimes \mathbf{B}e^{2i\omega t} + \mathbf{A}^* \otimes \mathbf{B}^*e^{-2i\omega t} + \mathbf{A} \otimes \mathbf{B}^* + \mathbf{A}^* \otimes \mathbf{B}) dt, \\
&= \frac{1}{4} (\mathbf{A} \otimes \mathbf{B}^* + \mathbf{A}^* \otimes \mathbf{B}), \\
&= \frac{1}{2} \text{Re}(\mathbf{A} \otimes \mathbf{B}^*), \tag{2.2}
\end{aligned}$$

onde na última linha foi feita uma simplificação e usado o operador parte real Re . Logo, o operador média temporal pode ser entendido da seguinte maneira: conjuga o segundo termo do produto, e depois toma a metade da parte real. Aplicando a média temporal ao tensor de Maxwell, temos:

$$\langle \mathcal{T} \rangle = \frac{\epsilon_0}{2} \left(\text{Re}(\mathbf{E} \otimes \mathbf{E}^*) - \frac{\mathbb{1}}{2} \mathbf{E} \cdot \mathbf{E}^* \right) + \frac{\mu_0}{2} \left(\text{Re}(\mathbf{H} \otimes \mathbf{H}^*) - \frac{\mathbb{1}}{2} \mathbf{H} \cdot \mathbf{H}^* \right), \tag{2.3}$$

onde foi usado o fato de que $\text{Re}(\mathbf{A} \cdot \mathbf{A}^*) = \mathbf{A} \cdot \mathbf{A}^*$, que é válido para qualquer vetor independente do tempo \mathbf{A} .

2.3 Força total

Para o cálculo da força ótica a partir do tensor de Maxwell, é necessário usar a equação de balanço de força no sistema [11], que é dada por:

$$\mathcal{F} + \partial_t \mathcal{G} = \nabla \cdot \mathcal{T}, \quad (2.4)$$

onde \mathcal{F} é a densidade de força dependente do tempo e \mathcal{G} é a densidade de momento eletromagnético dependente do tempo. Tomando a média temporal temos:

$$\langle \mathcal{F} \rangle + \underbrace{\langle \partial_t \mathcal{G} \rangle}_{=0} = \nabla \cdot \langle \mathcal{T} \rangle, \quad (2.5)$$

onde $\langle \partial_t \mathcal{G} \rangle = 0$ segue da definição da média temporal e é válido para qualquer derivada de quantidades quadráticas quando os campos variam harmonicamente. Caso se tenha um sistema onde os campos são compostos de múltiplas frequências, esse termo deve ser considerado, além do fato que nesse caso não se tem um período bem definido para se calcular a média temporal e a força total oscilará com um batimento temporal.

Logo, temos uma expressão que correlaciona densidade de força com o tensor de Maxwell. Se quisermos a força em um guia de onda, basta integrar essa densidade de força no volume Ω delimitado pelo guia de onda. Dessa maneira a força \mathbf{F} em um guia de onda pode ser escrita como:

$$\mathbf{F} = \iiint_{\Omega} \nabla \cdot \langle \mathcal{T} \rangle \, dV. \quad (2.6)$$

Como temos uma integral volumétrica do divergente, podemos usar o

teorema da divergência para simplificar a integral, eliminando assim as derivadas espaciais. Seja Γ a superfície que limita o volume Ω , temos então:

$$\mathbf{F} = \iint_{\Gamma} \langle \mathcal{T} \rangle \cdot \hat{\mathbf{n}} dS, \quad (2.7)$$

onde $\hat{\mathbf{n}}$ é a normal para fora da superfície Γ .

É importante lembrar que Γ consiste de todas as faces do guia de onda. No caso de guias de onda retangulares, Γ consiste de suas 6 faces. Esse fato será de extrema importância para o cálculo correto das forças quando se tem superposição de modos, como será mostrado nas próximas seções.

Um fator que na maioria das vezes é ignorado ou raramente mencionado na literatura é o fato de que o campo eletromagnético nas fronteiras entre materiais é descontínuo. Sendo assim, na Eq. (2.7) qual deve ser o campo utilizado para o cálculo da força? O campo fora, dentro ou a média dos campos?

Para o cálculo correto, deve-se usar a forma descontínua do teorema da divergência, que será deduzida com base na Fig. 2.1. Nela iremos particionar o volume Ω em duas regiões, uma Ω^- que é uma região interior ao volume e uma região $\delta\Gamma$ que é um volume que consiste em dar uma espessura infinitesimal a superfície Γ . Dessa maneira temos $\Omega = \Omega^- \cup \delta\Gamma$.

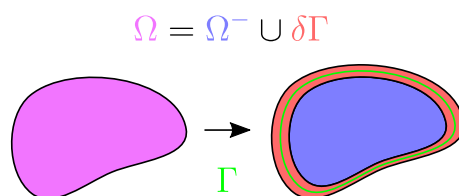


FIGURA 2.1: O volume Ω e sua fronteira Γ é modificado para um volume Ω^- , que consiste na região interna de Ω e um outro volume $\delta\Gamma$ que consiste em dar uma espessura infinitesimal a Γ , de tal maneira que $\Omega = \Omega^- \cup \delta\Gamma$.

Integrando a força usando a Eq. (2.6) e dividindo em duas integrais, temos:

$$\begin{aligned}\mathbf{F} &= \iiint_{\Omega^- \cup \delta\Gamma} \nabla \cdot \langle \mathcal{T} \rangle dV \\ &= \iiint_{\Omega^-} \nabla \cdot \langle \mathcal{T} \rangle dV + \iiint_{\delta\Gamma} \nabla \cdot \langle \mathcal{T} \rangle dV.\end{aligned}\quad (2.8)$$

Usando o teorema da divergência em cada termo e usando $\hat{\mathbf{n}}$ como sendo sempre a normal para fora:

$$\begin{aligned}\mathbf{F} &= \iint_{\Gamma} \langle \mathcal{T}_{\text{in}} \rangle \cdot \hat{\mathbf{n}} dS + \iint_{\Gamma} [\langle \mathcal{T}_{\text{in}} \rangle \cdot (-\hat{\mathbf{n}}) + \langle \mathcal{T}_{\text{out}} \rangle \cdot \hat{\mathbf{n}}] dS \\ &= \iint_{\Gamma} \langle \mathcal{T}_{\text{out}} \rangle \cdot \hat{\mathbf{n}} dS,\end{aligned}\quad (2.9)$$

onde usamos o fato que a superfície que limita tanto Ω^- e $\delta\Gamma$ é Γ , devida ao tamanho infinitesimal de $\delta\Gamma$, e *in* e *out* indicam o campo dentro ou fora do guia de onda, respectivamente. Logo, o campo a ser utilizado para o cálculo das forças é o campo do lado de fora do guia de onda, ou mais precisamente, fora da região de integração. Quando o campo não é descontínuo, o campo fora e dentro são os mesmos, dessa maneira, esse método também é aplicado a campos contínuos.

2.4 Densidade de força

Apesar de termos uma fórmula para o cálculo da força, para muitas aplicações conhecer apenas a força total no guia de onda não é suficiente. Para isso, a densidade de força linear $\mathbf{q} = \partial_z \mathbf{F}$ geralmente é usada, pois ela captura mudanças na força com a direção de propagação z do sistema e, portanto, é uma

ferramenta ideal para o cálculo de deformações nesse tipo de sistema.

A fórmula usada para o cálculo de \mathbf{q} é dado por:

$$\mathbf{q} = \oint_C \langle \mathcal{T}_{\text{out}} \rangle \cdot \hat{\mathbf{n}} dl, \quad (2.10)$$

onde a fronteira C é a borda do guia de onda para um z fixo. Onde foi derivado (2.9) em z , transformando uma integral de área em uma integral de linha. Apesar de parecer uma derivação razoável, essa derivação está errada, como será visto posteriormente, pois ela ignora duas superfícies na integral em (2.9) no plano z , que aqui chamaremos de tampas. Apesar da (2.10) estar incorreta e com um termo faltante, ela é a fórmula usada na literatura para o cálculo dessa densidade de força \mathbf{q} . Mesmo com seu erro, essa fórmula é capaz de reproduzir resultados corretos concordando com outras técnicas quando se trata dos modos do sistema.

Uma alternativa ao cálculo de força ótica que não requer tensor de *stress* ou densidade de força é o método empregado por Povinelli et al. [20], que consiste em usar o princípio variacional, assim, iremos chamá-lo de método variacional numérico. A densidade de força ótica é dada por:

$$\mathbf{q} = \frac{1}{c} \frac{\partial n_{\text{eff}}}{\partial g} \hat{\mathbf{g}}, \quad (2.11)$$

onde c é a velocidade da luz, n_{eff} é o índice de refração efetivo do meio, e g é uma variação na geometria do sistema, que geralmente é a separação entre os guias da onda. O índice efetivo está relacionado diretamente com a velocidade de propagação no meio e é o autovalor da equação de Maxwell para um modo do sistema. Logo, se trata de uma quantidade facilmente

calculada em uma simulação. Dessa maneira esse é o método mais comum usado para o cálculo de forças óticas, já que não requer o conhecimento da configuração dos campos no sistema.

Na Fig. 2.2 temos a força ótica calculada usando o tensor de Maxwell e o método variacional numérico, adaptado da Povinelli et al. [20]. Como podemos ver, ambos métodos dão resultados idênticos para a força ilustrado na Fig. 2.2(b). Como dito, a vantagem de usar o método variacional numérico é que não é necessário o cálculo do campo eletromagnético, mas, por sua vez, é necessário derivar numericamente o índice efetivo. Logo, não é possível calcular a força com apenas uma simulação e um grande número de pontos numéricos deve ser calculado para o cálculo da força. Em contrapartida, para o cálculo da força pelo tensor de Maxwell, apenas uma simulação é necessária. Ambos os métodos tem suas vantagens e limitações. Uma grande limitação do método variacional numérico é que ele é apenas aplicável a modos do sistema, sendo incapaz, na forma atual, de ser aplicado a superposição de modos.

2.5 Força de dipolo

Além do tensor de Maxwell, usa-se também o modelo de força de dipolo (DF - *Dipole Force*) para o cálculo de forças óticas em meios dielétricos [34]. Como veremos na seção 5.2, a força de dipolo é nada mais além do que a força de Einstein-Laub aplicada a dielétricos não-magnéticos.

Para o caso do tensor de Maxwell, tínhamos uma densidade de força dada

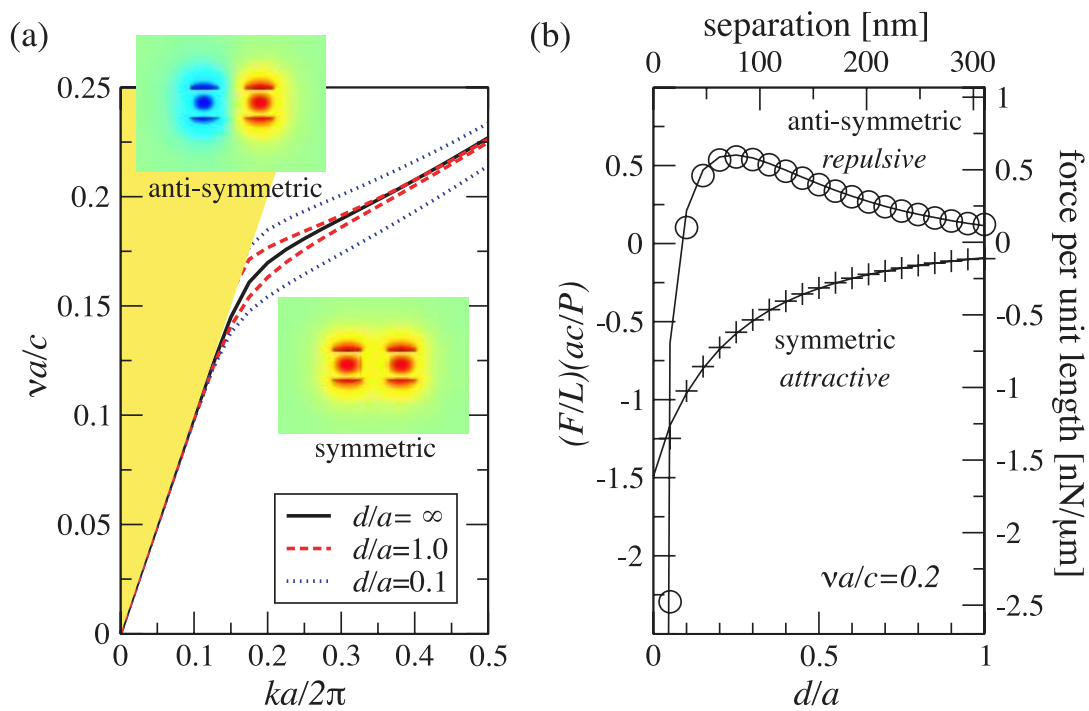


FIGURA 2.2: Simulação de guias de onda de lado a e separação d . Em (a) é mostrada a dispersão de frequência ν em termos do vetor de onda k na direção de propagação para diferentes separações d entre os guias de onda. Em (b) é mostrada a força ótica F normalizada em termos do comprimento L e potência P no guia de onda. Adaptado de Povinelli et al. [20].

pelo divergente desse tensor. Para simplificar os cálculos, a integral do volume é substituída por uma integral de superfície.

Para a força de dipolo, temos uma densidade de força volumétrica, que, devido a descontinuidade do campo na fronteira, irá apresentar termos tipo delta de Dirac. Logo, para a descrição completa dessa força, é necessário descrever uma densidade de força volumétrica e uma densidade força superficial na fronteira onde ocorre a descontinuidade dos campos. Por isso iremos separar a densidade de força de dipolo em dois termos, uma densidade volumétrica (*bulk*), que deve ser integrada no volume, e uma densidade em área (*surf*) para ser integrada na fronteira do guia de onda [39]. Logo:

$$\mathbf{f}_{\text{bulk}} = \frac{1}{4}\varepsilon_0 (\varepsilon - 1) \nabla (\mathbf{E} \cdot \mathbf{E}^*) \quad (2.12)$$

$$\mathbf{f}_{\text{surf}} = \frac{1}{4}\varepsilon_0 \hat{\mathbf{n}} \cdot (\mathbf{E}_{\text{out}} - \mathbf{E}_{\text{in}})^* (\mathbf{E}_{\text{out}} - \mathbf{E}_{\text{in}}), \quad (2.13)$$

onde ε é a permissibilidade relativa do guia de onda.

Assim, existe uma diferença marcante nesses métodos de cálculo de força. Para MST é necessário apenas integrar nas superfícies que delimitam um certo volume, enquanto para a força de dipolo é necessário integrar em volume e em área.

Capítulo 3

Deformação de Sólidos

Como guias de onda são essencialmente vigas, por serem finos transversalmente e longos longitudinalmente, sua deformação é composta basicamente por flexão da estrutura. As deformações que ocorrem nessas estruturas geralmente são muito pequenas em relação ao seu tamanho, poucos nanômetros, comparado com tamanhos de dezenas ou centenas de micrômetros. Logo, pode-se usar a teoria linear de elasticidade para calcular como os guias de onda se deformam. Para o caso especial de flexão, pode-se usar o modelo de viga de Euler-Bernoulli [40]. Esse modelo consiste no primeiro uso de um modelo matemático para aplicação na área de engenharia, e foi demonstrado seu sucesso quando foi empregado para a construção da torre Eiffel no século 19.

A simplificação do modelo de Euler-Bernoulli assume que as forças e deformações dependem apenas da direção longitudinal da viga. Ou seja, a seção transversal da viga não é afetada pelas forças, a estrutura apenas sofre flexão. Isso é algo totalmente razoável, afinal, é necessário forças muito grandes para deformar a seção transversal quando comparado com flexionar a estrutura, uma vez que a mesma é longa e fina e possui baixa constante de

mola.

A Fig. 3.1 mostra um diagrama de uma viga sendo deformada. A linha tracejada é o eixo neutro, a região da viga que não está sob tensão ou compressão. A viga é deformada segundo o perfil $w(z)$ que dá o deslocamento do eixo neutro em função do tamanho z da viga.

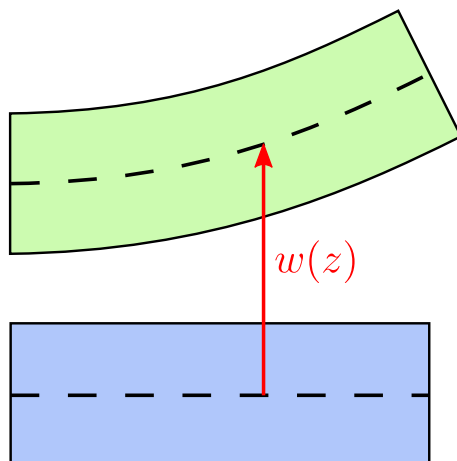


FIGURA 3.1: Diagrama com a deformação de uma viga. Em azul temos a viga não deformada e em verde ela deformada segundo o perfil de deformação $w(z)$. Para facilitar o entendimento, a viga está transladada para cima.

O perfil de deformação $w(z)$ é dado pela equação de Euler-Bernoulli:

$$\frac{d^2}{dz^2} \left[EI \frac{d^2 w}{dz^2} \right] = q(z), \quad (3.1)$$

onde E é o módulo de Young da viga, I é o segundo momento de área e q é a densidade de força linear.

Capítulo 4

Força de Batimento

Nesse capítulo serão estudadas as forças de batimento que ocorrem quando uma superposição de modos é excitada em um par de guia de onda. Será criada uma heurística para explicar essa força e essa heurística será comparada com uma simulação de elementos finitos.

4.1 Superposição

Até o momento, foram mostrados dois métodos para o cálculo da força ótica para modos do sistema e ambos concordam bem entre si. Porém, ainda nos resta responder a pergunta de como a equação (2.10) pode ser corrigida e generalizada para o caso de superposições. Para isso, primeiro vamos definir como é feita uma superposição de modos a seguir:

$$\mathbf{E} = \sum_{\mu=1}^2 A_{\mu} \mathbf{E}_{\mu} e^{i\beta_{\mu}z}, \quad (4.1)$$

$$\mathbf{H} = \sum_{\mu=1}^2 A_{\mu} \mathbf{H}_{\mu} e^{i\beta_{\mu}z}, \quad (4.2)$$

onde \mathbf{E} e \mathbf{H} são os campos elétrico e magnético independentes do tempo, \mathbf{E}_μ e \mathbf{H}_μ são os campos para os modos ortonormalizados μ , $|A_\mu|^2$ expressa a quantidade de potência no modo μ , e β_μ é a constante de propagação do modo μ , que está correlacionada com o índice efetivo n_{eff} como $\beta_\mu = n_{\text{eff}} 2\pi / \lambda$, onde λ é o comprimento de onda no sistema.

Para os cálculos que se seguem, estamos usando modos de guias de onda propagando na direção z . Porém, os cálculos são válidos para qualquer superposição de modos em qualquer tipo de sistema propagante em alguma direção reta.

Como visto na seção 2.2, o resultado da média temporal vai sempre envolver a parte real do produto de uma grandeza pelo conjugado de outra grandeza. Dessa maneira, iremos calcular como é a superposição para esse produto. Como exemplo de tal processo, iremos usar o vetor de Poynting \mathbf{S} , que expressa o fluxo de energia no sistema e é definido como:

$$\mathbf{S} = \frac{1}{2} \text{Re} (\mathbf{E} \times \mathbf{H}^*) \quad (4.3)$$

Substituindo (4.1) e (4.2), temos:

$$\begin{aligned} \mathbf{S} &= \frac{1}{2} \text{Re} \left[\left(\sum_{\mu=1}^2 A_\mu \mathbf{E}_\mu e^{i\beta_\mu z} \right) \times \left(\sum_{\nu=1}^2 A_\nu \mathbf{H}_\nu e^{i\beta_\nu z} \right)^* \right] \\ &= \frac{1}{2} \text{Re} \left[\left(\sum_{\mu=1}^2 A_\mu \mathbf{E}_\mu e^{i\beta_\mu z} \right) \times \left(\sum_{\nu=1}^2 A_\nu^* \mathbf{H}_\nu^* e^{-i\beta_\nu z} \right) \right] \\ &= \frac{1}{2} \text{Re} \left[\sum_{\mu=1}^2 \sum_{\nu=1}^2 A_\mu A_\nu^* e^{i(\beta_\mu - \beta_\nu)z} \mathbf{E}_\mu \times \mathbf{H}_\nu^* \right] \\ &= \frac{1}{4} \sum_{\mu=1}^2 \sum_{\nu=1}^2 \left[A_\mu A_\nu^* e^{i(\beta_\mu - \beta_\nu)z} \mathbf{E}_\mu \times \mathbf{H}_\nu^* + A_\mu^* A_\nu e^{-i(\beta_\mu - \beta_\nu)z} \mathbf{E}_\mu^* \times \mathbf{H}_\nu \right] \quad (4.4) \end{aligned}$$

Devido aos limites do somatórios serem idênticos, podemos renomear os rótulos invertendo μ e ν no segundo termo, ficando com:

$$\begin{aligned} \mathbf{S} &= \frac{1}{4} \sum_{\mu=1}^2 \sum_{\nu=1}^2 \left[A_{\mu} A_{\nu}^* e^{i(\beta_{\mu}-\beta_{\nu})z} \mathbf{E}_{\mu} \times \mathbf{H}_{\nu}^* + A_{\nu}^* A_{\mu} e^{-i(\beta_{\nu}-\beta_{\mu})z} \mathbf{E}_{\nu}^* \times \mathbf{H}_{\mu} \right] \\ &= \frac{1}{4} \sum_{\mu=1}^2 \sum_{\nu=1}^2 A_{\mu} A_{\nu}^* e^{i(\beta_{\mu}-\beta_{\nu})z} \left[\mathbf{E}_{\mu} \times \mathbf{H}_{\nu}^* + \mathbf{E}_{\nu}^* \times \mathbf{H}_{\mu} \right] \end{aligned} \quad (4.5)$$

Podemos definir o termo cruzado $\mathbf{S}_{\mu\nu}$ como sendo:

$$\mathbf{S}_{\mu\nu} = \frac{1}{4} \left[\mathbf{E}_{\mu} \times \mathbf{H}_{\nu}^* + \mathbf{E}_{\nu}^* \times \mathbf{H}_{\mu} \right] \quad (4.6)$$

Dessa maneira o vetor de Poynting para a superposição pode ser expresso como:

$$\begin{aligned} \mathbf{S} &= \sum_{\mu=1}^2 \sum_{\nu=1}^2 A_{\mu} A_{\nu}^* e^{i(\beta_{\mu}-\beta_{\nu})z} \mathbf{S}_{\mu\nu} \\ &= |A_1|^2 \mathbf{S}_{11} + |A_2|^2 \mathbf{S}_{22} + A_1 A_2^* e^{i(\beta_1-\beta_2)z} \mathbf{S}_{12} + A_2 A_1^* e^{i(\beta_2-\beta_1)z} \mathbf{S}_{21} \\ &= |A_1|^2 \mathbf{S}_{11} + |A_2|^2 \mathbf{S}_{22} + 2 \operatorname{Re} \left(A_1 A_2^* e^{i(\beta_1-\beta_2)z} \mathbf{S}_{12} \right) \end{aligned} \quad (4.7)$$

Podemos ver que, se existir apenas um modo, \mathbf{S} vai ser independente de z , ou seja, o vetor de Poynting não varia com a direção de propagação. Dessa maneira, não há troca de energia e a potência no sistema é constante. Uma outra observação importante vem do fato de que $\mathbf{S}_{12} = \mathbf{S}_{21}^*$, que é verificado trivialmente da definição. Se os modos tiverem a mesma fase, a componente transversa de \mathbf{S}_{12} vai ser puramente imaginária, enquanto a componente longitudinal irá ser puramente real. Mesmo lembrando que \mathbf{S} sempre será real, isso não impede que \mathbf{S}_{12} seja complexo, já que é apenas um termo na soma

e a soma como todo deve ser levada em consideração. Devido à componente transversa ser imaginária, \mathbf{S} irá oscilar como um seno na direção de propagação. Em outras palavras, a densidade momento eletromagnético irá variar senoidalmente na direção transversa; haverá uma troca de momento entre os guias de onda na direção transversa, uma vez que a densidade de momento eletromagnético é proporcional ao vetor de Poynting.

Para certas simetrias de modos usados, poderemos ter um \mathbf{S}_{12} transverso par, ou seja, com integral não nula. Dessa maneira podemos concluir que, nesse sistema, os campos podem trocar momento transversalmente.

O momento longitudinal poderá ser trocado entre os guias, porém, toda quantidade de momento ganha por um guia de onda será balanceada pela mesma quantidade perdida no outro guia de onda. Ou seja, a quantidade total de momento longitudinal permanece constante, apesar dos guias de onda trocarem momento transverso entre si. Modos ortogonais não podem trocar potência entre si, devido ortogonalidade [41, 42] (veja apêndice A). Como a potência é definida como a integral da componente longitudinal do vetor de Poynting, temos que essa componente será sempre constante.

Existem duas definições de densidade de momento eletromagnético \mathbf{g} atribuídas a Abraham [43] e a Minkowski [44]. Elas são definidas como:

$$\begin{aligned}\mathbf{g}_A &= \frac{1}{2c^2} \operatorname{Re} [\mathbf{E} \times \mathbf{H}^*] \\ &= \frac{1}{c^2} \mathbf{S}\end{aligned}\tag{4.8}$$

$$\begin{aligned}\mathbf{g}_M &= \operatorname{Re} [\epsilon \mathbf{E} \times \mathbf{H}^*] \\ &= \frac{\epsilon}{c^2} \mathbf{S}\end{aligned}\tag{4.9}$$

onde os subscritos A e M indicam, respectivamente, o momento de Abraham e Minkowski e ϵ é a permissibilidade dos guias de onda, onde será assumido um meio sem perdas e dielétrico. Dessa maneira, é possível ver que a componente longitudinal do momento de Abraham será constante por ser vetor de Poynting dividido pela velocidade da luz ao quadrado. Já a componente longitudinal do vetor de Minkowski não será constante e irá variar ligeiramente. Porém, para o cálculo da heurística na seção 4.3, será assumido que essa componente é constante para ambas definições.

4.2 Centro de energia

Não apenas momento é trocado entre os guias de onda, mas energia também.

A energia eletromagnética é dada por:

$$u = \frac{1}{4} (\mathbf{E} \cdot \mathbf{D}^* + \mathbf{H} \cdot \mathbf{B}^*) \quad (4.10)$$

onde o fator extra 1/2 vem do processo de média temporal e estamos assumindo que as propriedades materiais são reais, \mathbf{D} é o campo de deslocamento elétrico e \mathbf{B} é a densidade de fluxo magnético. O mesmo processo de superposição pode ser feito com a energia ou com qualquer outra quantidade quadrática. Então assumiremos que tal processo já fora feito para todas quantidades relevantes.

Devido a razões similares à condição de ortogonalidade dos modos, a energia total no sistema será conservada, dessa maneira toda energia ganha por um guia de onda será perdida pelo outro guia de onda.

Podemos visualizar essa troca de energia observando como o centro de energia da seção transversal varia. O centro de energia é análogo ao centro de massa, possibilitando assim obtermos um caminho efetivo para a luz. Ele é definido como [45]:

$$\rho_c(z) = \frac{1}{U} \iint_{\Gamma} \rho u \, dS, \quad (4.11)$$

onde ρ é o vetor de posição transversal no plano xy e U é a energia total na seção transversal.

Como mencionado anteriormente, os modos do sistema podem ser simétricos ou antissimétricos. Dessa maneira, termos como u_{11} e u_{22} serão sempre simétricos (pares), por envolverem um produto de duas funções pares ou um produto de duas funções ímpares, o que sempre resultará em uma quantidade par. O vetor ρ , por construção, é ímpar, logo termos na forma ρu_{11} ou ρu_{22} serão obrigatoriamente ímpares e não contribuirão para o centro de energia, uma vez que a integral de uma função ímpar é zero se integrada no espaço todo. Termos como u_{12} podem ser par ou ímpar dependendo dos modos escolhidos. Se escolhermos os modos com simetrias tal que esse termo cruzado seja ímpar, teremos então que ρu_{12} será par e resultará em algo não nulo quando integrado. Dessa maneira, o centro de energia não irá ficar no centro dos guias de onda e devido aos exponenciais que aparecem nos termos cruzados, similar ao que presente na Eq. (4.7), o centro de energia irá variar senoidalmente com a direção de propagação z , resultando, efetivamente, em um caminho que a luz irá propagar.

Para o cálculo do centro de energia é necessário resolver as equações

de Maxwell. Porém, podemos usar algumas simplificações para obter essa quantidade sem resolvê-las. Se a separação d entre os guias de onda não é muito pequena em relação a sua largura a e a superposição é composta pela mesma quantidade de modos ($A_1 = A_2$), podemos aproximar o centro de energia como a distância entre o centro dos guias de onda até o centro de um dos guias. Dessa maneira, uma aproximação razoável para o centro de energia é dada por:

$$\rho_c(z) = \frac{d + a}{2} \hat{x} \cos\left(\frac{\pi z}{L_b}\right), \quad (4.12)$$

onde x é a posição transversa que separa os guias de onda e L_b é a distância de batimento, a distância onde a luz acopla totalmente de um guia de onda para o outro e está relacionada com a diferença das constantes de propagação dos modos¹. A distância de batimento pode ser expressa como:

$$L_b = \frac{\lambda}{2\Delta n_{\text{eff}}}, \quad (4.13)$$

onde λ é o comprimento de onda da luz e Δn_{eff} é a diferença de índice efetivo dos dois modos da superposição.

Utilizando a Fig. 4.1 como referência, assumimos que a luz entra no sistema pelo guia de cima, como mostrado pela curva azul. Apesar da analogia do centro de energia com o centro de massa, devemos lembrar-nos que a trajetória dada pela luz não é uma trajetória literal, no sentido de partículas pontuais se movendo no espaço, uma vez que o campo eletromagnético é

¹Em certos contextos, L_b é tomado como a distância em que a luz vai de um guia de onda para o outro e retorna. Porém, aqui, usaremos a definição de que é a distância em que a luz vai de um guia de onda para o outro.

delocalizado espacialmente. Podemos integrar a densidade de momento na seção transversal e isso é expresso por \wp . Esse momento será sempre tangente a trajetória dada pelo centro de energia, assim como a velocidade de uma partícula é tangente a sua trajetória.

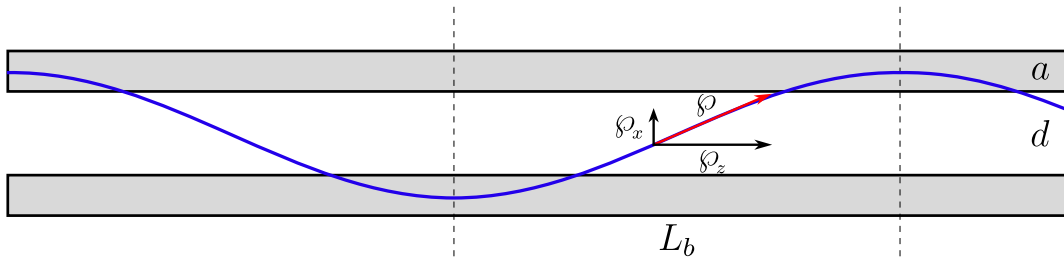


FIGURA 4.1: Diagrama mostrando um par de guias de onda acoplados trocando energia. A linha senoidal azul mostra o caminho da luz (centro de energia), onde z é a direção de propagação e x é a direção transversa. Cada guia de onda tem largura a e estão separados a uma distância d um do outro. A troca de energia é caracterizada pela distância de batimento L_b , que consiste na distância que a luz é transferida de um guia para o outro totalmente. \wp é o momento da seção transversal.

Para que o momento seja tangente ao centro de massa, temos que ter então:

$$\frac{\wp_x}{\wp_z} = \frac{d}{dz} \rho_{xc}(z) = -\frac{d+a}{2} \frac{\pi}{L_b} \sin\left(\frac{\pi z}{L_b}\right), \quad (4.14)$$

que nos dá a relação entre a componente tangencial do momento e a componente longitudinal.

Como mencionado anteriormente, o momento longitudinal \wp_z será sempre constante devido a ortogonalidade dos modos. Porém, \wp_x irá variar em módulo e magnitude, já que a ortogonalidade não se aplica a essa componente.

4.3 Heurística

Pela mecânica newtoniana, a força está relacionada com o momento. Para acharmos a força no sistema em questão, podemos derivar o momento no tempo t . A quantidade \wp é definida como sendo a densidade de momento integrada na seção transversal. Dessa maneira, \wp expressa a densidade linear de momento na direção de propagação, mas por simplicidade iremos nos referir a ele simplesmente como momento. Dessa maneira, podemos expressar a densidade de força linear na direção de propagação \mathbf{q} em termos do momento como:

$$\mathbf{q} = \frac{\partial \wp}{\partial t}. \quad (4.15)$$

Porém, como foi feita a média temporal anteriormente, não temos mais nenhuma dependência temporal. Mas, como atribuímos uma trajetória puntual para a luz dada pelo centro de energia, podemos atribuir um tempo que vai depender da posição z onde a luz se encontra e qual é a velocidade de propagação. Dessa maneira, podemos trocar a derivada temporal por uma derivada espacial [31] e, assim, definir qual é a força nesse sistema devido a essa troca de momento. Essa força será chamada de força de batimento e é expressa como:

$$\begin{aligned} q_{xb} &= \frac{\partial \wp_x}{\partial t} \\ &= \underbrace{\frac{\partial z}{\partial t}}_{=v} \frac{\partial \wp_x}{\partial z} \\ &= -\wp_z v \left(\frac{\pi}{L_b} \right)^2 \frac{d+a}{2} \cos \left(\frac{\pi z}{L_b} \right), \end{aligned} \quad (4.16)$$

onde calculamos apenas a componente x devido à troca de momento na direção transversa, nesse caso x . Essa força atua em ambos os guias de onda, uma vez que é o momento total nos dois guias de onda. Dessa maneira, essa força possui também a mesma direção em ambos guias de onda. Ou seja, ela atua no centro de massa do sistema. Devido ao fato dos guias de onda serem idênticos e simétricos, cada guia de onda sofrerá metade da força de batimento.

Nesse modelo heurístico da força de batimento é necessário apenas o conhecimento do tamanho do batimento e da magnitude do momento da direção z . Com isso, definições de momento diferentes resultarão em forças diferentes. Devido a dependência da permissibilidade no momento de Minkowski, ele irá ser aproximadamente $\varepsilon = n^2$ vezes maior do que o de Abraham, onde n é o índice de refração do guia de onda. Logo, se espera magnitudes bem diferentes se momentos diferentes forem usados.

4.4 Simulação Ótica

Tendo a fórmula heurística para o cálculo da força de batimento, é necessário comparar seu resultado previsto com o resultado completo da solução da equação de Maxwell. Para isso, foi usado o método de elementos finitos (FEM - Finite Element Method) para discretizar e resolver o problema [46–48] através do software COMSOL Multiphysics. Nessa simulação, foram encontrados os modos do sistema e todas as integrais relevantes foram calculadas, tanto para os modos normais quanto os termos cruzados previamente definidos.

Iremos considerar um par de guias de onda feitos de silício com índice de refração $n = 3.45$ e excitados com um comprimento de onda de $\lambda = 1550$ nm. A geometria consiste de uma seção transversal quadrada de cada guia com tamanho $a = 310$ nm e separação horizontal d que é variada durante a simulação. Em todas as simulações, a luz se propaga na direção z e a fase relativa entre os modos é escolhida como zero.

Para o cálculo correto da força ótica no caso da superposição, primeiramente precisamos corrigir a Eq. (2.10), onde temos a densidade de força \mathbf{q} calculada, porém com termos faltantes devido às tampas dos guias de onda. Se tal correção não for feita, o resultado da força antes de usar o teorema da divergência e depois de usá-lo irão diferir, o que indica o erro no cálculo.

Relembrando que a força na superfície Γ que limita o volume Ω do guia de onda é:

$$\mathbf{F} = \iint_{\Gamma} \langle \mathcal{T}_{\text{out}} \rangle \cdot \hat{\mathbf{n}} dS. \quad (4.17)$$

Onde Γ são os 6 lados de um paralelepípedo que define o volume em questão. Vamos dividir a superfície Γ em duas partes, Γ_z que consiste das faces perpendiculares ao eixo z (tampas) e Γ_{\parallel} que consiste das faces paralelas ao eixo z (laterais). Dessa maneira temos:

$$\mathbf{F} = \iint_{\Gamma_z} \langle \mathcal{T}_{\text{out}} \rangle \cdot \hat{\mathbf{n}} dx dy + \iint_{\Gamma_{\parallel}} \langle \mathcal{T}_{\text{out}} \rangle \cdot \hat{\mathbf{n}} dS \quad (4.18)$$

Porém, em Γ_z o campo fora e dentro coincidem por ser as regiões das tampas. Nessa região o campo não é descontínuo. Porém, para manter a nomenclatura consistente com a próxima seção, iremos renomear o campo

para dentro (*in*). Derivando a Eq. (4.18) em z temos:

$$\partial_z \mathbf{F} = \iint_S \langle \partial_z \mathcal{T}_{in} \rangle \cdot \hat{\mathbf{n}} \, dx dy + \oint_C \langle \mathcal{T}_{out} \rangle \cdot \hat{\mathbf{n}} \, dl, \quad (4.19)$$

onde S é a área da seção transversal do guia na posição z e C o seu contorno.

Para o caso de modos, o primeiro termo na Eq. (4.19) será zero, pois \mathcal{T}_{in} é independente de z , por motivos similares ao vetor de Poynting. Assim temos que a fórmula correta, Eq. (4.19), e a incorreta, Eq. (2.10), produzem os mesmos resultados. Se o campo for dependente de z , como no caso de superposição, vemos que haveria discrepância entre as formulas usadas.

Os resultados da simulação por FEM são mostrados na Fig. 4.2, onde são apresentadas as forças para os modos e a amplitude dos termos cruzados da superposição (força de batimento), uma vez que a magnitude das forças de batimento varia com a direção de propagação.

Para o cálculo das forças serão usados dois primeiros modos TE, chamados modos 1 e 2, que possuem simetria par/ímpar no plano x e simetria ímpar no plano y , onde esse último tipo de simetria indica a polarização do modo. Esses modos foram escolhidos pois eles geram um deslocamento no centro de energia quando em superposição. Figs. 4.2(a,b) mostram a norma ao quadrado dos campos ($\mathbf{E}_1 \cdot \mathbf{E}_1^*$ e $\mathbf{E}_2 \cdot \mathbf{E}_2^*$). Essas normas quadradas, como pode ser visto, são sempre pares, pois constituem um produto de duas funções pares/ímpares, logo o resultado sempre será par. Fig. 4.2(c) mostra o termo cruzado da norma ao quadrado dos campos ($\mathbf{E}_1 \cdot \mathbf{E}_2^*$). Esse termo cruzado da norma ao quadrado será ímpar devido à simetria oposta dos modos

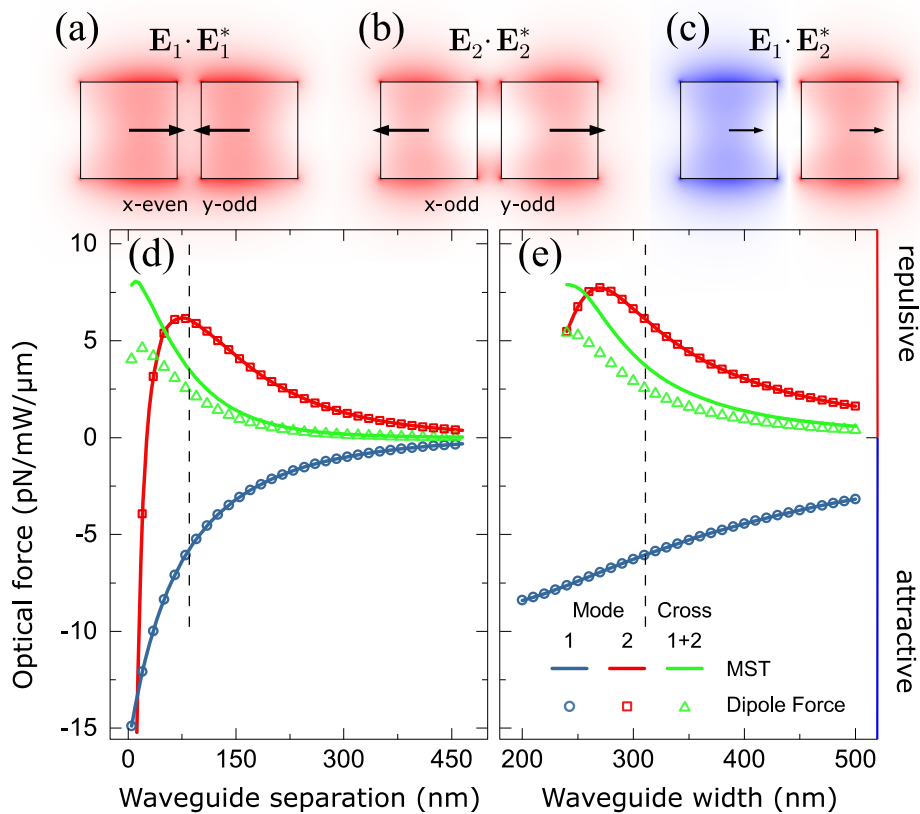


FIGURA 4.2: Resultados da simulação por FEM de um CWS usando os dois primeiros modos TE. O modo simétrico **(a)** é x -par e y -ímpar, enquanto o modo antissimétrico **(b)** é x -ímpar e y -ímpar. Em ambos os casos, a força resultante, indicada pela seta preta, depende do quadrado do módulo e é x -par, atuando então com sinais opostos em guias de onda opostos. Para a força de batimento **(c)**, que depende de termos como $E_1 \cdot E_2^*$, a paridade será x -ímpar, dessa maneira a força em guias de onda opostos terá o mesmo sinal. Em cada seção transversal de **(a-c)**, vermelho indica regiões positivas de $E_\mu \cdot E_\nu^*$ enquanto azul regiões negativas. As figuras **(d,e)** mostram a força ótica entre os guias de onda quando a separação entre eles, ou a suas larguras, são variadas, respectivamente. Em **(d)** uma largura de 310 nm é usada enquanto que em **(e)** uma separação de 80 nm é usada. A linha vertical tracejada em **(d)** indica uma separação de 80 nm, na qual as forças atrativas e repulsivas dos modos são idênticas. Lá em **(e)**, a linha tracejada indica uma largura de 310 nm. A magnitude para a força atrativa (azul/círculos) e para a repulsiva (vermelho/quadrados) concordam muito bem para os cálculos por MST (curva contínua) ou para DF (símbolos). A amplitude da força de batimento (verde/triângulos), no entanto, varia dependendo do método utilizado, não havendo coincidência entre MST (verde) e DF (triângulos). Em **(e)** o sistema não apresenta modos antissimétricos confinados (2) para larguras menores do que 240 nm, apenas o modo simétrico é presente.

no plano x . A menos de algumas constantes, esse termo é a energia eletromagnética. Dessa maneira vemos que podemos ter um u_{12} ímpar, que em contrapartida irá gerar um centro de energia não nulo.

Como os modos são simétricos ou antissimétricos, a força para modos será atrativa ou repulsiva sempre. A normal a superfície dos guias de onda pode ser pensada como uma função ímpar devido à simetria de espelho que os guias de onda possuem. Uma vez que para o cálculo da força precisamos empregar uma quantidade quadrática no campo vezes a normal (Eq. (4.19)), devido ao fato dessa norma ao quadrado ser par, como observado na Fig. 4.2(a,b), ao ser multiplicado pela normal vemos que a força total terá sempre sinal opostos em guias de onda opostos.

Para o caso de superposição, temos uma densidade de força que será ímpar, análogo a Fig. 4.2(c), e como a normal funciona como uma função ímpar, a força total será par. Logo, guias de onda opostos terão mesmo sinal de força, o que não caracteriza um sistema nem atrativo nem repulsivo. A força ótica vai atuar de tal maneira a acelerar o centro de massa do sistema. Este é um resultado original, não observado para modos e presente apenas na força de batimento quando há superposição de modos.

Figs. 4.2(d,e) mostram a magnitude da força ótica no sistema de guias de onda acoplados, quando a separação e largura são variadas, respectivamente. A força ótica é linearmente proporcional à potência nos guias de onda, isso pode ser visto se normalizarmos os modos para terem potência unitária no vetor de Poynting. Dessa maneira, é usual expressar a força ótica como sendo a força por unidade de deslocamento na direção de propagação

por unidade de potência ($\text{pN}/\mu\text{m}/\text{mW}$). É mostrada na Fig. 4.2(d), como linha tracejada, a separação de 80 nm, na qual as forças de modos cancelam uma a outra, e na Fig. 4.2(e) é mostrada a largura de 310 nm. Nas Figs. 4.2(d,e) em azul, curva sólida e círculos, temos as forças do modo 1 calculadas por MST e por forças de dipolo, respectivamente, enquanto em vermelho, curva sólida e quadrados, temos a força para o modo 2, por MST e forças de dipolo, respectivamente. Já a força de batimento é mostrada como a curva sólida e triângulos, para MST e força de dipolo. Para o caso da força dos modos, os dois métodos, MST e força de dipolo, concordam perfeitamente um com o outro. Porém, para o caso das forças de batimento, os dois métodos dão resultados bem distintos, com a força de dipolo sendo menor que a por MST. Um resultado importante é o fato de que a ordem de magnitude das forças, seja de modos ou de batimento, é o mesmo.

É importante ressaltar que caso a força por MST não houvesse sido corrigida, sua magnitude seria bem menor para o caso atual. Dessa maneira, para todos os cálculos envolvendo tensor de *stress*, a força foi calculada e conferida de duas maneiras diferentes. Uma usando o divergente do tensor de *stress* e a outra usando o teorema da divergência previamente derivado. Quando ambos os métodos são comparados, é observado que eles dão resultados idênticos, o que mostra que a fórmula derivada com o termo *a* mais, é de fato a fórmula correta e constitui em uma aplicação correta do teorema da divergência.

Depois de verificado a validade no cálculo das forças, que possui um resultado idêntico para forças de modos, iremos comparar a fórmula heurística

prevista para a força de batimento com a força calculada a partir da simulação, mostrada na Fig. 4.3. O momento \wp_z usado em (4.16) pode ser tanto o momento de Abraham, curva vermelha, ou de Minkowski, curva azul. Os resultados da simulação são mostrados como quadrados, força de dipolo, círculos, MST, e triângulos, força de eletrostrição [49]. A força de eletrostrição é usada apenas para mostrar que qualquer efeito fotoelástico é muito menor quando comparado com efeito de troca de momento, como mostrado. Como esperado, a força heurística calculada pelo momento de Minkowski é aproximadamente $n^2 \approx 10$ vezes maior do que a de Abraham. Apesar das simplificações feitas no modelo heurístico, há uma concordância muito boa entre a força por Minkowski e MST. Já a forma de Abraham é bem menor do que tanto MST quanto força de dipolo. Isso é bem interessante, uma vez que momento de Abraham é associado a tanto MST quanto a força de dipolo, porém ambas forças concordam melhor com o modelo de Minkowski, em especial MST. Isso pode ser um indício de que o momento correto para esse tipo de sistema é, de fato, o momento de Minkowski ou talvez uma média ponderada dos dois momentos.

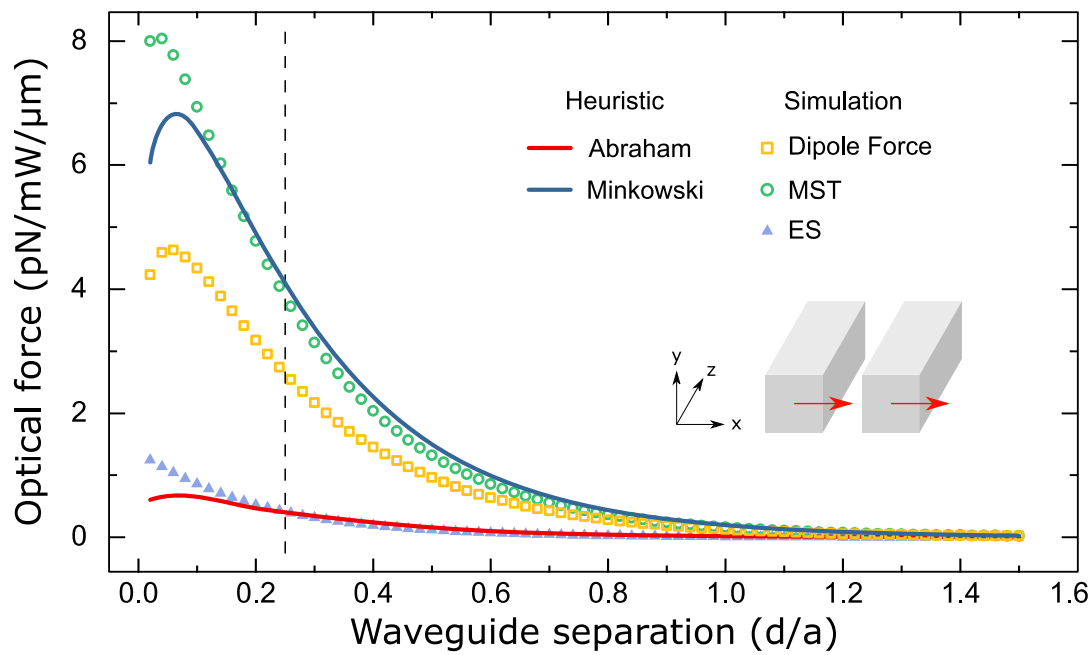


FIGURA 4.3: Força de batimento em função da separação adimensional ente os guias de onda d/a . Cinco derivações são apresentadas: calculadas via transferência de momento assumindo formulação de Abraham (curva vermelha) e Minkowski (curva azul), e cálculos por MST (círculos verdes), DF (quadrados amarelos), e ES (triângulos azuis), que foram baseadas totalmente nas simulações numéricas por FEM.

4.5 Simulação Estrutural

Apesar da ordem de magnitude das forças de batimento e as forças de modo serem as mesmas, elas são fundamentalmente diferentes. As forças de modo são independentes de z , enquanto as forças de batimento variam cosenoidalmente com z . Dessa maneira, pelo fato de que a média de um cosseno ser zero, espera-se intuitivamente que deformações causadas pela força de batimento devam ser insignificantes. Porém, tal intuição apenas funciona se os guias de onda forem infinitos, caso o tamanho dos guias de onda sejam comparáveis à distância de batimento, teremos que as condições de contorno dos guias de onda (ancoragem) irão ter um fator bastante influente, uma vez que uma força alta próximo do ponto de ancoragem irá gerar uma deformação pequena quando comparado com a mesma força longe do ponto de ancoragem. Dessa maneira, perdemos a simetria do problema, pontos diferentes vão se comportar diferentemente para a mesma força. Logo, uma força que varia como cosseno pode ter, de fato, deformações apreciáveis (esse é um fato que pode facilmente levar a conclusões precipitadas sobre a força devido à média ser zero [50]).

Para melhor comparar as forças, iremos resolver o problema de deformação dos guias de onda através de uma simulação por elementos finitos e resolver analiticamente as deformações. Uma vez que, obtendo-se somente as forças, pode não ser óbvio qual tipo de comportamento será o esperado, usaremos duas condições de contorno estruturais distintas: com os guias de onda suportados em uma extremidade apenas ou nas duas extremidades.

Nas Figs. 4.4(a-d) temos o caso de guias de onda suportados em ambos os lados (*double-clamped*). Nas Fig. 4.4(a) e Fig. 4.4(b) temos os modos simétricos

(1) e antissimétricos (2). Como o modo simétrico gera uma força atrativa, os guias de onda se aproximam, enquanto para o antissimétrico eles se afastam. Como foi demonstrado, a força de batimento não é nem atrativa ou repulsiva, logo os guias de onda deformarão para a mesma direção, como mostrado na Fig. 4.4(c). Para o cálculo da deformação foi assumido que a potência total nos guias de onda é a mesma. Dessa maneira, para o caso simétrico e antissimétrico, temos a mesma potência. Porém para o caso de batimento, é injetado 50% da potência no modo simétrico e 50% no modo antissimétrico. Como vimos, para certas separações horizontais entre os guias, as forças atrativa e repulsiva podem se anular. Dessa maneira, para uma grande faixa de separações, a soma entre força atrativa e repulsiva vai ser bem similar a força de batimento. A soma dessas duas então irá gerar uma deformação bem menor do que cada uma individualmente, por serem opostas em natureza. Logo, temos um comparativo injusto entre as forças de modo e a força de batimento, já que no sistema total, as três forças estão presentes. Por isso, as escalas usadas nas imagens são diferentes.

A Fig. 4.4(d) mostra o que acontece quando temos as três forças no sistema. A força de batimento tende a deformar os guias de onda para uma direção (direita), enquanto as forças de modo tendem a separar ou afastar os guias. O resultado final é que um guia de onda se deforma bem mais do que o outro. É possível otimizar o sistema para minimizar a deformação de um guia, deixando praticamente não deformado, enquanto o outro guia sofre deformação.

A mesma análise segue para o caso de guias de onda suportados em apenas uma extremidade (*single-clamped*), como mostrado na Figs. 4.4(e-h). A

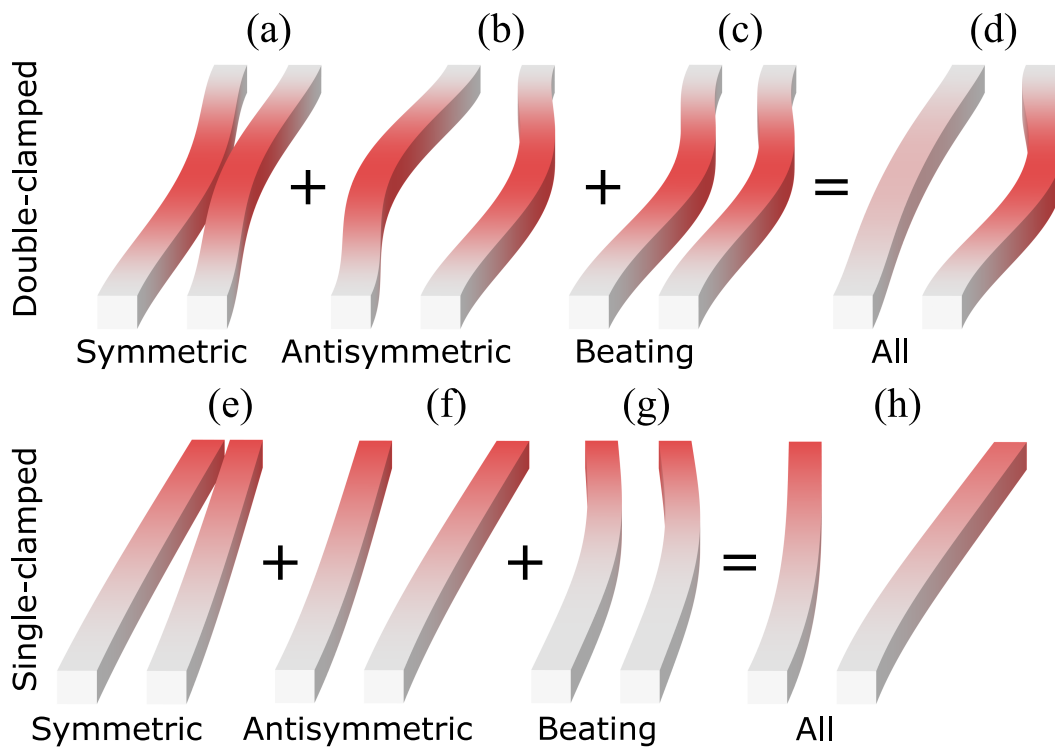


FIGURA 4.4: Deformação mecânica causada pela forças de modo simétricas (a,e) e antissimétricas (b,f), comparadas com a força de batimento (c,g). Em (d,h) todas as forças são consideradas. As deformações mostradas são solução da equação de Euler-Bernoulli para um par de guias de onda acoplados em ambas extremidades (a-d) ou em apenas uma extremidade (e-h), veja apêndices B e C. Ambos guias de onda são de seção quadrada de lado 310 nm, separação de 389 nm, comprimento de 30 μm , tamanho de batimento de 15 μm e é-se injetado 100 mW de potência. A escala das deformações foi exagerada dos valores reais para efeitos visuais por fatores de 200, 300, 3500 e 1500 de (a) até (e), respectivamente, e fatores de 4, 6, 600 e 80 de (e) até (h), respectivamente.

vantagem de usar guias de onda suportados em apenas uma extremidade é que possibilita a obtenção de deformações bem maiores para o mesmo tamanho e potência usados quando comparados com guias de onda suportados em ambas extremidades. A única desvantagem é que há necessidade de acoplar os guias de onda a uma outra parte do sistema se quisermos estudar os sinais transmitidos nos guias de onda em função da deformação dos mesmos. A solução completa para ambos os casos é mostrada nos apêndices B e C

Foi mostrado que a força ótica é proporcional à potência de entrada nos guias de onda. Porém como as deformações variam com a geometria? A Fig. 4.4 apenas mostra um único caso para um certo comprimento. Uma pergunta extremamente importante é: todos comprimentos geram deformações apreciáveis ou existem certos comprimentos onde temos uma deformação tão grande ou maior que as deformações de modos? Para forças de modos, é facilmente mostrado que as deformações são proporcionais a L^4 , onde L é o comprimento do guia de onda. Isso vêm do fato da equação de Euler-Bernoulli ter derivadas de quarta ordem. Porém, devido à dependência de um cosseno na força de batimento, não é mais trivial qual é o máximo de deformação.

A Fig. 4.5 mostra a deformação dos guias de onda para a força de batimento, normalizada em termos da deformação causada pela força de modos. Dessa maneira, temos uma comparação correta de cada efeito. Se o resultado for maior do que 1, temos que a força de batimento gera deformações maiores que as forças de modo, caso contrário as forças de modo dominam.

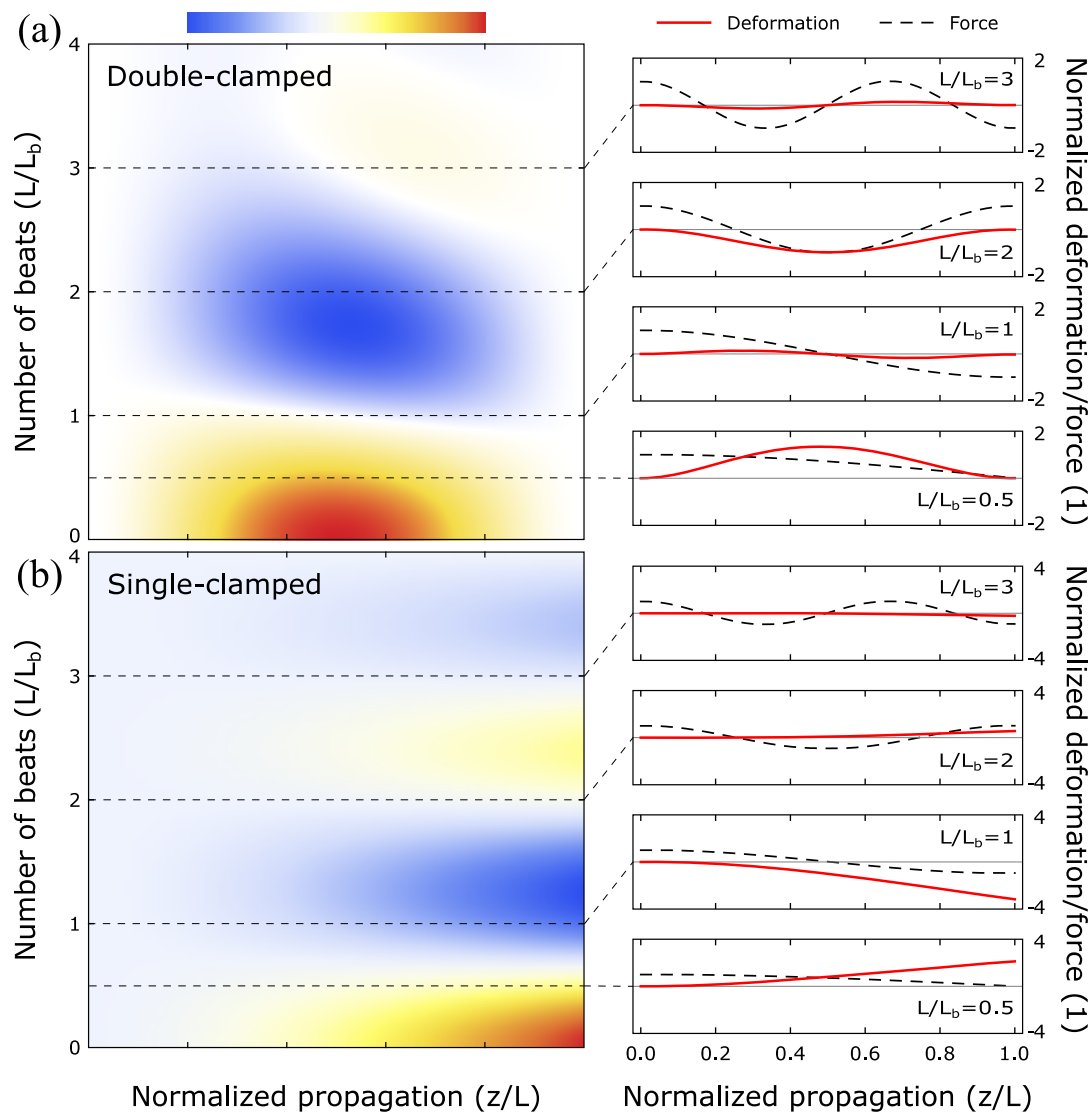


FIGURA 4.5: Perfil de deformação normalizada para guias de onda suportados em duas extremidades (*double-clamped*) (a) e apenas uma extremidade (*single-clamped*) (b). A curva vermelha mostra o perfil de deformação causado pela força de batimento normalizada pela deformação máxima causada pela força de modo. A curva preta tracejada mostra qual é a força nesse sistema dada por (4.16), normalizada para ter máximo de 1. O procedimento de normalização é dado pelos apêndices B e C.

Na Fig. 4.5(a) temos o caso de guias de onda suportados nas duas extremidades, onde alguns perfis são mostrados em vermelho para certas razões de comprimento total por comprimento de batimento (L/L_b). Existem certos parâmetros que são capazes de gerar deformações normalizadas na ordem de 1, como é o caso $L/L_b \approx 2$. Apesar de que a região onde $L/L_b < 1$ possuir deformações normalizadas na ordem de 2, essa região não tem muito interesse por exigir guias de onda muito curtos, o que implica em potências altas para atingir deformações equivalentes em guias de onda mais longos. Logo, a potência necessária para causar deformações devem ser bastante altas.

A Fig. 4.5(b) mostra o caso de guias de onda suportados em uma única extremidade. Podemos ver que a deformação maior acontece na ponta solta do guia de onda, como esperado. Porém uma coisa muito interessante acontece quando $L/L_b \approx 1$. A deformação normalizada passa a ser próxima de 4. Ou seja, forças de batimento, para mesma geometria e potência, geram deformações 4 vezes maiores do que forças de modos, o que invalida argumentos comuns na literatura de que a força de batimento é incapaz de gerar deformações devido à sua média ser zero [50].

Porém, como pode ser visto, caso o parâmetro L/L_b não for propriamente escolhido, a deformação normalizada será próxima de zero. Dessa maneira, nem todas configurações podem ser detectadas e a geometria tem que ser bem calibrada, caso contrário os efeitos da força de batimento serão diminuídos.

4.6 Conclusão

Neste trabalho a força de batimentos em guias de onda acoplados foi estudada através de simulações numéricas e de uma teoria heurística. Foi visto que se o procedimento correto não for usado, como o uso do teorema da divergência descontínuo ou então a derivação correta da densidade linear de força, incorre-se em erros no cálculo da força ótica. Em especial, o resultado deduzido a partir do teorema da divergência não irá concordar com a densidade de força correspondente, indicando que o teorema da divergência foi usado erroneamente. Após a correção da densidade de força com um termo adicional que está presente apenas se o tensor de Maxwell depende de z , temos que a força é então calculada corretamente. Esse termo adicional não afeta forças de modos, pois para modos não há dependência em z no tensor de Maxwell.

Vemos também um resultado surpreendente e inusitado. As forças calculadas pelo tensor de Maxwell e por força de dipolo são idênticas para modos. Isso mostra que as forças óticas para modos em um sistema de guias de onda acoplados são as mesmas independentemente do modelo de força empregado, um resultado que não é comum quando se trata de forças óticas na matéria. Muitas vezes, apenas com experimento podemos dizer qual é o modelo de força para aquele sistema em questão. Porém, para esse caso em especial, o resultado independe do modelo.

Quando uma superposição de modos é injetada nos guias de onda, ao invés de apenas um modo, o resultado é totalmente diferente. É necessário ter bastante cuidado nos cálculos da força e em qual modelo se deve usar.

Modelos diferentes de força vão gerar forças distintas. Dependendo dos modos usados para o cálculo, até a direção da força pode variar, assim como a ordem de magnitude. Para o caso da superposição, irá surgir uma força a mais, chamada de força de batimento, que não é nem atrativa ou repulsiva, e, dessa maneira, irá afetar as coordenadas do centro de massa do sistema. Essa força, como visto, apesar de variar cossenoidalmente, é capaz de ter um impacto grande na deformação dos guias de onda se a geometria for bem escolhida. Como esse resultado parece contra-intuitivo, forças internas ao sistema alterando o centro de massa, nós propusemos um modelo heurístico para explicar como isso ocorre. Para isso, é importante lembrar que o sistema não é composto apenas de guias de onda, mas também da luz. Logo, poderá ser trocado momento entre a luz e a matéria, o que irá resultar em forças no sistema. As forças preditas pela heurística possuem a mesma direção devido ao recuo sofrido pelos guias de onda quando a luz troca de um guia de onda para o outro.

Para o modelo heurístico é necessário definir qual o momento eletromagnético usado no sistema. Existem duas escolhas, entre o de Abraham e o de Minkowski, sendo que a diferença entre as forças para cada modelo é de uma ordem de magnitude. Vemos que a heurística concorda muito bem com as forças calculadas numericamente quando se é empregado o momento de Minkowski.

Com esses resultados uma pergunta óbvia surge: Por que, para modos, as forças são independentes do modelo, enquanto que para superposição elas são dependentes. Note que a diferença crucial entre os dois tipos de sistema é justamente a troca de momento entre os guias de onda. Para o caso de modos

não existe momento transversal, logo não existe troca de momento e a força é puramente devida à pressão de radiação. Já no caso de superposição, existe uma troca de momento que acarretará em uma força adicional no sistema. Apesar de termos resolvido apenas o caso de guias de onda, as fórmulas derivadas são bem gerais. Quando temos luz propagante em uma certa direção, as forças para modos serão sempre as mesmas. Porém, quando há superposição, serão distintas devido à força de batimento. Esse resultado pode ser entendido de outra maneira: em sistemas onde há troca de momento entre luz e matéria, as forças óticas irão possivelmente dar resultados distintos, porém quando não há troca de momento, as forças serão idênticas e independentes do método, um resultado que pode ser estendido a outros sistemas. Apesar da escolha específica de modos feita, se outros modos forem usados que possuem um centro de energia na direção y , seria possível ter forças de batimento nessa direção. Logo, escolhendo superposições e geometrias corretamente, é possível ter um controle muito preciso do posicionamento de guias de onda individuais em ambas direções, algo que é impossível de se ter injetando apenas um modo. Logo, mostramos que a força de batimento não pode ser desprezada: ela é capaz de gerar deformações comparáveis ou maiores que as forças óticas de modo, e argumentos de que por sua média (em um período) ser zero são falhos. Como visto, a combinação de forças de modo e batimento podem gerar deformações assimétricas nos guias de onda, o que tem repercussões diretas em várias aplicações, como por exemplo, afetar a frequência de ressonância de cada guia em certos experimentos. Logo, o fato de que a força de batimento não pode ser sempre ignorada significa que os experimentos devem levá-la em consideração sempre quando

há superposição de modos.

Capítulo 5

Força Ótica em Meios Dielétricos

Nesse capítulo serão estudadas as forças em meios dielétricos para luz guiada em uma direção arbitrária (curva ou não). Serão abordados os modelos de força devido a Lorentz, Einstein-Laub e Minkowski em suas formulações tensoriais em um único tensor de *stress* geral.

5.1 Introdução

No capítulo anterior foi estudado como a força de batimento pode surgir em um sistema de guias de onda devido à transferência de momento eletromagnético entre os guias de onda quando se tem uma excitação por uma superposição de modos do sistema. Para explicar esse fenômeno criamos um modelo heurístico capaz de explicar e prever quantitativamente essas novas forças nesse sistema.

Para o cálculo das forças foram usados dois modelos comuns a esse tipo de sistema, o tensor de Maxwell e força de dipolo. Porém, existem outros modelos de força, além desses dois, que são comumente usados. Entretanto, por se tratarem de modelos drasticamente diferentes, é praticamente impossível compará-los usando apenas densidade de força volumétrica. Para comparar

os modelos diferentes, iremos usar tensores de *stress* de cada força, criando um tensor de *stress* generalizado que é capaz de reproduzir todos os modelos de força em meios dielétricos. Dessa maneira, com as forças na mesma linguagem, é possível compará-las mais facilmente.

Assim como no capítulo anterior, será usada a densidade de força linear \mathbf{q} , que consiste na derivada da força total pela direção de propagação. O motivo de usarmos essa densidade de força ao invés da densidade de força volumétrica é o fato de que guias de onda são estruturas susceptíveis a envergamento na direção de propagação, pois eles são longos e finos. Já a seção transversal deles permanece praticamente inalterada. Logo, saber como a força varia transversalmente na seção transversal não nos dá informação muito relevante quando estamos interessados em saber como o guia enverga.

5.2 Tensor de Stress Geral

Na Eq. (2.1) temos o tensor de *stress* de Maxwell, também conhecido como tensor de Lorentz. As diferentes formulações de *stress*, Einstein-Laub [34], Minkowski [34], Lorentz [34, 35] podem ser expressas pelo único tensor de *stress*:

$$\mathcal{T}_{nm} = \varepsilon_0 \left(\varepsilon^n \boldsymbol{\mathcal{E}} \otimes \boldsymbol{\mathcal{E}} - \frac{\mathbb{1}}{2} \varepsilon^m \boldsymbol{\mathcal{E}} \cdot \boldsymbol{\mathcal{E}} \right) + \mu_0 \left(\boldsymbol{\mathcal{H}} \otimes \boldsymbol{\mathcal{H}} - \frac{\mathbb{1}}{2} \boldsymbol{\mathcal{H}} \cdot \boldsymbol{\mathcal{H}} \right), \quad (5.1)$$

onde $n, m = 0$ ou 1 e ε é a permissividade relativa dos guias de onda.

Com essa definição geral, nós temos que \mathcal{T}_{00} é o tensor de *stress* de Lorentz [34, 35], \mathcal{T}_{10} é o tensor de *stress* de Einstein-Laub [34], \mathcal{T}_{11} é o tensor de *stress* de Minkowski [34] e \mathcal{T}_{01} é um tensor não encontrado na literatura.

Aplicando o divergente desse tensor, podemos definir qual é a densidade de força ótica \mathcal{F} como:

$$\mathcal{F}_{00} = -\boldsymbol{\mathcal{E}} \nabla \cdot \boldsymbol{\mathcal{P}} + \mu_0 \partial_t \boldsymbol{\mathcal{P}} \times \boldsymbol{\mathcal{H}}, \quad \text{Lorentz} \quad (5.2)$$

$$\mathcal{F}_{10} = (\boldsymbol{\mathcal{P}} \cdot \nabla) \boldsymbol{\mathcal{E}} + \mu_0 \partial_t \boldsymbol{\mathcal{P}} \times \boldsymbol{\mathcal{H}}, \quad \text{Einstein-Laub} \quad (5.3)$$

$$\mathcal{F}_{11} = -\frac{1}{2} \varepsilon_0 \boldsymbol{\mathcal{E}} \cdot \boldsymbol{\mathcal{E}} \nabla \varepsilon, \quad \text{Minkowski} \quad (5.4)$$

$$\mathcal{F}_{01} = \mathcal{F}_{00} + \mathcal{F}_{11} - \mathcal{F}_{10}, \quad \text{Unnamed} \quad (5.5)$$

onde $\boldsymbol{\mathcal{P}} = \varepsilon_0(\varepsilon - 1)\boldsymbol{\mathcal{E}}$ é a densidade de polarização.

5.2.1 Densidade de Força

Aplicando o teorema da divergência descontínuo em um certo volume obtemos novamente (2.9). Para obter a densidade de força \mathbf{q} , derivamos \mathbf{F} na direção de propagação. Porém, dessa vez, será assumido que a direção de propagação não é mais uniforme, mas pode se curvar arbitrariamente em um caminho. Em outras palavras, a luz está confinada em um volume e pode se propagar em um certo caminho arbitrário. Seja essa curva parametrizada pelo comprimento de arco s , dessa maneira temos que:

$$\mathbf{q} = \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial s} \quad (5.6)$$

A derivação de \mathbf{q} nesse caso será distinta da derivação anterior, pois, deve ser levado em consideração que a normal também vai mudar de direção com s e não apenas o tensor de *stress* pode variar com s . Dessa maneira, guias de onda curvos, mesmo quando apenas um modo é excitado e um guia de

onda usado, sofrerão uma força devido à variação da direção de propagação (normal). O que pode ser entendido devido ao fato de que a luz está fazendo uma curva: o momento eletromagnético está mudando de direção, o que irá gerar uma força.

Para derivarmos a densidade de força \mathbf{q} , iremos integrar (2.9) em um volume de espessura δs na direção de propagação. Para o caso de propagação no eixo z como anteriormente, o volume terá espessura δz , como mostrado na Fig. 5.1(a). Caso a direção de integração seja arbitrária, teremos como mostrado na Fig. 5.1(b), aqui ilustrado em coordenadas cilíndricas por simplicidade.

Das seis faces (Γ) da região mostrada na Fig. 5.1, onde duas são verdes (tampas) e quatro são azuis (lados), as faces azuis e verdes terão que ser tratadas diferentemente para se achar a força \mathbf{q} , uma vez que, no processo limite da espessura tendendo a zero, as faces azuis colapsam em uma curva.

Para as faces paralelas, a direção de propagação Γ_{\parallel} temos que o elemento de área dS envolve $s(z)$. Para o caso de propagação reta (Fig. 5.1(a)), $dS = dx dz$ ou $dy dz$. Dessa maneira, no limite de $\delta z \rightarrow 0$, temos que a integral dupla se transforma em uma integral de contorno. Em coordenadas cilíndricas, temos que para essas faces azuis $dS = r d\phi dy$ ou $r d\phi dr$. Ao invés de derivarmos em termos do comprimento de arco s , podemos igualmente derivar em termos de ϕ , uma vez que $s = \phi R_{wg}$, onde R_{wg} é o raio do guia de onda. Dessa maneira, no limite de $\delta s \rightarrow 0$ novamente temos uma integral de linha.

As faces perpendiculares à direção de varredura Γ_{\perp} não envolvem $s(z)$ no elemento de área dS . Sendo $dS = dx dy$ para o caso de propagação reta (Fig. 5.1(a)) e $dS = r dr dy$ para o caso de propagação curva em coordenadas

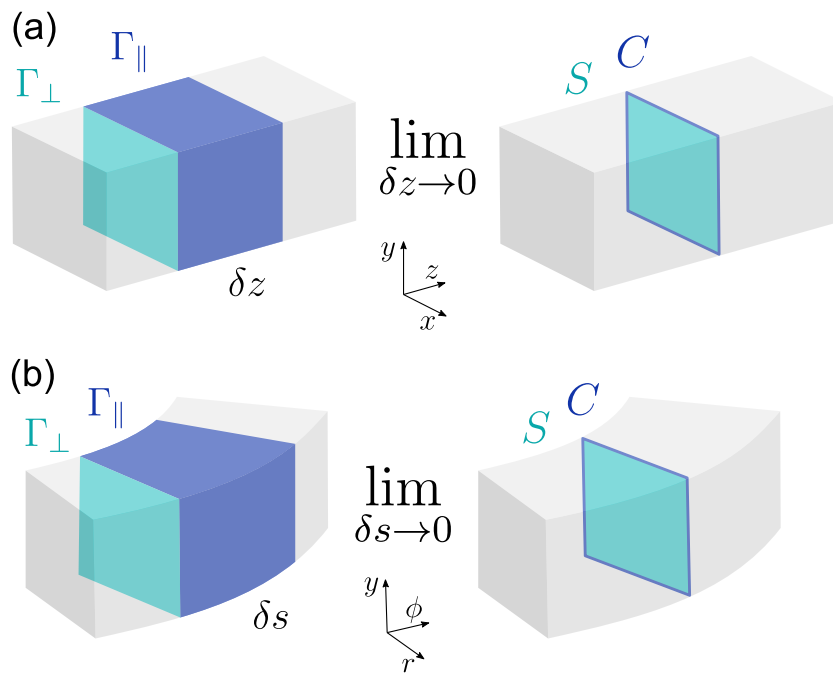


FIGURA 5.1: Superfície de integração para a Eq. (2.9). Em (a) é mostrado o caso de propagação no eixo z , enquanto em (b) é mostrado a propagação em direção arbitrária caracterizada pelo comprimento de arco s , aqui demonstrado por simplicidade como um arco em coordenadas cilíndricas. Γ_{\parallel} define a superfície paralela a direção de propagação enquanto Γ_{\perp} a direção perpendicular. No caso limite da espessura δs ou δs tenderem a zero, a superfície Γ_{\parallel} é transformada no contorno C , enquanto a superfície Γ_{\perp} se transforma na superfície S .

cilíndricas (Fig. 5.1(b)). No limite de $\delta s \rightarrow 0$, teremos que o integrado será derivado em s , pois as duas faces irão colapsar em apenas uma e a normal é opostas em faces oposta. Logo a densidade de força linear será:

$$\begin{aligned} \mathbf{q}R_{\text{wg}} &= \partial_\phi \mathbf{F} \\ &= \iint_S \partial_\phi (\langle \mathcal{T}_{\text{in}} \rangle \cdot \hat{\mathbf{n}}) \, dr dy + \oint_C \langle \mathcal{T}_{\text{out}} \rangle \cdot \hat{\mathbf{n}} \, r \, \underset{\text{dy or dr}}{dl} \\ &= \iint_S \langle \partial_\phi \mathcal{T}_{\text{in}} \rangle \cdot \hat{\mathbf{n}} \, dr dy + \iint_S \langle \mathcal{T}_{\text{in}} \rangle \cdot \partial_\phi \hat{\mathbf{n}} \, dr dy + \oint_C \langle \mathcal{T}_{\text{out}} \rangle \cdot \hat{\mathbf{n}} \, r dl \quad (5.7) \end{aligned}$$

onde foi derivado para o caso de guias de onda fazendo curvas (trajetória circular), pois o caso reto foi derivado previamente. Por simplicidade, o subscrito nm será omitido. O primeiro termo em (5.7) é presente apenas em superposição de modos, pois apenas assim o tensor de *stress* varia com a direção de propagação¹. O segundo termo é presente apenas quando o guia de onda faz uma curva, dessa maneira, a normal muda de direção. O terceiro termo é o termo de contorno nas laterais do guia de onda na posição s .

Fora dos guias de onda temos que $\mathcal{T}_{nm} = \mathcal{T}_{00}$, pois $\varepsilon = 1$ (vácuo). Logo as integrais que envolvem termos fora do guia de onda darão sempre o mesmo resultado. O mesmo não ocorre para o tensor de *stress* generalizado dentro da matéria. Nesse caso, cada formulação dará resultado diferente.

Para modos em propagação reta, temos apenas o terceiro termo de (5.7), que envolve campos fora da matéria. Com isso, temos que todas as leis de força darão o mesmo resultado, assim provando o resultado encontrado na seção anterior.

¹Uma outra maneira do tensor variar seria se a própria geometria não for uniforme nessa direção, como o caso de *tapers* ou cristais fotônicos

5.3 Simulação

Na seção anterior foi derivada a densidade de força \mathbf{q} através do tensor de *stress* generalizado. Para comparar a diferença entre os modelos, foi feita uma simulação por elementos finitos e estudados alguns tipos de geometria com diferentes tipos de injeção de modos. A geometria usada consiste de guias de onda de silício de largura de 280 nm e altura 380 nm, comprimento de onda de excitação de 1550 nm e índice de refração de $n = 3.45$. Para um único guia de onda, existem dois modos de polarização TE e TM [12]. Foram estudados um e dois guias de onda em geometria reta e circular. Quando se tem dois guias de onda, o sistema acoplado possui quatro modos. E para o caso de apenas um guia de onda, sua largura é o dobro, 560 nm.

Na Fig. 5.2 temos a componente x da força de modo (a) e da força de batimento (b), que surge quando se faz a superposição de certos modos, para a geometria de dois guias de onda retos acoplados. Na Fig. 5.2(a), temos que as forças de modos para os quatro tensores de *stress* dão o mesmo resultado, onde é mostrado apenas uma delas para os quatro modos. Para a superposição, existem apenas duas combinações não nulas, a soma dos modos 1 e 2, ambos TE, e a soma dos modos 3 e 4, ambos TM. Apenas essas combinações de modos possuem um centro de energia não nulo na direção x . Expandindo $\langle \partial_z \mathcal{T}_{in} \rangle \cdot \hat{\mathbf{n}}$, é possível ver que a componente transversa irá depender apenas de n e será independente de m . Dessa maneira, a força ótica será dividida segundo o valor de n como mostrado na Fig. 5.2(b), onde linhas sólidas são $n = 0$ (Lorentz ou a força sem nome, *Unnamed*), e as linhas tracejadas são $n = 1$ (Einstein-Laub ou Minkowski). Note que a curva vermelha é similar

ao resultado encontrado na última seção. Porém, o resultado para a combinação de modos TM é drasticamente diferente, com as forças em direções opostas. É importante ressaltar que essas forças atuam no centro de massa do sistema como mostrado no *inset*.

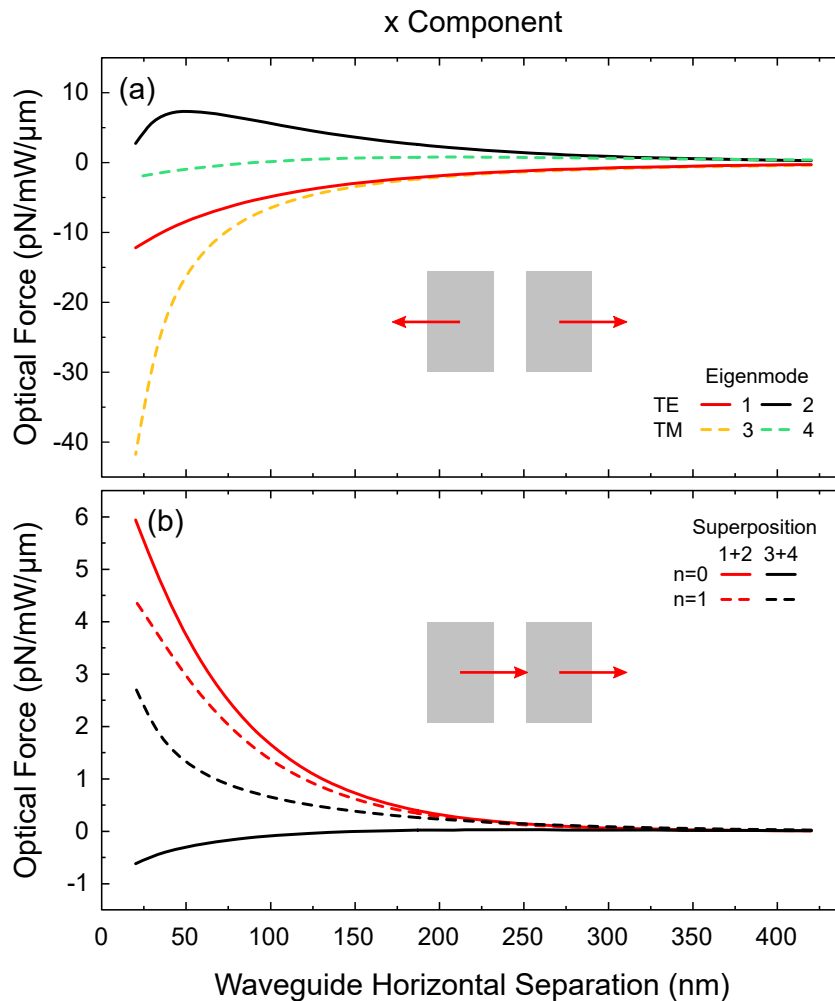


FIGURA 5.2: Força ótica para modos (a) e para superposição (b). Em (a) todas as quatro forças derivadas do tensor de *stress* geral dão o mesmo resultado e apenas um é mostrado. Em (b) existe dois valores distintos para a força para cada superposição, que é determinado pelo valor de n no tensor de *stress*.

Na Fig. 5.3 temos a componente y da força de batimento. Em (a), a combinação de modos não causa uma variação no centro de massa, apenas um cisalhamento entre os guias de onda, enquanto que, em (b), ocorre uma variação do centro de massa. Assim, como no caso da componente x , irão existir

apenas duas forças distintas dependendo do n usado no tensor de *stress* geral. Para o caso de cisalhamento (a), as duas forças possíveis são muito parecidas entre si, porém, para o caso da força que atua no centro de massa (b), elas são drasticamente diferentes.

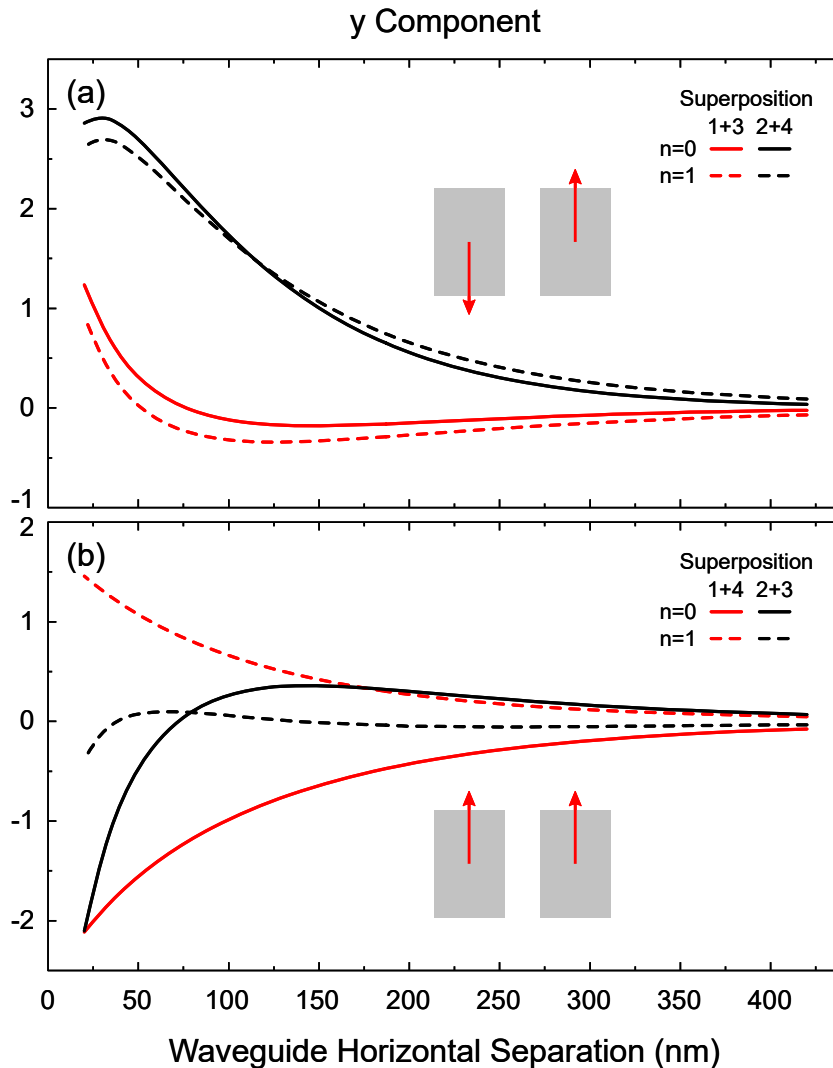


FIGURA 5.3: Força ótica para superposição de modos. Em (a) temos combinações que causam cisalhamento entre os guias de onda, enquanto em (b) temos combinações que causam variação no centro de massa do sistema. Em ambos os casos existem dois valores distintos para a força para cada superposição que é determinado pelo valor de n no tensor de *stress*.

Na Fig. 5.4 temos a componente z da força de batimento. Nesse caso, por ser a componente longitudinal, existirão 4 forças diferentes que dependem

dos valores de n, m . Essas forças são de cisalhamento e podem ser entendidas como uma reação do guia de onda quando a luz deixa um guia e vai para o outro, dessa maneira eles são acelerados em direções opostas. A força de Minkowski ($n = 1, m = 1$) é sempre zero, pois a densidade de força é proporcional a $\nabla \epsilon$, que varia apenas transversalmente.

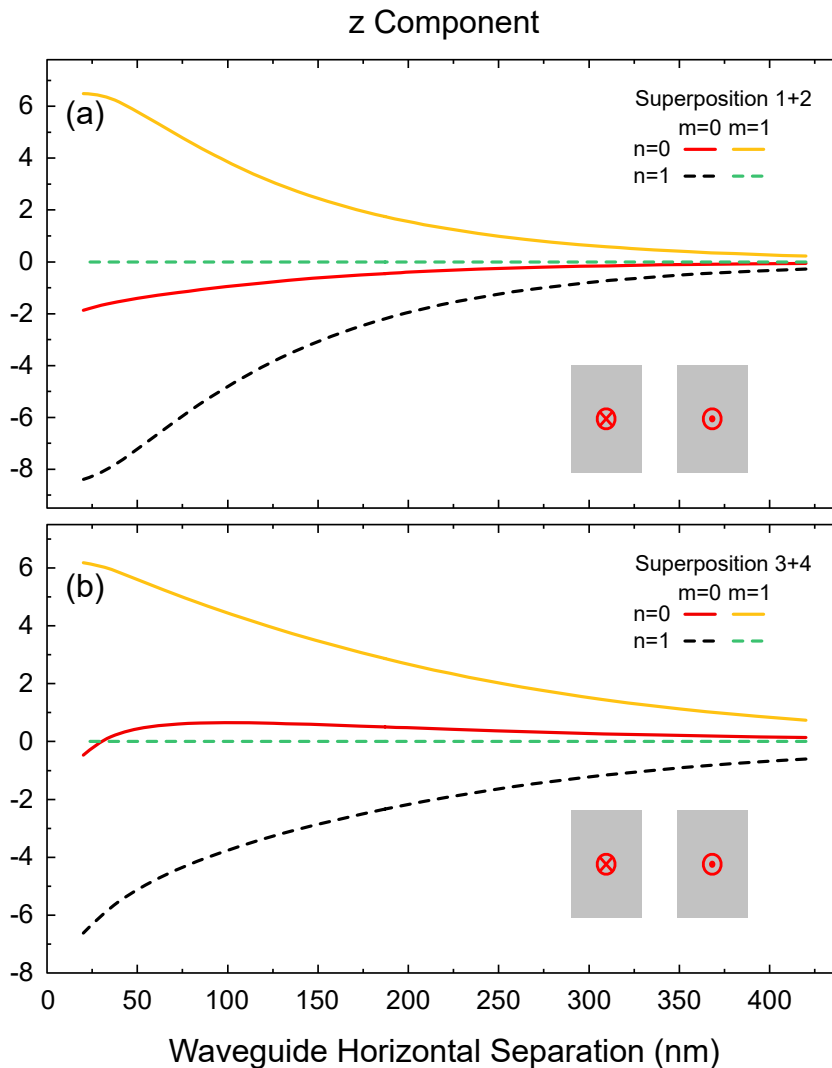


FIGURA 5.4: Força ótica para superposição de modos. Em (a) temos a superposição do modo 1 e 2, enquanto em (b) temos a superposição 3 e 4, com ambas as forças causando cisalhamento nos guias de onda.

Para a análise feita até então, exploramos as diferentes combinações de modos e quais tipos de forças isso pode gerar, forças transversas e longitudinais, forças que causam variação no centro de massa ou cisalhamento.

Porém, nessa análise, foram estudados apenas guias de onda retos. O termo relacionado à curvatura do guia de onda em (5.7) foi até então ignorado. Porém, uma análise como a anterior para guias de onda curvos é extremamente complicada, pois todos os valores de n, m são importantes. Existirão 4 forças de modo para os 4 modos, totalizando 16 forças distintas. Para o caso da superposição, teremos mais forças ainda. Apesar de ser possível mostrar todas as variações possíveis de força, uma análise tão profunda não traria um melhor entendimento qualitativo dessas forças de batimento que surgem, pois não temos como *a priori* distinguir quais são as forças corretas correspondentes a um experimento.

Para comparar os diferentes efeitos das forças em diferentes geometrias, iremos mostrar como as forças variam com a direção de propagação $s(z)$. Para isso, iremos usar apenas a força de Lorentz por simplicidade. Na Fig. 5.5 temos guias de onda retos em duas geometrias, apenas um guia de onda (a,b) ou dois guias de onda (c,d). Para o caso de apenas um guia de onda, a largura deles é o dobro da geometria de apenas um guia de onda. Como pode ser visto, quando temos forças de modo para um único guia de onda, (a), a força é identicamente zero, porém existirá uma força de batimento quando uma superposição de modos é introduzida, (b). Essa força pode atingir amplitudes bem altas, como visto anteriormente, quando a separação dos guias diminui, a força de batimento aumenta, e esse é o caso de separação zero entre os guias de onda. Para o caso de dois guias de onda, existirão duas forças de modo (c), mostradas como curva sólida e tracejada. Quando se tem a superposição desses dois modos, temos a força da batimento mostrada em (d), onde temos a força total no sistema e força de modo mais força de batimento

(por isso as curvas não se superpõem). Podemos ver que, nessa situação, as forças de modo quase se anulam. Dependendo de como é feita a superposição, quantidade de cada modo, ou escolhendo a geometria, a curva vermelha e preta podem se aproximar ou afastar e a ondulação pode aumentar ou diminuir. Dessa maneira, é possível ter um controle muito grande de como as forças atuam em cada guia de onda individualmente. Apesar de que na Fig. 5.5 é mostrado apenas a componente x da força, o mesmo pode ser feito para as componentes y e z , assim como combinar mais de dois modos, para ter um maior controle das forças.

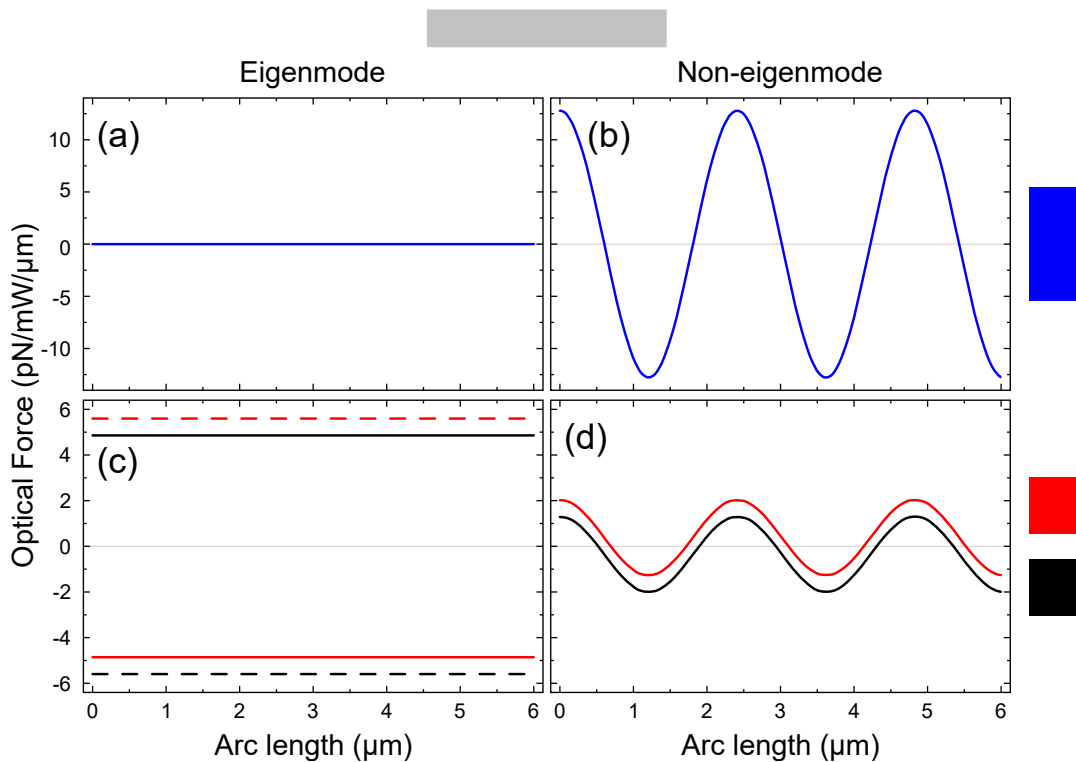


FIGURA 5.5: Força ótica para superposição de modos de guias de onda retos. Em (a,b) temos apenas um guia de onda enquanto que em (c,d) temos dois guias de onda. Em (a,c) são mostradas apenas forças de modo, enquanto que em (b,d) são mostradas a força total em uma superposição de modos (força de modos e batimento).

Na Fig. 5.6 temos guias de onda curvos em uma trajetória circular. Diferentemente do caso reto, para forças de modo de um único guia de onda, (a),

temos uma força não nula. Essa força surge devido à curvatura do guia de onda e ao fato do campo não ser mais simétrico em faces opostas do guia de onda. Dessa maneira, a luz, ao curvar, originará uma reação no guia empurrando-o. Para a superposição de modos em um único guia, (b), temos novamente a força de batimento variando com a direção de propagação. Para o caso de dois guias de onda (c), a força de modo é similar à da Fig. 5.5, porém a força está deslocada para cima devido a força que surge pelo guia se curvar. Uma situação interessante acontece no caso da superposição de modos (d), onde a força da batimento tem sinal e amplitudes opostas em guias de onda opostos. Dessa maneira, a força total está fora de fase devido à curvatura de cada guia ser diferente, cada um deles terá um comprimento de batimento diferente.

5.4 Conclusão

Como existem diferentes modelos para forças óticas e a forma da densidade de força drasticamente difere entre cada modelo, se torna difícil, senão impossível, comparar esses modelos entre si e discernir as principais diferenças ou similaridades entre eles. Para isso foi criado um modelo de tensor de *stress* geral, onde variando índices nesse tensor é possível obter as forças de Lorentz, Einstein-Laub e Minkowski. É possível também ver que existe uma quarta força não mencionada na literatura. Essa força pode ser interpretada como uma soma e subtração das outras três forças.

Uma vez que possuímos um único tensor de *stress* que é capaz de reproduzir todas as forças óticas nesse tipo de sistema, partimos para deduzir qual

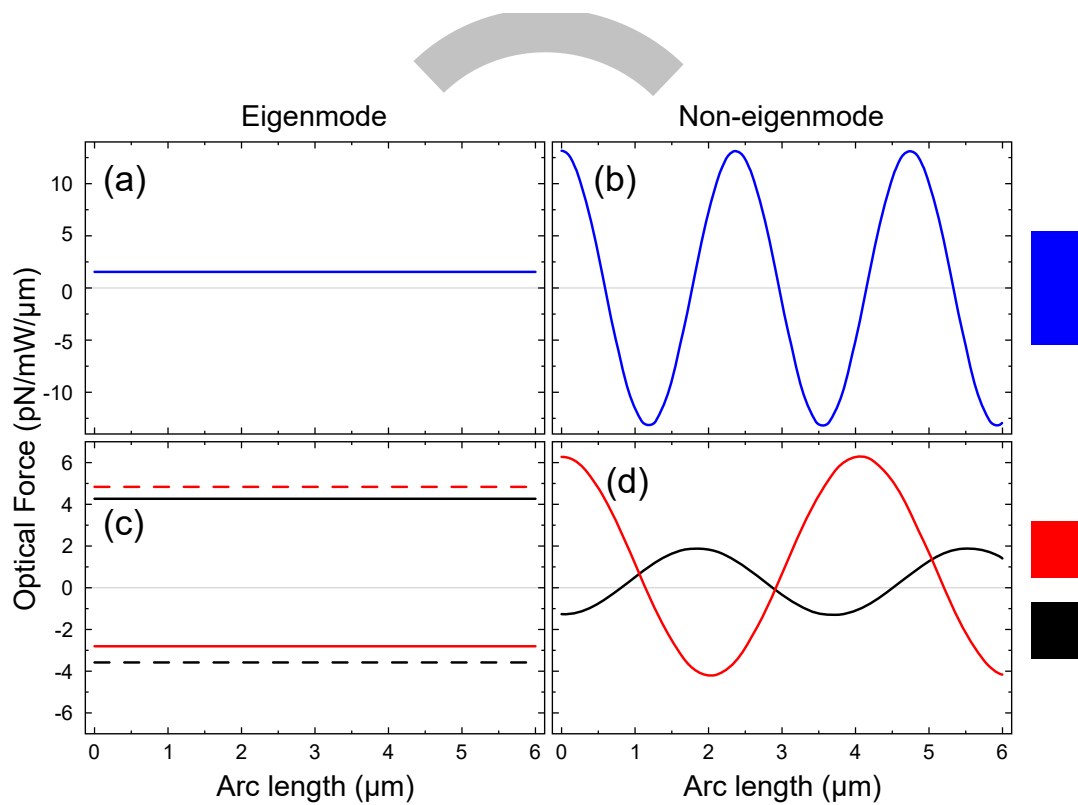


FIGURA 5.6: Força ótica para superposição de modos de guias de onda curvos em um arco. Em (a,b) temos apenas um guia de onda enquanto que em (c,d) temos dois guias de onda. Em (a,c) é mostrado apenas forças de modo, enquanto que em (b,d) é mostrado a força total em uma superposição de modos (força de modos e batimento).

é a forma correta do uso do teorema da divergência para o cálculo da densidade de força linear. Essa densidade de força é a quantidade ideal para o cálculo de envergadura em estrutura de guia de onda e tem as vantagens de ser uma grandeza que varia apenas com a distância de propagação. Vemos que o uso incorreto do teorema da divergência pode acarretar em um cálculo errôneo dessa força, onde dois termos seriam ignorados, um correlacionado a superposição de modos e o outro a curvatura do guia de onda. Caso esses dois termos não fossem considerados, teríamos que todas as quatro forças óticas dariam o mesmo resultado. Porém, devido ao fato de que eles não podem ser ignorados, temos que, dependendo do tensor de *stress* usado, teremos forças drasticamente diferentes. Enquanto algumas dessas forças possuem diferentes sinais e magnitudes, outras são identicamente zero. Logo, vemos que não é trivial o uso de força ótica nessas estruturas e não podemos simplesmente pegar um modelo e usá-lo sem antes abordar profundamente as suas implicações.

Isso gera a pergunta de qual é o modelo correto a ser considerado nesse tipo de sistema. Se seria uma das quatro forças ou talvez uma média ponderada entre as forças? A grande maioria dos trabalhos em força ótica em guias de onda usam a força de Lorentz ou a força de Minkowski, que muitas vezes é apenas erroneamente chamada de MST. Porém, são raros os trabalhos onde diferentes modelos de força são comparados para averiguar sua validade para a situação em questão. Isso pode explicar as disparidades entre experimento e teoria: o modelo utilizado pode não ter sido o correto para a situação.

Foi visto também como a geometria e o caminho da luz podem influenciar

nas forças óticas no sistema. Dessa maneira, não ficando apenas restrito ao uso de guias de onda retos, guias de onda em trajetórias arbitrárias também podem ser projetados para aplicações específicas para um aumento na força ótica. Em particular, esse é um tópico interessante quando se quer abordar anéis ressonadores suspensos, e fica claro que o modelo de força para esse caso é crucial para um entendimento de como o sistema se comporta.

Parte II

Fabricação de Nano-ilhas de MoS₂

via SPM

Capítulo 6

Introdução

Materiais bidimensionais têm atraído bastante atenção recentemente devido as suas propriedades não usuais ou novas propriedades: alta eficiência no transporte elétrico [51–53], melhores propriedades óticas [54], elétricas [55] e/ou mecânicas [56, 57], e outras potenciais aplicações [58–62]. O dissulfeto de molibdênio (MoS_2) faz parte da família dos dicalcogenetos de metal de transição (TMDs - *Transition Metal Dichalcogenides*) e, ao contrário do grafeno – o primeiro material bidimensional descoberto, possui um *gap* não nulo [63], que constitui um requerimento essencial para aplicações elétricas e opto-elétricas. Quando em bulk, o MoS_2 possui um *gap* indireto (1.29 eV) [63]. Porém, ele sofre uma gradual mudança para *gap* direto (1.90 eV) quando isolado em monocamadas, uma característica comum em TMDs [54, 63]. Dessa maneira, o MoS_2 pode ser usado como fotodetector ultrasensível [60], para conversão e armazenamento de energia [64], células solares [65], em LEDs [61], e outras aplicações [59].

Um dos problemas que tem dificultado aplicações dos TMDs é precisamente sua produção em monocamadas. A exfoliação micromecânica é uma técnica barata e rápida de produção de TMDs em monocamada [66, 67]. Esse

método consiste em usar algum tipo de fita adesiva para poder clivar sucessivamente as camadas do material. Depois de um número grande de clivagens, tipicamente obtém-se alguns flocos de monocamadas. Porém, sua maior desvantagem é a falta de controle no tamanho e espessura. Não se pode *a priori* controlar, ou mesmo saber, qual o tamanho e número de camadas dos flocos encontrados. Normalmente é um quesito de sorte encontrar flocos, que depende não apenas do tipo de floco inicial ou fitas usados, mas também depende fortemente do usuário que realiza o processo. Devida a essa falta de controle, a esfoliação micromecânica não é um método ideal para larga escala, o que é um requerimento para aplicações em escala industrial.

Outras técnicas incluem esfoliação química, que é mais reprodutível, porém tipicamente produz pequenos flocos [68, 69]. Nesse processo, são usados meios químicos para o processo de clivagem, onde o solvente diminui a tensão superficial entre o líquido e as camadas do material, dessa maneira facilitando a separação das camadas e resultando em flocos de espessura menor.

Deposição química em fase vapor (CVD - *Chemical Vapor Deposition*) é um método de conseguir monocamadas em larga escala [70–72]. Nesse processo, um substrato é exposto a precursores voláteis que irão reagir e/ou decompor em sua superfície para produzir o material requerido.

Para a aplicação em dispositivos, muitas vezes são necessários vários passos adicionais como transferência entre substratos, através de técnicas como estampas viscoelásticas [73], que permitem um posicionamento preciso do floco monocamada. Processos de litografia e *etching* também são necessários

para conformar a monocamada em geometrias específicas para certas aplicações.

Capítulo 7

Material e Técnicas

Nesse capítulo serão apresentados o material estudado, MoS_2 , e as diversas técnicas experimentais usadas, entre elas: espectroscopia Raman, espectroscopia de fotoluminescência e microscopia de varredura por sonda.

7.1 MoS_2

A Fig. 7.1 mostra um desenho esquemático da estrutura do MoS_2 , adaptado de Suzuki et al. [74]. MoS_2 possui estrutura semelhante ao grafeno do tipo “colmeia de abelha”, porém possui átomos de molibdênio sanduichados por átomos de enxofre acima e abaixo. Uma característica marcante do MoS_2 , e outros TMDs, é a falta de simetria de inversão em número ímpar de camadas e a sua presença em número par de camadas. Devido a esse fato, ocorre um acoplamento spin-orbita (SOC - *Spin-Orbit Coupling*) considerável que quebra a degenerescência da banda de valência do MoS_2 , dando origem a dois éxcitons no MoS_2 , chamados de éxciton A e B. O éxciton A é de mais alta energia em aproximadamente 150 meV do que o éxciton B, como mostrado na Fig. 7.2, adaptada de Feng et al. [75].

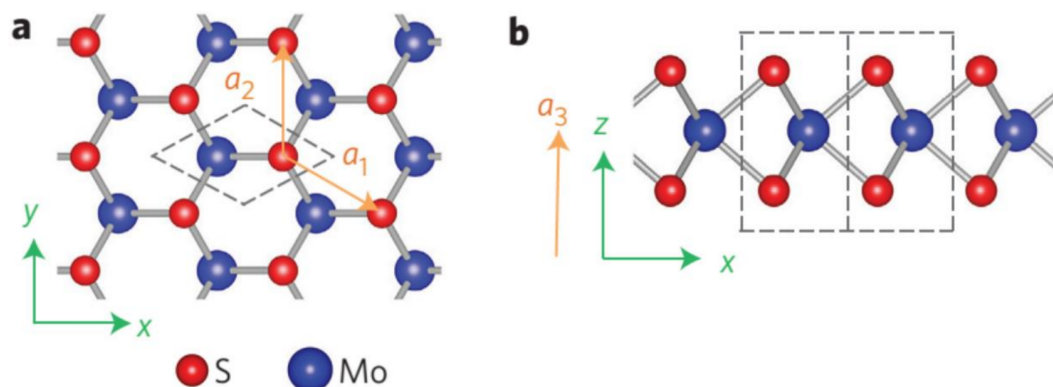


FIGURA 7.1: Desenho esquemático da estrutura do MoS₂ e a sua célula unitária (adaptado de Suzuki et al. [74]). Em (a) tem-se a visão de cima, enquanto em (b) uma visão lateral. Linhas tracejadas indicam a célula unitária.

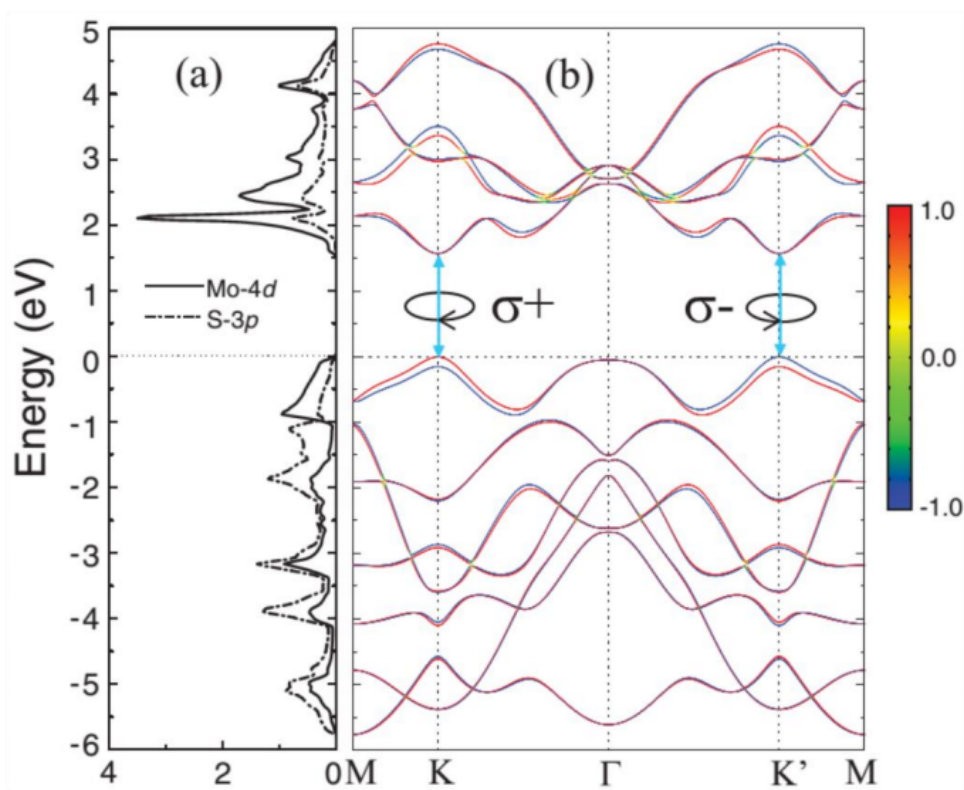


FIGURA 7.2: Estrutura de bandas e densidade de estados do MoS₂, adaptada de Feng et al. [75]. Em (a) tem-se a densidade de estados para os orbitais Mo-4d e S-3p. Em (b) a estrutura de bandas com projeção no operador de *spin*. As cores vermelho e azul indica estados de *spin* para cima e para baixo, respectivamente.

7.2 Microscopia de Força Atômica (AFM)

A microscopia de força Atômica (AFM - *Atomic Force Microscopy*) é uma técnica muito versátil, e com muitas vertentes, capaz de caracterizar superfícies de vários materiais com resolução atômica [76–79]. AFM faz parte de uma família maior de técnicas similares denominada microscopia de varredura por sonda (SPM – *Scanning Probe Microscopy*), onde o funcionamento principal constitui em usar uma sonda (ponta) para interagir com a superfície do material [78, 80, 81]. Para o caso específico do AFM, a interação entre a sonda e a superfície se dá através da força de van der Waals, cujo alcance da interação é da ordem de algumas dezenas de nanômetros [82]. Com o AFM é possível obter informações morfológicas da superfície, informações mecânicas [83], como dureza (módulo de Young) [84], entre outras [76, 77].

Apesar de comumente chamados de microscópios de força atômica, o mesmo microscópio é capaz de operar em diferentes modos além da microscopia de força atômica, uma vez que a diferença entre cada modo se dá devido à mudança da interação entre sonda e superfície, ou nos sinais monitorados. Assim, o esquema de funcionamento entre as diferentes famílias de técnicas é essencialmente o mesmo, que está exemplificado na Fig. 7.3. A amostra (*sample*) fica sobre um escâner (*scanner*), que constitui geralmente um material piezoelétrico, comumente PZT (titanato zirconato de chumbo). Esse escâner pode movimentar-se nos três eixos, *xyz*, com precisão sub-nanométrica e provê a movimentação relativa sonda-amostra. Um laser incide na alavanca (*cantilever*) e, então, é refletido para um fotodetector de quadrante (*photodetector*). Esse fotodetector tem a incidência do laser em seus quatro quadrantes

balanceada de forma a minimizar o sinal de erro. Quando, durante a varredura, a alavanca sofre uma deformação, o ângulo de incidência do laser no fotodetector também mudará e, dessa maneira, o sinal no fotodetector pode ser correlacionado com deformações da alavanca quando ela interage com a superfície. Essas deformações podem ser diretamente ou indiretamente mapeadas em informações topológicas, elétricas, magnéticas, ou mecânicas da amostra, dependendo do modo de operação. O sinal do fotodetector então é interpretado pela eletrônica, que irá controlar como o piezoelétrico deve se mover, dessa maneira mudando a interação entre a alavanca e a amostra. Varrendo a amostra no plano e monitorando a deformação da alavanca, é possível então criar uma imagem topográfica da amostra, assim como obter outras informações relevantes.

7.2.1 Modos de Operação

Apesar de existir outros tipos de modos de operação do AFM, os mais utilizados podem ser divididos em duas classes: uma onde a alavanca oscila próximo da ressonância e outro onde ela é deformada apenas estaticamente. Cada uma dessas duas maneiras possuem suas vantagens e desvantagens, mas o princípio de operação dos dois métodos é bem similar. Como o próprio nome implica, no AFM, as forças de interação são forças atômicas (van der Waals). Quando a ponta da alavanca se aproxima da amostra, algumas dezenas de nanômetros, surge uma força atrativa que irá tender a aproximar mais a ponta da amostra, Fig. 7.4. Quando a ponta é aproximada mais ainda da amostra, a força irá passar a ser repulsiva (devido ao princípio de exclusão de Pauli), impedindo uma aproximação maior da ponta na amostra

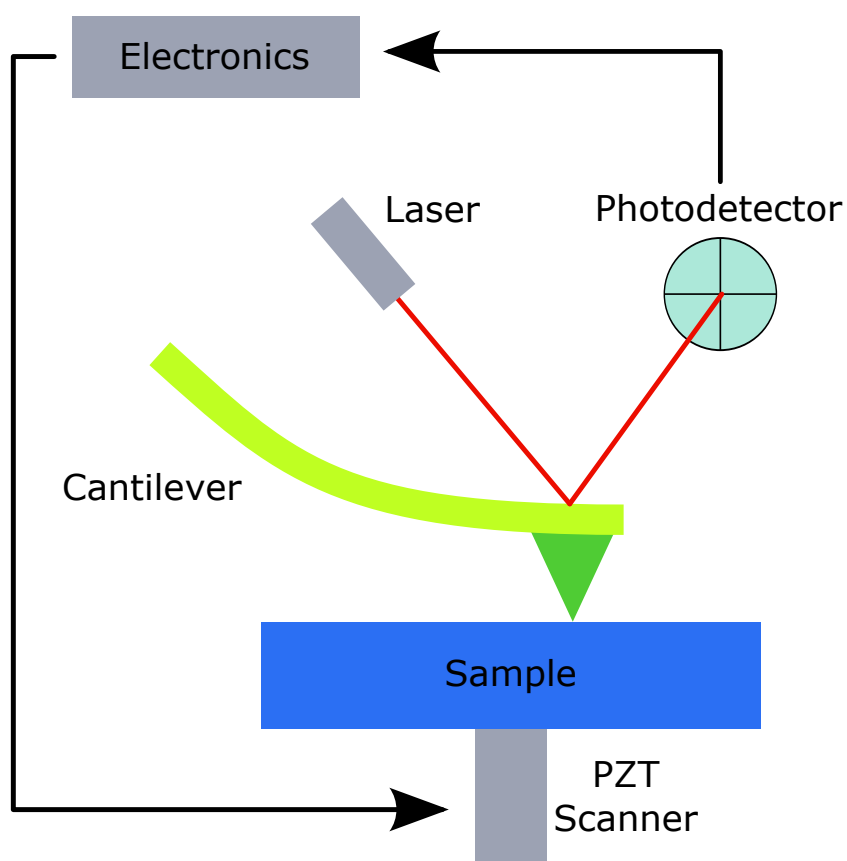


FIGURA 7.3: Esquemático do funcionamento do AFM. Um laser incide sobre a superfície superior de uma alavanca (*cantilever*) e é refletido para um fotodetector (*photodetector*). A eletrônica do AFM é capaz de interpretar os sinais adquiridos pelo fotodetector e com isso movimentar um escâner (*scanner*) que se encontra debaixo da amostra (*sample*). Dessa maneira, é possível controlar como a interação entre a alavanca e a amostra será e com isso criar uma imagem topográfica da amostra.

(contato). Dessa maneira, temos uma região bem grande de interação entre a sonda e a amostra, onde se pode escolher qual é a melhor região de trabalho segundo a aplicação requerida.

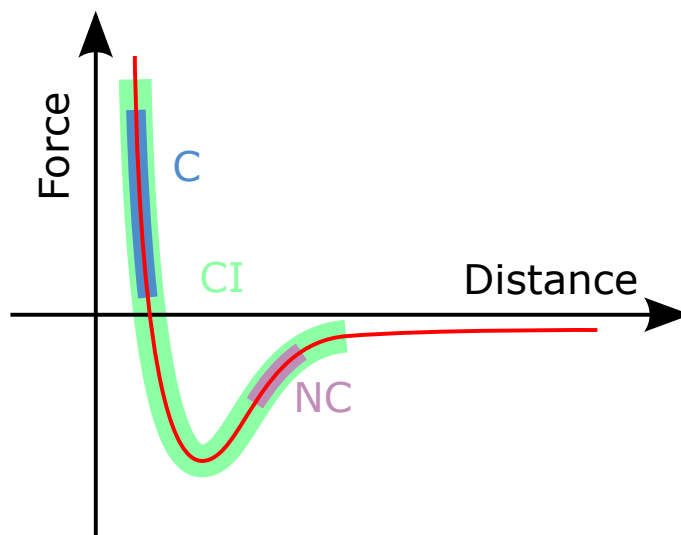


FIGURA 7.4: Força de van der Waals em função da distância de separação entre a ponta de AFM e a amostra. A região azul (C) indica a região de operação do modo contato repulsivo. A região roxa (NC) indica a região de operação do modo não-contato. A região verde (CI) indica a região de operação do modo contato intermitente, ou *tapping*.

Modo Contato

O modo não-oscilante, conhecido como modo contato (C-AFM) [77] usa, normalmente, a região repulsiva da força de van der Waals, Fig. 7.4. Dessa maneira, a sonda fica em contato direto com a amostra, podendo então controlar muito bem quais são as forças que ela fará na amostra. Normalmente, esse modo AFM-Contato é caracterizado por um sinal de força constante, ou seja, o piezoelétrico é subido ou descido de tal maneira que a força entre a ponta e a amostra seja uma constante estabelecida pelo usuário. Tal mapeamento de força é possível pois a alavanca funciona basicamente como uma mola e,

dessa maneira, deformações na mesma podem ser transladadas para forças se houver um conhecimento da constante de mola da alavanca.

Devido ao fato de que a ponta estar em contato direto com a amostra, irão surgir forças de atrito entre a ponta e a amostra, que poderá defletir a alavanca lateralmente (torção). Esse sinal de torção pode ser interpretado diretamente como força de atrito e, conseqüentemente, coeficiente de atrito, no método chamado de força lateral (LF-AFM) [85, 86]. Dessa maneira, é possível adquirir não apenas informações topográficas, mas várias outras informações sobre a superfície em conjunto.

Modo Não-Contato e *tapping*

Para o modo oscilante, normalmente, a alavanca é posta a oscilar próximo a sua frequência de ressonância. Devido ao fato de que uma alavanca de AFM é aproximadamente um sistema massa-mola, quando a alavanca é posta em um campo de força não uniforme (forças de van der Waals com a superfície), a frequência de ressonância e fase de oscilação da alavanca irão mudar de acordo com as forças atuando na mesma [87]. Essa mudança de frequência e fase pode ser facilmente monitorada e controlada através da eletrônica do AFM. Além de uma mudança na frequência e fase, também ocorrerá uma mudança na amplitude de oscilação da alavanca, que será o parâmetro importante para a varredura.

Quanto maior o gradiente de força (mais próximo da amostra), maior será a mudança na frequência de ressonância e menor será a amplitude de oscilação da alavanca. Dessa maneira, podemos controlar o quão perto a ponta está da amostra controlando a amplitude da mesma, subindo e descendo o

piezoelétrico até a amplitude requerida ser atingida. A amplitude de oscilação da alavanca na ausência do gradiente de força é chamada de amplitude ao ar livre, enquanto a amplitude que é escolhida pelo usuário é chamada de *setpoint*.

No modo não-contato (NC-AFM), é escolhido uma amplitude ao ar livre bem pequena, de tal maneira que a oscilação da alavanca fica sempre no regime atrativo, nunca encostando diretamente na amostra, Fig. 7.4. O que constitui o método ideal para amostras macias onde poderia ocorrer o risco de algum dano na amostra.

Outro método onde a alavanca oscila é o contato intermitente, mais conhecido pelo nome de *tapping*. Nesse método, a amplitude de oscilação ao ar livre é bem maior que no caso anterior e a amplitude de oscilação escolhida pelo usuário também é grande. Dessa maneira, a oscilação da alavanca cobre tanto o regime atrativo quanto o repulsivo, encostando periodicamente na amostra, por isso o nome, *tapping*, Fig. 7.4. Esse método é o mais popular por não necessitar um ajuste muito grande dos parâmetros e ser de mais fácil aquisição, e tendo a vantagem de ser um método pouco invasivo.

Nos métodos oscilantes, como mencionado anteriormente, haverá uma mudança na frequência de oscilação da alavanca assim como na fase de oscilação. Com esses sinais é possível adquirir informações extras, não-topográficas da amostra, já que eles estão diretamente correlacionados com a interação entre ponta e amostra. Por exemplo, com a fase de oscilação da alavanca é possível obter informações da dissipação de energia em uma oscilação da alavanca, dessa maneira possibilitando identificar regiões constituídas de materiais diferentes mesmo se não houver nenhuma mudança topográfica entre

essas regiões [88, 89].

7.3 Oxidação Anódica Local (LAO)

A oxidação anódica local (LAO - *Local Anodic Oxidation*) é uma técnica de nanofabricação onde a ponta de AFM é utilizada para oxidar uma amostra. Devido ao fato de que a ponta de AFM é muito pequena (poucos ou dezenas de nanômetros), é possível oxidar localmente regiões distintas da amostra, constituindo uma técnica litográfica de alta resolução. Diferentes tipos de materiais podem ser oxidados, como silício [90, 91], titânio [92], MoS₂ [93, 94], TMDs [95, 96], e até mesmo grafeno [97].

O funcionamento do LAO está exemplificado no esquema da Fig. 7.5. Devido à umidade ambiente, quando a ponta de AFM se aproximar da amostra, um menisco de água irá formar entre a ponta e a amostra. O tamanho desse menisco é ditado pela umidade, e varia não linearmente e constitui um parâmetro de extrema importância para o funcionamento do LAO [98]. Uma tensão pode ser aplicada entre a amostra através da eletrônica do equipamento. Devido à proximidade entre a ponta e a amostra (poucos ou dezenas de nanômetros), o campo elétrico será extremamente alto, na ordem de GV/m, e é alto o suficiente para romper a rigidez dielétrica da grande maioria dos materiais. Dessa maneira, no menisco de água formado, as ligações covalentes das moléculas de água serão rompidas formando oxianions (OH⁻, O⁻). Esses oxianions serão os responsáveis pela oxidação da amostra. Se uma tensão negativa for aplicada na ponta de AFM, o campo elétrico será orientado de tal maneira que os oxianions serão acelerados em direção a amostra, o que irá promover a oxidação da mesma.

Quanto menor a umidade, menor será o tamanho do menisco formado e conseqüentemente mais localizado lateralmente será a oxidação, porém mais

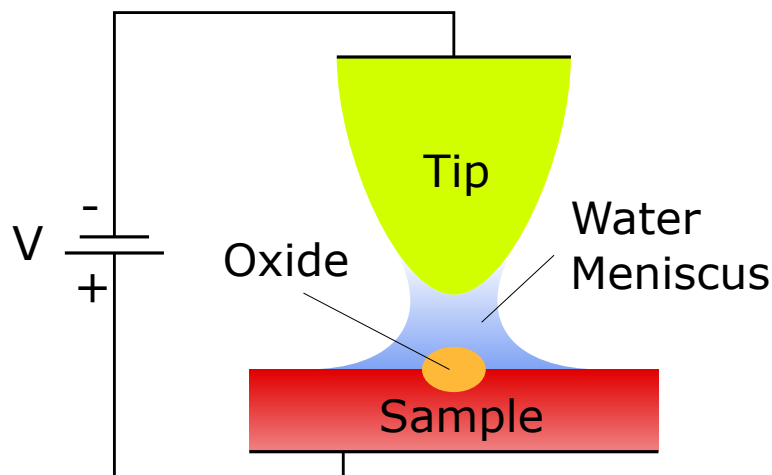


FIGURA 7.5: Desenho esquemático do funcionamento do LAO. A proximidade da ponta (*tip*) com a amostra (*sample*) irá formar um menisco de água devido à umidade ambiente. Ao se aplicar uma tensão na ponta ocorrerá a oxidação local da amostra na região debaixo da ponta.

difícil será oxidar a amostra. A tensão aplicada irá ditar a quantidade de oxigênions disponíveis e o quanto eles serão acelerados para a amostra, logo quanto maior a tensão, maior será o tamanho do óxido formado. E por último, quanto mais tempo se aplica tensão, maior será o tamanho do óxido. Dos três parâmetros, a umidade é o mais difícil de ser controlado, porém os outros dois parâmetros podem ser controlados facilmente para se obter uma oxidação do tamanho e geometria desejados.

Na Fig. 7.6 temos um exemplo de oxidação em MoS_2 , onde demonstramos ser possível oxidar linhas e círculos com alta precisão em posicionamento e tamanho. Dessa maneira, controlando os parâmetros da oxidação, conseguimos criar padrões litográficos em diversas superfícies.

O processo de oxidação por LAO pode ser feito tanto no modo contato como no modo não-contato. Apesar do modo não-contato oferecer um maior controle no processo de oxidação, o método utilizado nessa tese é o contato,

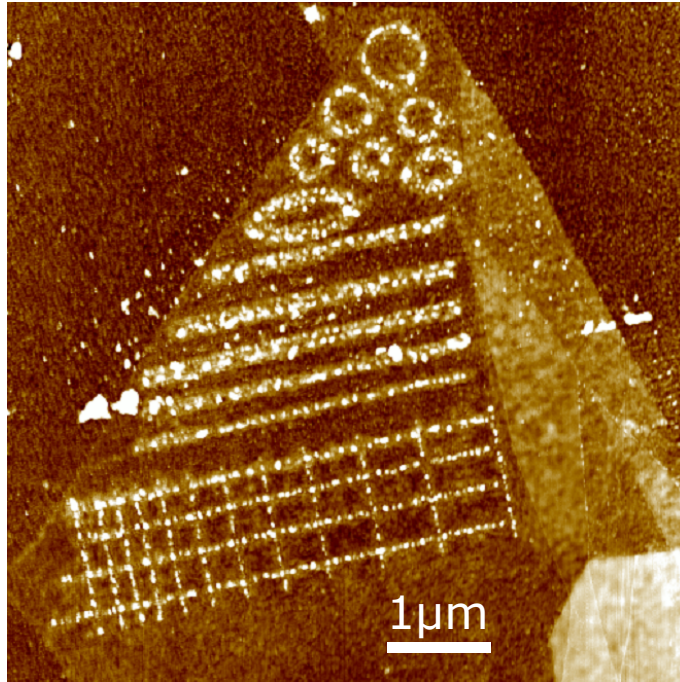


FIGURA 7.6: Oxidação de um floco monocamada de MoS₂. Linhas e círculos são litografados com alta precisão em posicionamento e tamanho.

pois oferece menos parâmetros que podem ser ajustados, dessa maneira tornando a técnica mais simples de ser empregada em prática.

7.4 Espectroscopia Raman

A espectroscopia Raman é uma técnica ótica capaz de observar o espectro vibracional e rotacional de moléculas. Essa técnica tem em seu princípio o espelhamento inelástico de um fóton por um fônon do material, resultando em um fóton em frequência diferente do incidente. O fóton resultante pode ter energia menor (Stokes) ou maior (anti-Stokes), onde o último é menos provável.

Na Fig. 7.7 é mostrado um diagrama do efeito Raman. Em (a) tem-se um fóton de energia E_i excitando o estado E_0 (fundamental) para um estado virtual. Depois de um curto período de tempo, a molécula decai para o estado vibracional E_v (excitado) emitindo um fóton de energia $E_i - E_v$ (Stokes), (b). Caso a molécula estivesse já no estado E_v , ao absorver o fóton, ela pode decair para o estado fundamental E_0 , resultando na emissão de um fóton de energia $E_i + E_v$ (anti-Stokes), (c).

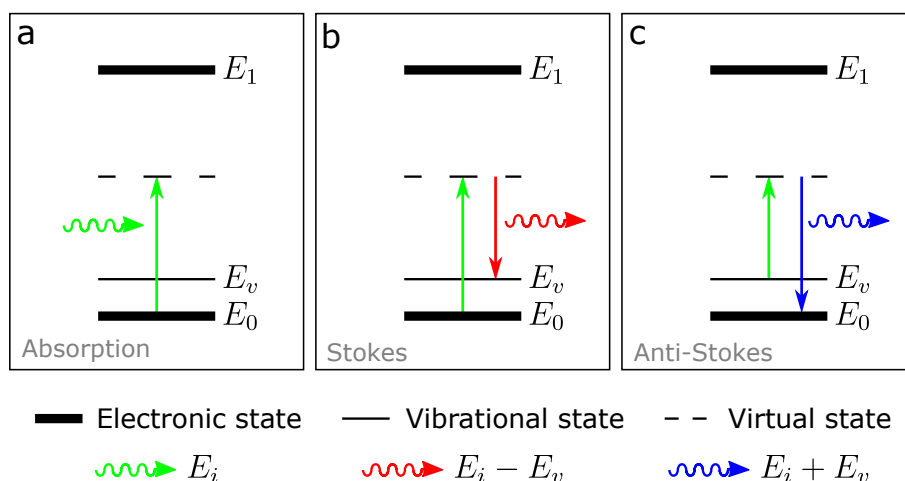


FIGURA 7.7: Diagrama do efeito Raman. Em (a) um fóton de energia E_i é absorvido, excitando a molécula para um estado virtual. Em (b) um fóton de energia $E_i - E_v$ é emitido ao decair para o estado vibracional E_v , caracterizando a linha Stokes. Em (c) um fóton de energia $E_i + E_v$ é emitido ao decair para o estado excitado E_0 , caracterizando a linha anti-Stokes.

7.4.1 Espectro Raman do MoS₂

A Fig. 7.8 mostra os modos de vibração Raman ativos do MoS₂. O modo E_{2g}^1 corresponde a vibrações óticas dos átomos de molibdênio e enxofre no plano, enquanto o modo A_{1g} corresponde a vibrações fora do plano. As frequências dos modos E_{2g}^1 e A_{1g} são dependentes do número de camadas do floco de MoS₂. O modo E_{2g}^1 fica mais “macio” (sofre *redshit*) com o aumento do número de camadas, enquanto o modo A_{1g} enrijece (sofre *blueshift*). Com isso, a diferença de frequência entre os dois picos é comumente usada para a identificação do número de camadas no MoS₂.

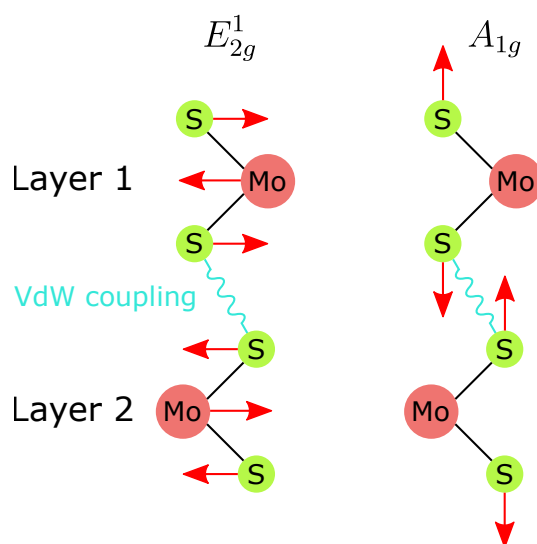


FIGURA 7.8: Desenho esquemático dos modos Raman A_{1g} e E_{2g}^1 do MoS₂, onde o acoplamento entre camadas (*layers*) é dado por força de van der Waals (VdW).

A Fig. 7.9 mostra os picos do MoS₂ desde 1 camada até 6 camadas e o MoS₂ *bulk*, adaptado de Lee et al. [99]. É possível ver que quanto menor o número de camadas, menor é a separação entre os picos, devido ao fato de que um pico amolece enquanto o outro enrijece.

Se a diferença da posição dos picos é computada, como na Fig. 7.10, temos

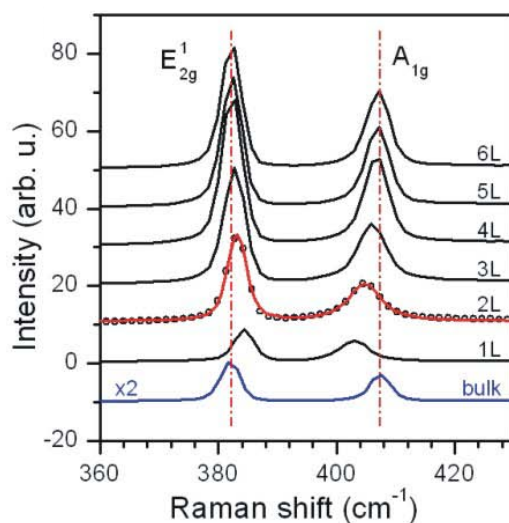


FIGURA 7.9: Espectro Raman de MoS₂ adaptado de Lee et al. [99]

um aumento gradual da diferença dos picos como explicado pela curva vermelha tracejada, que vai desde $\approx 19\text{ cm}^{-1}$ para monocamada até $\approx 25\text{ cm}^{-1}$ para *bulk*. Dessa maneira o Raman é uma ferramenta muito poderosa para identificação do número de camadas no MoS₂.

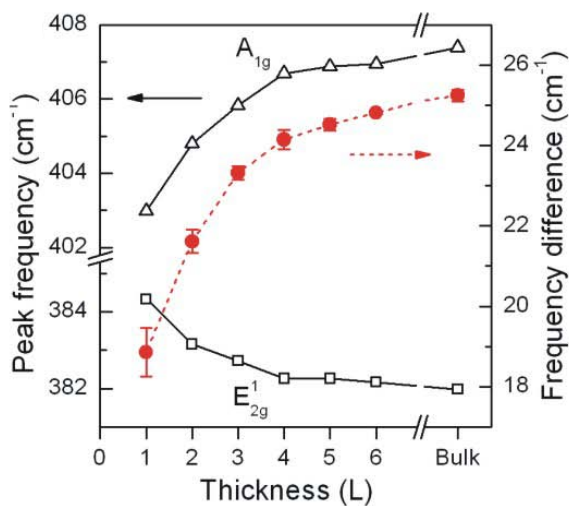


FIGURA 7.10: Posição dos picos Raman do MoS₂ (triângulos e quadrados) e diferença entre os picos Raman do MoS₂ (círculos vermelhos), adaptado de Lee et al. [99]

7.5 Espectroscopia de Fotoluminescência

Fotoluminescência (PL) é o fenômeno de emissão de luz pela matéria depois da absorção de fótons. PL pode ser dividida em duas categorias: fluorescência e fosforescência. Quando um fóton é absorvido por uma molécula, ela é excitada do estado fundamental para um estado eletrônico de energia maior. A emissão de um fóton de um estado singleto excitado S_n para o estado singleto fundamental S_0 é chamado de fluorescência, exemplificado no diagrama da Fig. 7.11. O tempo de vida do estado excitado na fluorescência está na ordem de 10^{-5} — 10^{-8} s. Dessa maneira, a fluorescência decai rapidamente quando a molécula deixa de ser excitada por um laser.

Em alguns casos é possível que um estado singleto excitado S_n seja convertido para um estado tripleto excitado T_n , como mostrado no diagrama da Fig. 7.11. Esse estado tripleto é proibido de decair para o estado singleto fundamental S_0 devido as regras de seleção [100]. Apesar de ser proibida a transição T_n para S_0 , existe uma probabilidade pequena de ocorrer espontaneamente. Esse tipo de transição é denominado fosforescência. O tempo de vida do estado da fosforescência é bem maior do que a fluorescência, sendo da ordem de 10^{-4} — 10^4 s. Dessa maneira a fosforescência, dependendo do material, é capaz de persistir por minutos ou horas depois de ser excitada por um laser.

Espectros de fotoluminescência são muito usados para se obter informações sobre níveis vibrônicos e eletrônicos de moléculas, possibilitando identificação do *gap* do material [101], ou até mesmo estudos de transferência de carga entre moléculas [102].

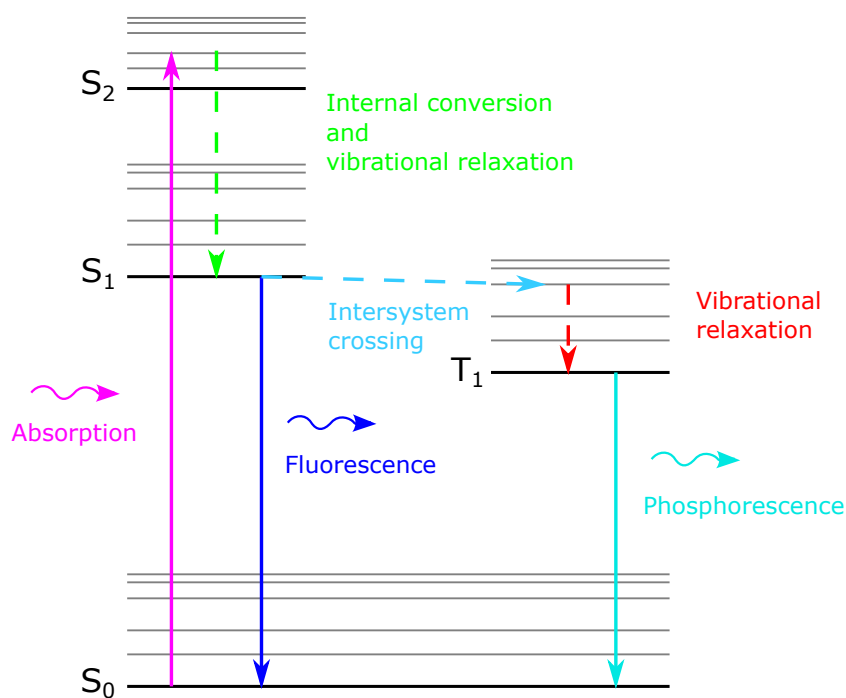


FIGURA 7.11: Diagrama do processo de fluorescência e fosforescência. Um fóton é absorvido, excitando a molécula do estado singlete S_0 para um estado singlete excitado S_n . Através de processos internos e relaxações vibracionais, a molécula decai não-radiativamente para um estado vibracional de mais baixa energia. Se a molécula decair novamente para o estado fundamental S_0 , temos o processo de fluorescência. Porém, pode ocorrer através de cruzamento inter-sistema que o estado singlete é convertido para um estado tripleto excitado, que por sua vez pode decair para o estado fundamental, e esse processo é denominado fosforescência. Setas tracejadas correspondem a processos não-radiativos.

Nem todo fóton absorvido é emitido radiativamente, pois existem diferentes processos não-radiativos que podem ocorrer. A conversão interna é o processo não-radiativo onde a molécula é excitada do estado fundamental para um estado excitado com energia vibracional maior, através de processos internos e relaxações vibracionais. A molécula pode voltar para um estado vibracional de mais baixa energia através da emissão de fônons. O processo de relaxação vibracional é bem rápido, com tempo de vida menor que 10^{-12} s. Por ser um processo tão eficiente, a molécula em um estado vibracional alto rapidamente retorna para o menor nível vibracional daquele estado excitado.

Uma outra forma de emissão não-radiativa é o cruzamento inter-sistema. Como mencionado, a transição tripleto para singleto é proibida devido às regras de seleção. Porém, caso ocorra um acoplamento spin-orbita considerável, após várias conversões internas, o sistema pode passar de um estado singleto excitado para um tripleto excitado, ocorrendo uma inversão de spin.

7.5.1 Éxciton em MoS_2

Em certos materiais pode ocorrer a formação de éxcitons: um estado ligado de um elétron e um buraco, onde ambos são atraídos devido às forças eletrostáticas, que se comportam de maneira similar a átomos de hidrogênio. Quando o éxciton é recombinado (par elétron-buraco), ocorrerá a emissão de um fóton, o que caracteriza o fenômeno de fotoluminescência.

Em materiais semicondutores, que geralmente possuem uma constante dielétrica alta, poderá ocorrer a formação de éxcitons de Wannier-Mott [103]. Esses éxcitons são caracterizados devido à blindagem eletrostática que ocorre,

o que tende a reduzir a interação eletrostática entre o elétron e buraco. Éxcitons de Wannier-Mott tem raios grande, maior do que o parâmetro de rede, e baixa massa efetiva (poucos meV), dessa maneira tendo uma energia de ligação bem menor que o átomo de hidrogênio.

Em materiais com baixa constante dielétrica ocorrerá a formação de éxcitons de Frenkel [104], um tipo de éxciton caracterizado por alta interação eletrostática entre o par elétron-buraco, o que resulta em um pequeno raio, geralmente da ordem do parâmetro de rede. Éxcitons de Frenkel tem uma energia de ligação bem maior do que os éxcitons de Wannier-Mott, e são tipicamente encontrados em semicondutores não-orgânicos, cristais de halogenetos alcalinos e cristais orgânicos.

Como mencionado, o MoS₂ apresenta dois éxcitons, A e B, sendo o éxciton B com energia na ordem de 150 meV menor que o A. A emissão do éxciton B ocorre tipicamente em 2 eV enquanto a emissão do éxciton A ocorre em 1.85 eV [54]. O *splitting* que ocorre no ponto K da estrutura de bandas do MoS₂ é mostrado no diagrama da Fig. 7.12, devido ao alto acoplamento spin-orbita presente [63].

7.5.2 Trions em MoS₂

Devido ao contato entre dois ou mais materiais, poderá ocorrer a transferência de carga entre esses materiais. No caso do MoS₂, quando em contato com o substrato, ele poderá adquirir uma carga, positiva ou negativa dependendo do tipo de substrato. Tipicamente, porém, observa-se que o MoS₂ fica carregado negativamente [105].

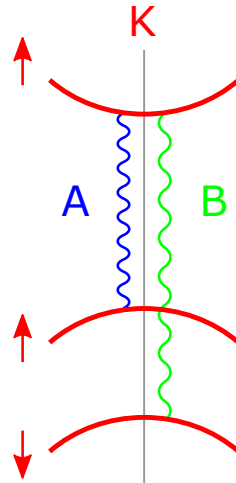


FIGURA 7.12: Diagramas da estrutura de bandas do MoS_2 próxima no ponto K. Onde ocorre um *splitting* na banda de valência devido ao acoplamento spin-orbita. As setas vermelhas indicam o spin de cada elétron.

Esses elétrons ou buracos adicionais irão formar um sistema de três corpos chamado de éxciton carregado ou trion [106, 107], como mostrado na Fig. 7.13. No MoS_2 a energia de ligação do trion é quase uma ordem da magnitude maior do que a encontrada em sistemas convencionais quase-2D [106].

Como agora temos dois elétrons acoplados ao mesmo buraco, no caso do trion negativo, ou dois buracos acoplados ao mesmo elétron, no caso do trion positivo, a energia do elétron/buraco adicional no trion (≈ 20 meV) é menor do que éxciton neutro [106].

7.5.3 Espectro de Fotoluminescência do MoS_2

Devido ao fato do MoS_2 apresentar dois éxcitons, A e B, espera-se observar dois picos em seu espectro de fotoluminescência. Porém, devido à interações com o substrato, o MoS_2 irá adquirir uma carga (ou a carga já é presente no próprio MoS_2), então além do pico correspondente ao éxciton neutro A, irá se observar o pico do trion A^- . A Fig. 7.14, adaptado de Li et al. [108], mostra

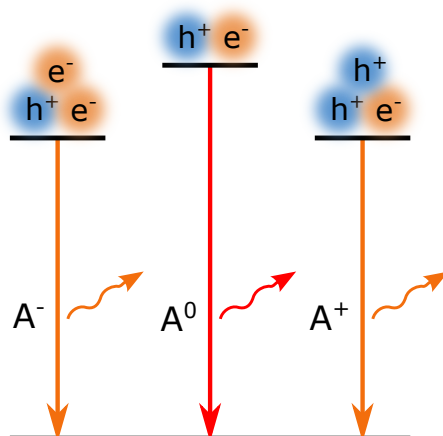


FIGURA 7.13: Diagrama demonstrando o exciton neutro A^0 e os trions positivo A^+ e negativo A^- . A energia dos trions é aproximadamente a mesma, porém menor do que a do exciton neutro.

os três picos do MoS_2 , onde 4 substratos são usados: SiO_2 , LaAlO_3 (LAO), SrTiO_3 (STO) e um filme gel (*Gel-film*). Dependendo do tipo de substrato e quantidade de carga transferida, a quantidade de trions para excitons será drasticamente afetada, sendo que o trion emite bem menos que o exciton neutro. Logo, para aplicações tecnológicas, é essencial ter um controle da quantidade de trions no sistema e/ou obter mecanismo de conversão de trion para exciton neutro.

Uma outra possível maneira de melhorar as propriedades óticas do MoS_2 é através de dopagem química. Dessa maneira é possível modificar a quantidade de portadores (dopagem) do MoS_2 , tendo dessa forma um jeito efetivo de converter trions para excitons neutros, o que, como visto, irá melhorar suas propriedades óticas. Na Fig. 7.15, adaptada de Mouri et al. [109], é mostrado a emissão do MoS_2 sem dopagem (*as-prepared*) e seu espectro de emissão quando dopado por F_4TCNQ ¹. Como pode ser visto, como no caso anterior, o aumento da emissão se dá justamente devido à supressão parcial

¹2,3,5,6-tetrafluoro-7,7,8,8-tetracyanoquinodimethan

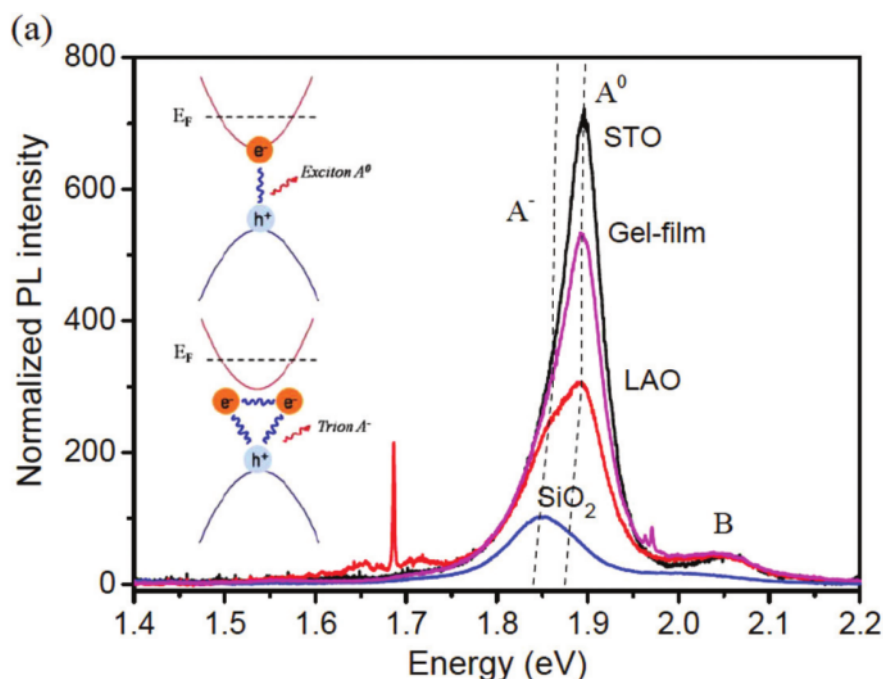


FIGURA 7.14: Espectro de fotoluminescência de MoS_2 monocamada em diferentes substratos: em SiO_2 , LaAlO_3 (LAO), SrTiO_3 (STO) e um filme gel (*Gel-film*), adaptado de Li et al. [108].

dos trions em favor dos éxcitons neutros. Efeitos similares podem ser observados quando se aplica uma tensão em um FET com MoS_2 [107]

Recentemente Oh et al. [110] observaram um aumento da PL do MoS_2 quando o MoS_2 é colocado em cima de óxido de grafeno (GO), mostrado na Fig. 7.16. Quando o MoS_2 se encontra em cima de GO, ocorre um aumento de 470% na emissão e ela é caracterizada por emissão de éxcitons neutros ao invés de trions. O aumento da PL é explicado devido à retirada dos elétrons do MoS_2 dopado pelo GO. Dessa maneira, como o MoS_2 é tipicamente dopado tipo n, quando em contato com GO ocorre uma dopagem tipo p que tende a anular os portadores de carga, suprimindo os picos relacionados ao trion.

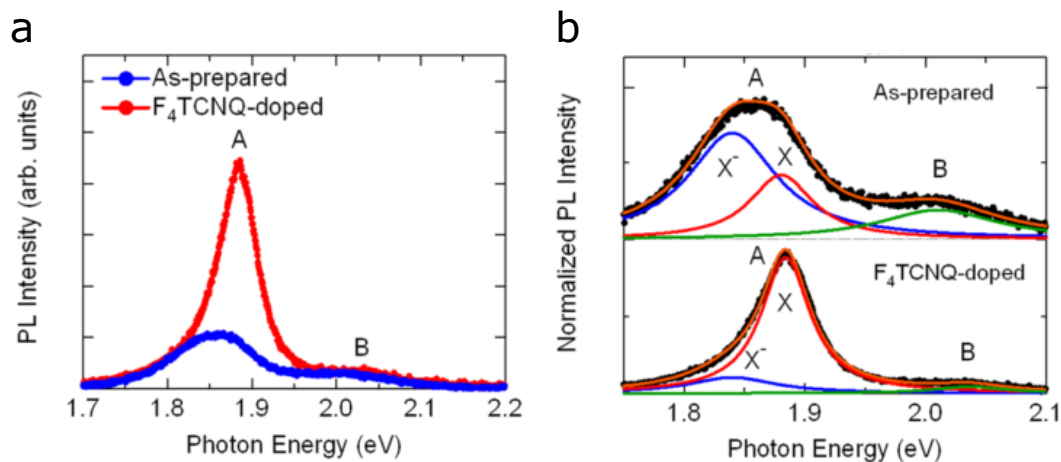


FIGURA 7.15: Espectro de fotoluminescência de MoS₂ monocamada com dopagem por F₄TCNQ e sem dopagem (*as-prepared*), adaptado de Mouri et al. [109]. Em (a) tem-se uma PL bem mais intensa quando se dopa o MoS₂ quando comparado com ele pristino. Em (b) é mostrado a relação das intensidades entre os éxcitons neutros X e trions X⁻.

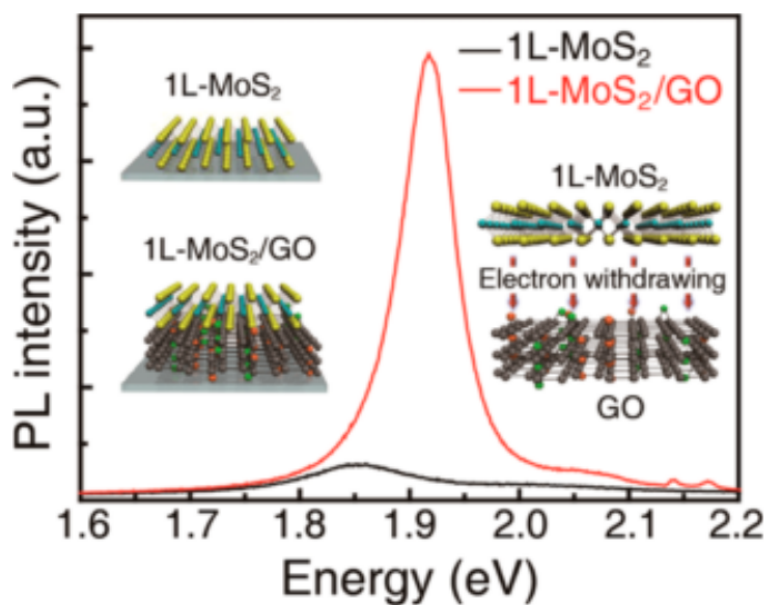


FIGURA 7.16: Espectro de fotoluminescência de MoS₂ monocamada com e sem óxido de grafeno (GO) por debaixo, adaptado de Oh et al. [110]

Capítulo 8

Preparação de Amostras e Métodos

Nesse capítulo serão apresentados como as amostras de MoS_2 e o substrato de ouro foram preparados e os métodos usados para caracterizá-las, que incluem AFM, LAO, micro-Raman e micro-fotoluminescência.

8.1 Substrato de Ouro

Para todos os experimentos foi usado um substrato de ouro, que consiste de 50 nm de ouro evaporado em cima de 300 nm de SiO_2 . A rugosidade do filme de ouro está na ordem de 2 nm.

Para o processo de LAO é necessário um substrato condutor, dessa maneira o ouro é um substrato ideal por ter alta condutividade térmica e elétrica e não sofrer oxidações, um ponto que será abordado posteriormente.

8.2 MoS_2

O MoS_2 foi depositado em cima do filme de ouro através de esfoliação micro-mecânica, onde na Fig. 8.1 é mostrado um desenho esquemático das amostras utilizadas. Dessa maneira, é possível obter MoS_2 relativamente grandes

(dezenas de micrômetros) e de alta qualidade.

O número de camadas foi determinado através de espectroscopia Raman, em conjunto com imagens de AFM. Dessa maneira, é possível dizer com bastante fidelidade o número de camadas presente em cada floco utilizado.

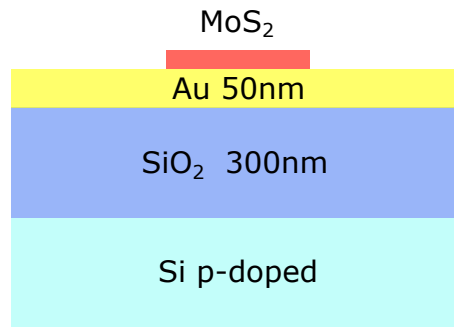


FIGURA 8.1: Desenho esquemático das amostras utilizadas. MoS₂ é esfoliado em cima de 50 nm de ouro que foi evaporado em cima de 300 nm de SiO₂.

8.3 AFM

Imagens topográficas de AFM foram feitas usando um microscópio Nanoscope 8 (Bruker) enquanto o processo de litografia por LAO foi feito usando um microscópio XE-70 (Park Systems). Foram utilizados dois AFMs, pois o XE-70 oferece um sistema de *closed-loop* que possibilita um controle bem preciso no posicionamento da ponta de AFM na amostra e possui alta reprodutibilidade. Como será mostrado posteriormente, o controle de onde é feita a oxidação por LAO é extremamente importante se quisermos controlar o tamanho e forma do óxido criado. O Nanoscope 8 foi utilizado por oferecer imagens de AFM com mais alta qualidade.

8.4 LAO

Para o processo de oxidação foi utilizado uma sonda com cobertura de ouro, HQ:CSC38-CrAu (MikroMasch), dessa maneira aumentando a corrente passada pela ponta de AFM.

As tensões usadas no LAO foram de -7 V até -10 V, aplicadas por um intervalo de tempo entre 1 e 2 segundos. Tensões menores que essas podem ser usadas, porém é necessário um tempo maior para criar um óxido do mesmo tamanho. A umidade ambiente foi mantida em 60% durante todo o processo [98].

8.5 Micro-fotoluminescência e micro-Raman

As medidas de micro-PL e micro-Raman foram feitas em um Witec alpha300 A, usando um laser de 457 nm (2.71 eV) com uma objetiva de 100x cujo tamanho do *spot* do laser é de aproximadamente 1 μm . Para os espectros de PL foi utilizada uma grade de difração de 600 linhas/mm, enquanto que para os espectros de Raman foi utilizada uma de 2400 linhas/mm.

O microscópio Witec alpha300 A possui um piezoelétrico para a movimentação no plano da amostra, o que possibilita um controle bastante preciso do posicionamento do *spot* do laser na amostra. Dessa maneira, a resolução das imagens de micro-PL e micro-Raman são limitadas apenas pelo tamanho do *spot*.

Capítulo 9

Nanofabricação de monocamadas de MoS₂

Utilizando LAO é possível oxidar o MoS₂, como já foi demonstrado na literatura [93, 94], e o óxido criado é predominantemente MoO₃ [111, 112]. Na Fig. 9.1 é mostrado o espectro de fotoelétrons excitados por raios X (XPS) de uma amostra de MoS₂ oxidada por LAO em uma área de alguns milímetros, onde é possível observar a presença de tanto MoO₃ quanto MoO₂. Em (a,b) é mostrado o pico S(2p), enquanto em (c,d) o pico Mo(3d). Em vermelho temos a região antes de ser oxidada, e em preto a região oxidada. A posição desses picos está de bom acordo com dados na literatura [113]. Uma análise das áreas espectrais do pico Mo3d_{3/2} demonstra 100% de Mo⁺⁴ antes e 48% de Mo⁺⁴ e 52% de Mo⁺⁶ depois da oxidação, respectivamente. Em outras palavras, ambos MoO₂ e MoO₃ são criados durante o processo de LAO e, ao menos metade do óxido constitui MoO₃. A grande diferença entre esses dois tipos de óxido é que o MoO₃ é solúvel em água, enquanto o MoO₂ não, um fato importante que será utilizado para a caracterização desse óxido posteriormente.

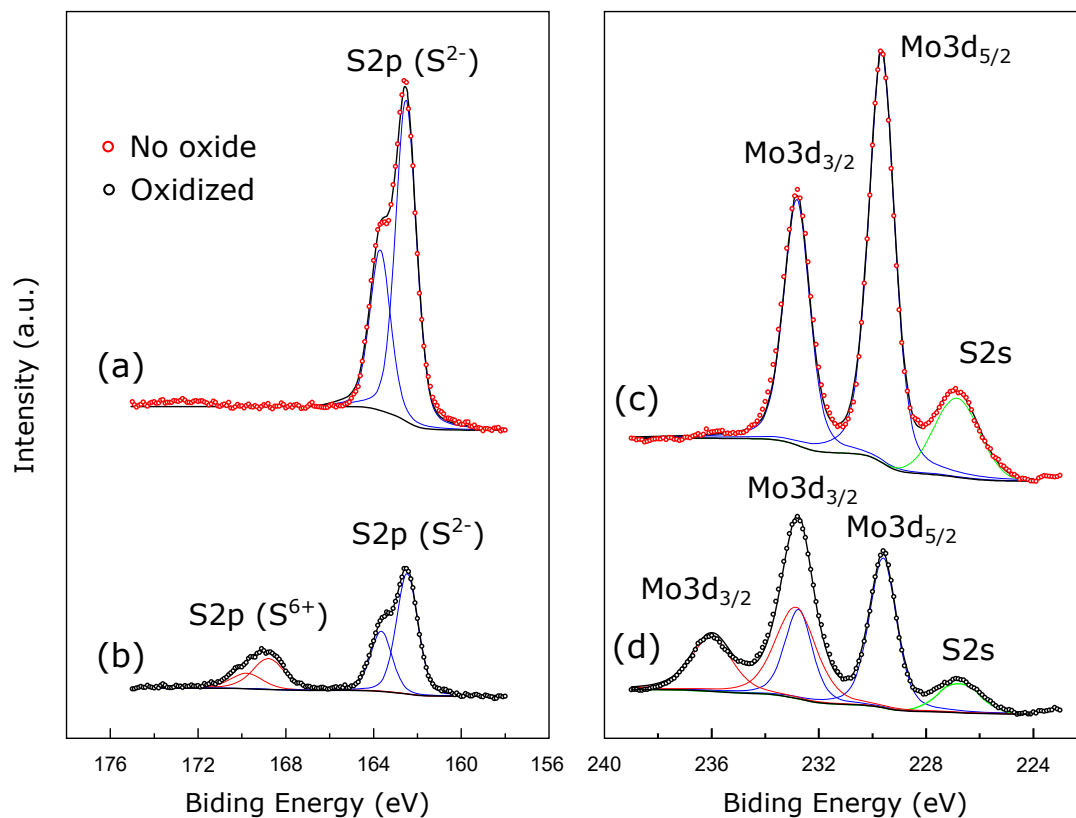


FIGURA 9.1: Espectro de macro-XPS um floco MoS₂ antes de ser oxidado (vermelho) e depois de uma área grande ser oxidada (preto). O painel a esquerda (a,b) mostra o espectro S(2p), enquanto o da direita (c,d) mostra o espectro Mo(3d). Cortesia da Prof. Ana Paula Barboza (UFOP) e do Prof. Roberto Paniago (UFMG).

Apesar do processo de oxidação por LAO ter sido estudado nos últimos anos, nenhum estudo ótico da heteroestruturas MoS₂-MoO₃ foi feito até então. Na Fig. 9.2 temos um floco de MoS₂ que possui desde monocamadas até flocos de 5 camadas de espessura. As Figs. 9.2(a-d) mostram o floco antes de modificações por LAO e Fig. 9.2(e-h) mostram o floco após a modificação por LAO, onde foi feita uma oxidação no floco de 5 camadas, mostrado como linha tracejada vermelha. O óxido criado por LAO na região de 5 camadas foi posteriormente retirado utilizando água deionizada (DIW) [111], o que é um indicativo forte de que o óxido criado é predominantemente composto de MoO₃. As Figs. 9.2(i-l) mostram o floco de MoS₂ após a remoção do óxido.

Examinando as imagens óticas na Figs. 9.2(a,e,i), a região oxidada pode ser claramente vista na Fig. 9.2(e), uma vez que o óxido é transparente [114]. Por esse mesmo motivo, não é possível detectar a remoção do óxido após o banho em DIW, como mostrado em Fig. 9.2(i). Porém, o contraste ótico da região oxidada é bem similar ao da região da monocamada sem defeitos (comumente chamada de “pristina”). A região oxidada também é claramente vista na imagem de AFM da Fig. 9.2(f). Como o óxido cresce fora do plano, sua altura é maior do que a do floco original, tendo uma altura de 5.4 nm, como mostrado pelo perfil de altura preto. É possível observar um ponto central em Fig. 9.2(f), que é a região onde a ponta de AFM estava em contato durante o processo de oxidação anódica. Essa região pode ser mais facilmente vista na imagem de PL da Fig. 9.2(g). Devido ao começo abrupto da oxidação anódica, nessa região central específica, ocorreu uma oxidação completa do floco de MoS₂. Esse perfil toroidal é observado nas imagens de AFM, PL e Raman Figs. 9.2(f,g,h), respectivamente, com o óxido, assim como

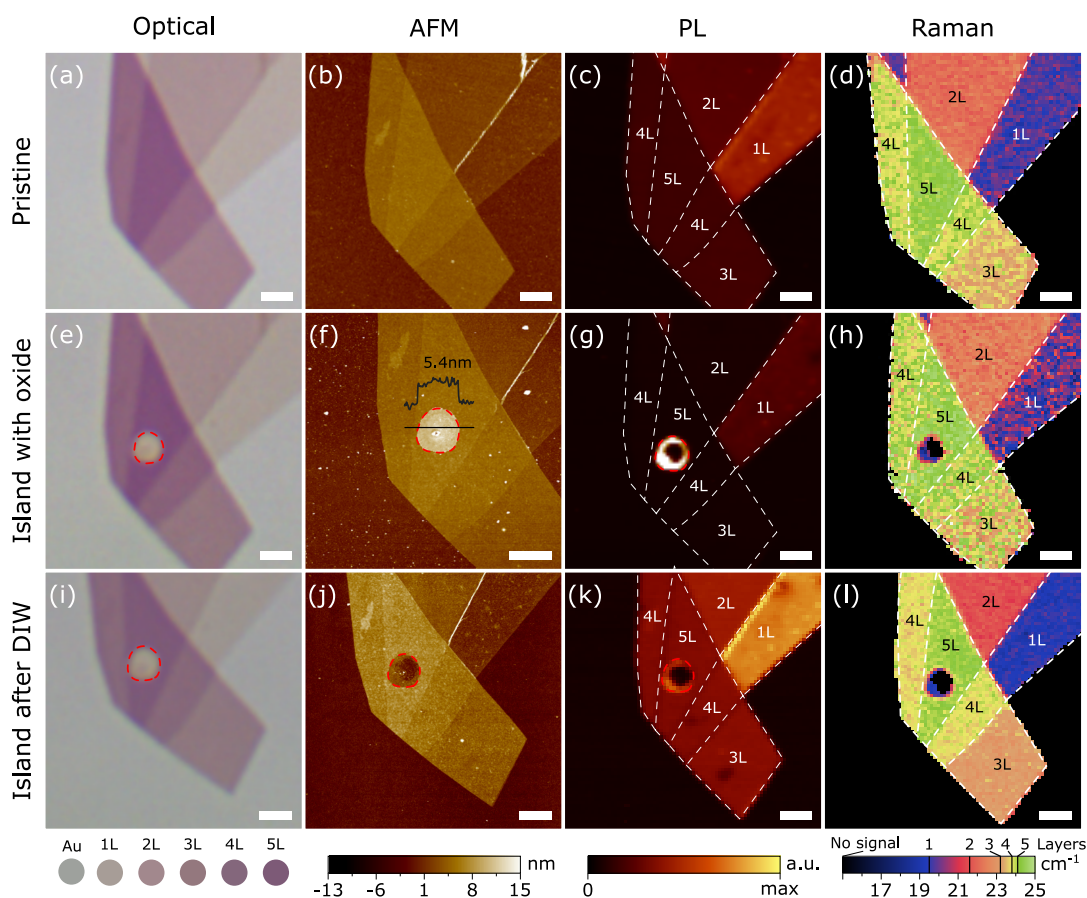


FIGURA 9.2: Floco de MoS₂ usado para o processo de oxidação anódica. Os painéis da primeira linha, (a-d), mostram o floco sem modificações; os painéis da segunda linha, (e-h), mostram o floco após o processo de LAO; os painéis da terceira linha, (i-l), mostram o floco após a remoção do óxido por água deionizada (DIW). Os painéis da primeira coluna, (a,e,i), mostram imagens óticas do floco; os painéis da segunda coluna, (b,f,j), mostram imagens de AFM do floco; os painéis da terceira coluna, (c,g,k), mostram imagens de PL do floco; os painéis da quarta coluna, (d,h,l), mostram imagens da diferença de frequência dos picos Raman A_{1g} e E_{2g}^1 do MoS₂. O perfil de topografia da oxidação é mostrada no painel (g), onde a altura do óxido é de 5.4 nm. Linhas brancas tracejadas indicam as fronteiras do floco de MoS₂, enquanto linhas vermelhas tracejadas indicam a fronteira da região oxidada. A barra de escala é de 2 μm para todos painéis. Os mapas de PL não estão na mesma escala de cor.

nas imagens sem o óxido, Fig. 9.2(j,k,l). O que mostra que essa região central foi totalmente oxidada e lavada no processo de remoção do óxido por DIW.

As Figs. 9.2(c,g,k) mostram o espectro de PL do floco de MoS₂. A Fig. 9.2(c) mostra a PL antes do processo de oxidação. A monocamada apresenta maior intensidade de luminescência quando comparada com outros flocos de espessuras maiores, em concordância com o fato de que o MoS₂ em monocamada é um material de *gap* direto, enquanto em poucas camadas apresenta *gap* indireto [54, 63]. O resultado mais interessante pode ser visto na Fig. 9.2(g), onde a região oxidada no floco de 5 camadas apresenta luminescência muito maior do que o floco monocamada. É importante notar que o perfil espacial (toroide) da PL é fielmente correspondido com o perfil de AFM da Fig. 9.2(j). Depois da remoção do óxido por DIW, mostrado na Fig. 9.2(k), a região toroidal não apresenta PL tão intensa quanto anteriormente, tendo agora intensidades comparáveis com a PL da monocamada adjacente. Todas as comparações de intensidade de PL são feitas em relação a monocamada de MoS₂ pristina. Como essa região não sofre nenhuma modificação, ela serve de referência para comparação quantitativa entre as intensidades.

Como mencionado anteriormente, o espectro Raman é uma ferramenta muito poderosa para identificação do número de camadas em materiais bidimensionais. Para confirmar o número de camadas, foi usado a diferença de frequência entre os picos A_{1g} e E_{2g}¹ [99, 115]. Os resultados são mostrados nas Figs. 9.2(d,h,l). Novamente um resultado surpreendente é mostrado na Fig. 9.2(h), que mostra que a região oxidada apresenta a mesma assinatura Raman de uma monocamada pristina. Ou seja, enterrada, debaixo do óxido, temos uma monocamada de MoS₂. Após a remoção do óxido, Fig. 9.2(l), essa

assinatura de monocamada ainda continua. Esses resultados corroboram o fato que na região de 5 camadas foram oxidadas todas as camadas, exceto a última camada, resultando em uma monocamada enterrada sob o óxido. Este resultado mostra que no processo de LAO é possível oxidar um floco de poucas camadas até restar apenas uma monocamada. É importante notar que na região central todo o floco foi oxidado e isso é devido ao começo abrupto do processo de oxidação, um ponto que será abordado posteriormente.

As Figs. 9.3(a-c) mostram o espectro de PL da monocamada pristina e da região oxidada da Fig. 9.2. A monocamada pristina apresenta 3 éxcitons [107]: o éxciton neutro A^0 em 1.894 eV, o éxciton carregado (trion) A^* em 1.862 eV, e o éxciton B em 2.033 eV. Por outro lado, a região oxidada apresenta apenas dois éxcitons, o éxciton neutro A^0 (1.870 eV) e o trion A^* (1.834 eV), com o éxciton B ausente. A região oxidada apresenta ambos picos A^0 e A^* mais intensos que na monocamada pristina, porém a relação entre éxciton neutro e trion para a região oxidada é bem maior, onde o trion é fortemente suprimido na região oxidada. Após a remoção do óxido por DIW, existe uma supressão do trion e apenas o éxciton neutro é observado.

Nós quantificamos o aumento na intensidade da luminescência observados nas Figs. 9.2(g) e 9.3(b) ajustando uma curva de Voigt e com isso encontramos na região oxidada que o éxciton neutro A^0 emite 24 vezes mais intensamente do que o mesmo éxciton neutro na monocamada pristina. Após a remoção do óxido por DIW, a intensidade da PL é reduzida para níveis comparáveis a monocamada pristina. Isso é uma evidência forte de que a heteroestruturas MoS₂-MoO₃ tem um papel muito importante no aumento da PL. Ligações de Mo-O no MoS₂ podem levar a saturações de armadilhas

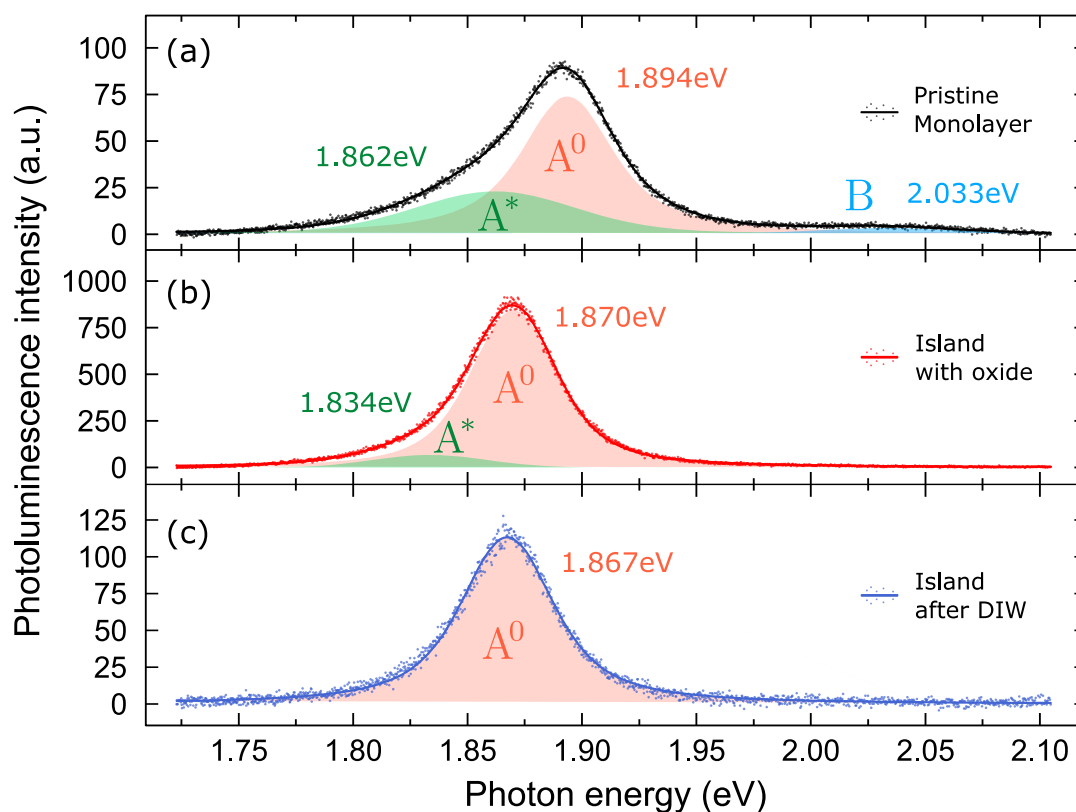


FIGURA 9.3: Espectro de luminescência do floco de MoS₂ da Fig. 9.2. (a) mostra a PL da monocamada pristina, (b) mostra a PL da região oxidada logo após a oxidação por LAO, e (c) mostra a região oxidada após a remoção do óxido por DIW. As regiões sombreadas indicam os picos dos éxcitons correspondentes, com verde correspondendo ao trion A*, vermelho ao éxciton neutro A⁰ e azul ao éxciton B. O centro de energia dos éxcitons é indicado. A potência usada para as medidas de PL foi de 10 μ W. O espectro após a remoção do óxido por DIW foi normalizado de tal maneira a obter a mesma intensidade de PL da monocamada na situação com e sem óxido.

e aumentar a taxa de recombinação radiativa [116]. É importante notar que o valor real do aumento na PL pode ser consideravelmente maior do que o observado, uma vez que o *spot* do laser é maior do que o tamanho da região oxidada. O desvio para o vermelho observado no éxciton neutro A⁰ é também observado após a oxidação, assim como a supressão do éxciton B. Esse ponto será discutido abaixo.

A Fig. 9.4 mostra o espectro Raman de diferentes regiões da Fig. 9.2, desde 1 camada até 5 camadas e também a região oxidada, antes e depois da oxidação. Quando a espessura do floco aumenta, a diferença de frequência entre os picos A_{1g} e E_{2g}¹ aumenta: indo de $\approx 19.5 \text{ cm}^{-1}$ para a monocamada até $\approx 24.1 \text{ cm}^{-1}$ para a região de 5 camadas do MoS₂. A região oxidada (curva vermelha) possui uma diferença de frequência Raman de $\approx 20.6 \text{ cm}^{-1}$ após a oxidação, enquanto que depois da remoção do óxido por DIW a frequência reduz para $\approx 20.5 \text{ cm}^{-1}$. Ambas essas frequências são ligeiramente maiores do que as esperadas para monocamadas, porém são bem menores do que a esperada para bicamada: $\approx 21.5 \text{ cm}^{-1}$ até $\approx 22 \text{ cm}^{-1}$. Esse valor ligeiramente mais alto para o Raman na região oxidada pode ser devido à presença do óxido e/ou devido à água residual devido à remoção por DIW.

Foi observado que para processo da criação de monocamadas em MoS₂ de poucas camadas não é necessário um controle minucioso dos parâmetros de oxidação. O processo de oxidação com uma gama grande de parâmetros (umidade, tensão aplicada e tempo de oxidação) irão resultar em ilhas de MoS₂ monocamada enterradas por sob o seu óxido, mesmo se flocos volumétricos (cumumente chamados de *bulk*) forem usados. Porém, isso não quer dizer que sempre serão formadas monocamadas independentemente

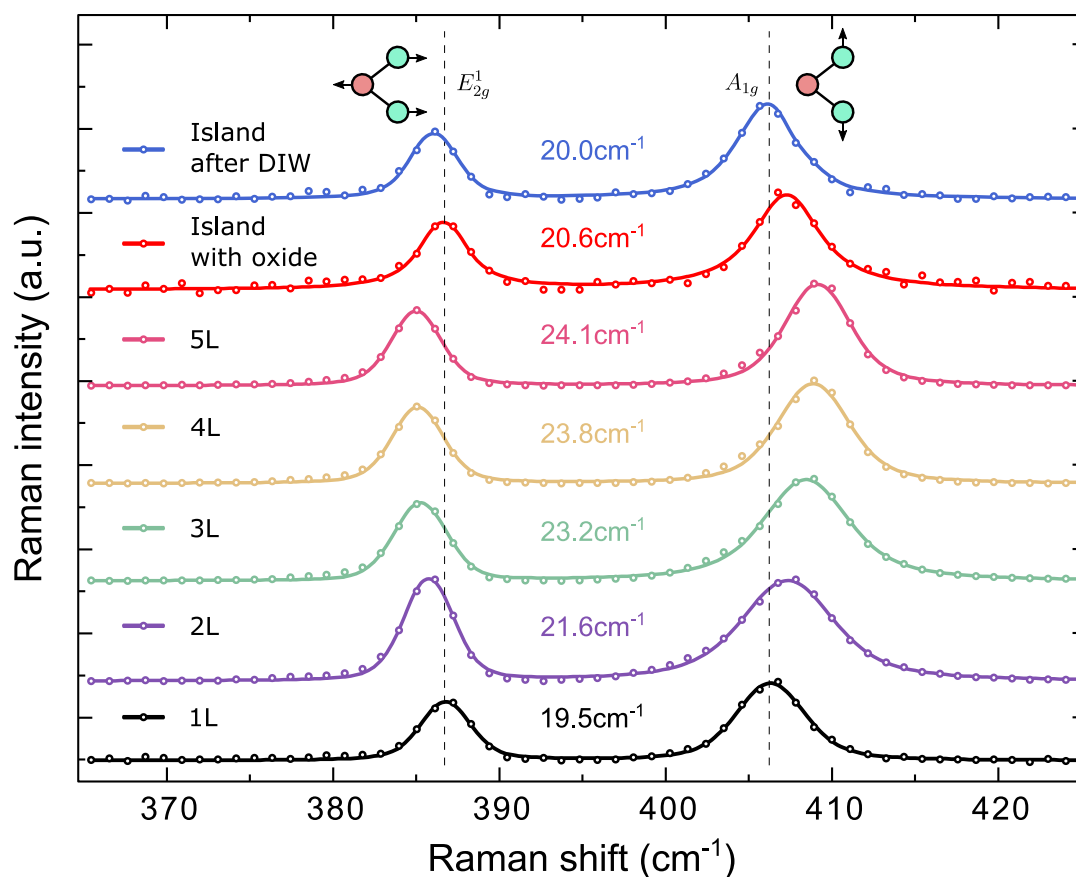


FIGURA 9.4: Espectro de Raman do floco de MoS₂ da Fig. 9.2. Flocos de 1 a 5 camadas são mostrados assim como a região oxidada antes e depois da remoção do óxido por DIW. A potência usada para as medidas de Raman foi de 10 μW.

das condições. Se o floco for muito espesso e forem usados tempos e tensões baixas, será impossível oxidar muito profundamente o floco e apenas as camadas superfícies do floco serão oxidadas, assim como esperado. A não necessidade de um controle preciso do processo de oxidação vem do fato de que é mais difícil oxidar a última camada de um floco de MoS₂, porém não impossível, como demonstrado anteriormente na região toroidal da Fig. 9.2. Foi realizado um grande número de oxidações em flocos de espessuras variadas, indo desde 4 até flocos *bulk*, e sempre foi observado a formação de ilhas monocamadas enterradas em seu óxido. Para flocos mais espessos, são necessárias tensões mais altas, porém não é necessário um controle muito grande nos parâmetros. Se o floco for muito fino (menor que três camadas), vemos que é mais difícil a formação de monocamadas, pois nesse caso é necessário um controle fino dos parâmetros, caso contrário todo o floco é oxidado. Existe um processo de autolimitação que impede, em certos casos, a oxidação da última camada. Esse processo autolimite ocorre devido à presença do ouro como substrato. Devido a sua alta condutividade térmica, o ouro tem um papel muito importante nesse processo autolimite da oxidação da monocamada, funcionando como um dissipador de calor. Castellanos-Gomez et al. [117] observaram efeito similar, onde o substrato funcionava como um dissipador de calor no processo de oxidar o floco de MoS₂ por meio de um laser com potência alta, onde foi observado uma dificuldade maior na oxidação da primeira camada. Porém esse processo é menos controlado espacialmente, resultando em um MoS₂ monocamada não uniforme e sem precisão nanométrica no tamanho da monocamada criada, e não foi observado um aumento na PL (a PL resultante do MoS₂ criado é comparável

a monocamada pristina).

A alta condutividade elétrica do ouro também tem um papel importante quando comparado com substratos dopados usados no processo de LAO, uma vez que com ouro é possível obter correntes elétricas bem maiores. Como dito, apesar do processo autolímite causado pelo ouro como substrato, isso de maneira alguma impede a oxidação completa do floco, o processo autolímite apenas relaxa as condições de não precisar de um ajuste fino na oxidação.

Wu et al. [118] e Neupane et al. [119] também observaram a criação de monocamadas de MoS₂ a partir de flocos de poucas camadas através de tratamento térmico. Porém, foi obtido apenas nano-folhas e poços de poucos nanômetros de tamanho, respectivamente, sem um aumento na PL, e comparável com a emissão do floco multicamada inicial.

Dessa maneira a fabricação de monocamadas de MoS₂, por oxidação, seja por laser ou por um tratamento térmico, é conhecida, porém não se tem um controle muito grande no tamanho e geometria da monocamada fabricada. Assim como o aumento na luminescência não havia sido observado na literatura.

A Fig. 9.5 mostra o espectro de PL para uma outra amostra de MoS₂ *bulk*, onde foi oxidada a região *bulk* do MoS₂ (15 nm de espessura). A altura do óxido criado é cerca de 250 nm, e esse valor alto é devido ao fato de que foi oxidada uma grande região (vários micrômetros), possibilitando um crescimento alto do óxido, uma vez que a altura limite do óxido é dada apenas pela quantidade de material disponível (nesse caso MoS₂). A Fig. 9.5(a) mostra o espectro de uma monocamada pristina adjacente a região oxidada, enquanto

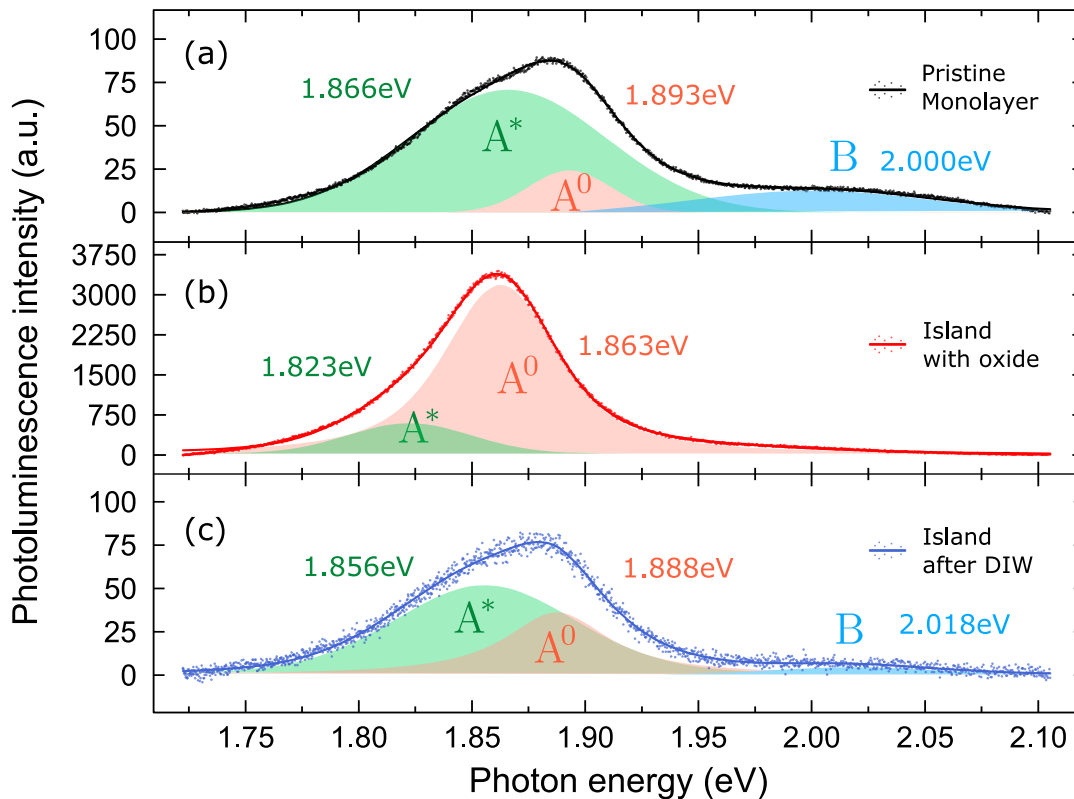


FIGURA 9.5: Espectro de luminescência do floco de MoS₂ *bulk* oxidado. (a) mostra a PL da monocamada pristina, (b) mostra a PL da região oxidada logo após a oxidação por LAO, e (c) mostra a região oxidada após a remoção do óxido por DIW. As regiões sombreadas indicam os picos dos éxcitons correspondentes, com verde correspondendo ao trion A*, vermelho ao éxciton neutro A⁰ e azul ao éxciton B. O centro de energia dos éxcitons é indicado. A potência usada para as medidas de PL foi de 170 μ W. O espectro após a remoção do óxido por DIW foi normalizado de tal maneira a obter a mesma intensidade de PL da monocamada na situação com e sem óxido.

as Figs. 9.5(b) e (c) mostram a região *bulk* oxidada antes e depois da remoção do óxido por DIW, respectivamente. Novamente, um aumento na luminescência é observado (mais de 250 vezes) no pico do éxciton neutro da região debaixo da oxidação. Após a remoção do óxido, Fig. 9.5(c), vemos que a emissão fica bastante similar a monocamada pristina, Fig. 9.5(a). Apesar do aumento não ser mais observado, vemos que a monocamada ainda é retida. O que demonstra mais uma vez a importância do papel do óxido no aumento da PL.

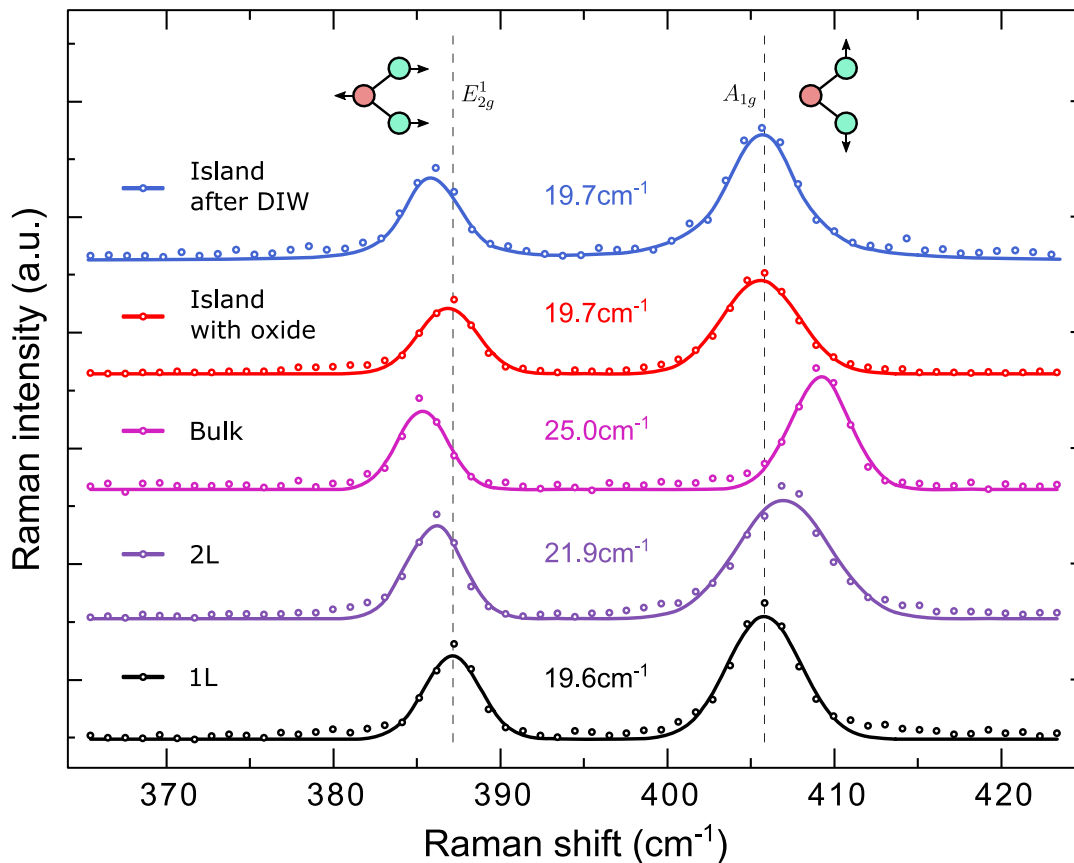


FIGURA 9.6: Espectro de Raman do floco de MoS₂ *bulk* oxidado. Flocos de monocamada, bicamada e *bulk* são mostrados assim como a região oxidada antes e depois da remoção do óxido por DIW. A potência usada para as medidas de Raman foi de 170 μ W.

A assinatura Raman dos flocos mostrados na Fig. 9.5 são mostradas na Fig. 9.6, onde podemos observar que a região oxidada (curva vermelha) possui sinal de monocamada, mesmo após a remoção do óxido. O que mostra novamente que com LAO é possível criar monocamadas de MoS₂ enterradas por sob MoO₃.

Como visto na Fig. 9.3, ocorre um desvio para o vermelho no éxciton A⁰ na região da oxidação, assim como a supressão do éxciton B. Esse comportamento ocorre para todas as amostras oxidadas. Para algumas amostras, após a remoção do óxido, o desvio para o vermelho desaparece e o pico do éxciton B é recuperado, Fig. 9.5. Para outras amostras, no entanto, como a da

Fig. 9.3, o desvio para o vermelho continua significativo mesmo após a remoção do óxido e o éxciton B não é recuperado. A presença do óxido em cima da monocamada fabricada é a causa indubitável do desvio para o vermelho observado, assim como a supressão do éxciton B [116, 118], uma vez que ambos são sinais típicos de alteração da carga local no MoS_2 . Além da passivação por oxigênio na monocamada, dopagem pode estar ocorrendo devido ao óxido, o que pode gerar éxcitons ligados com baixa energia de recombinação. É possível que exista ainda um pouco de óxido ou defeitos relacionados a óxido na amostra da Fig. 9.3, o que explicaria o desvio para o vermelho e a supressão do éxciton B, uma vez que apenas o MoO_3 é solúvel em água e no processo de LAO é possível criar MoO_2 também. É também possível que a presença da camada de óxido esteja afetando a densidade de estados (DOS) eletrônica da monocamada de MoS_2 . Trabalhos adicionais teóricos são necessários para elucidar melhor esses efeitos.

9.1 Conclusão

Em resumo, nesse trabalho foi realizada a nano-fabricação de ilhas de monocamadas de MoS₂ utilizando oxidação anódica local (LAO). Esse novo método de nano-fabricação é robusto o suficiente para gerar monocamadas sem a necessidade de um ajuste-fino nos parâmetros da oxidação. Foi observada a criação de monocamadas desde flocos de poucas camadas até flocos *bulk*.

Apesar de LAO ser um processo bem conhecido, capaz de oxidar diferentes tipos de materiais, inclusive materiais bidimensionais, nesse trabalho, nós mostramos que aplicando LAO ao MoS₂ resulta na criação de monocamadas enterradas sob o óxido. O tamanho, posição e formato dessas monocamadas podem ser controladas pelo método do LAO, e em princípio, podem ser tão pequenas quanto a resolução do LAO [95].

Além de possibilitar a criação de monocamadas em posições específicas com geometrias intrincadas, então substituindo a necessidade processos litográficos caros, a monocamada criada supera as monocamadas pristinas, sendo muito mais eficientes em emissão, com um ganho de até duas ordens de magnitude na intensidade da PL. Isso possibilita uma melhor performance em fotodetectores 2D e outros nano-dispositivos opto-eletrônicos. Outro desenvolvimento muito interessante é que o processo de nano-fabricação da monocamada enterrada sob o óxido pode em princípio ser ajustada de tal maneira a formar ilhas muito pequenas, o que podem abrir a possibilidade de confinar éxcitons em um volume muito pequeno, criando-se pontos quânticos (QD), que podem ser combinados com o aumento de PL presente na heteroestruturas possibilitando a criação de emissores de fótons únicos.

Conclusão Geral e Perspectivas

Nessa tese, foram estudadas na parte I as forças óticas em sistemas de guias de onda e, pela primeira vez, uma análise correta da força ótica de batimento foi feita. Foi observado que se deve tomar muito cuidado na análise e aplicação do teorema da divergência, pois isso poderá levar ao cálculo errôneo das forças. Para o emprego correto do teorema da divergência, foi derivada uma fórmula para a densidade de força linear, que é a quantidade necessária para o cálculo da deformação nesse tipo de estrutura.

Foi visto que quando se trata de forças dos modos do sistema, existe apenas uma força ótica resultante, onde todos os modelos de força concebíveis dão o mesmo resultado. Dessa maneira, guias de onda consistem em um sistema muito interessante, pois não é usual haver concordância entre modelos de força diferentes.

Porém, se a excitação nos guias de onda não consistir de um modo do sistema, mas sim de uma superposição, foi visto que modelos diferentes dão resultados diferentes, muitas vezes em direção e magnitude. Logo, forças óticas não consistem de um sistema tão trivial onde podemos usar qualquer força ótica se superposições forem usadas.

Esse modelo foi então estendido para guias de onda curvos em direções arbitrárias. Foi visto que nesse caso, mesmo se modos do sistema forem usados, cada modelo de força diferente irá dar resultados distintos. A diferença

crucial nesses casos, da distinção ou não dos modelos para as forças óticas, se dá ao fato da troca de momento entre luz e matéria. Vimos que quando há troca de momento eletromagnético entre luz e matéria, os modelos de força irão diferir. No caso da superposição de modos, isso irá acarretar na força de batimento. Para o caso de guia de onda curvos, devido à curvatura do guia de onda, o momento da luz irá sempre continuamente mudar, dessa maneira resultado em uma força devido à essa mudança. Dessa maneira, nesses casos, cada modelo de força irá resultar em uma força diferente.

Na parte II dessa tese, foi estudada a criação de monocamadas de MoS₂ utilizando a oxidação anódica por AFM para se nano-fabricar monocamadas do tamanho, posição e geometrias requeridos. Foi observado que existe um processo autolimitante na oxidação por LAO devido ao substrato de ouro empregado nas amostras, o que dificulta a oxidação da última camada de um floco de poucas ou muitas camadas. Assim, é possível reduzir um floco espesso até chegar em uma única camada sem a necessidade de um ajuste fino dos parâmetros de oxidação. Essa técnica é extremamente interessante por possibilitar a fabricação de nano-dispositivos sem a necessidade de processos de litografia caros e sem envolver *etching* ou outros processos.

Essa técnica não apenas possibilita a criação de monocamadas a partir de flocos espessos, mas as monocamadas criadas possuem melhores propriedades óticas do que monocamadas pristinas. Medidas de fotoluminescência (PL) mostram que existe um aumento de até duas ordens de magnitude na intensidade da PL das monocamadas criadas. Esse aumento é apenas presente caso a monocamada esteja enterrada sob óxido de molibdênio. Caso o óxido seja retirado utilizando água deionizada, foi visto que o aumento deixa

de existir.

Perspectivas

Os projetos descritos a seguir constituem algumas vertentes que complementam os estudos feitos nessa tese. Alguns desses projetos ainda estão sendo estudados, mas por questões de tempo ainda não foram concluídos, ou então irão ainda ser estudados posteriormente. A seguir apresentamos alguns desses projetos.

Anéis Ressonadores

O estudo de forças óticas em guia de onda curvos tem aplicação direta em anéis ressonadores (RR) suspensos. RR são interessantes devido ao fenômeno de *slow-light*, onde a velocidade de grupo da luz pode ser diminuída drasticamente, aumentando assim a interação com a matéria, resultando em campos e forças altíssimos. Como RR trocam energia com guias de onda acoplados, surgirá o aparecimento da força de batimento, dessa maneira, para uma análise completa e correta, esses termos devem ser levados em consideração.

Múltiplos Guias de Onda

Até então foi estudado apenas o acoplamento entre dois guias de onda. A grande vantagem nesse tipo de acoplamento é devido ao fato de que mesmo se os guias de onda forem deformados, não é possível haver troca de potência entre os modos, dessa maneira a análise da propagação é mais simples e

depende apenas das condições iniciais. Caso mais de dois guias de onda sejam utilizados, poderá haver uma troca de potência entre os modos, o que torna a dinâmica de propagação mais complexa, possibilitando a formação de *solitons*.

LAO em TMDs

A extensão do processo de LAO para outros TMDs como WS_2 ou MoSe_2 é um passo óbvio e interessante a ser feito. Assim como o aprimoramento das oxidações por LAO, focando na nano-fabricação em ilhas menores (poucos nanômetros). Dessa maneira possibilitando o estudo de pontos quânticos (QD). Novas técnicas de caracterização, como PL em baixa temperatura poderão ser usadas para caracterizar melhor os éxcitons e trions nesse sistema. Medidas de AFM condutivo (C-AFM) podem ser feitas para determinar propriedades elétricas da amostras, como condutividade e informação sobre o *band-gap*.

Apêndice A

Ortogonalidade de *eigenmodes*

As equações de Maxwell [11] na ausência de fontes podem ser escritas como:

$$\nabla \times \mathcal{E} = -\partial_t \mathcal{B}, \quad (\text{A.1})$$

$$\nabla \times \mathcal{H} = +\partial_t \mathcal{D}, \quad (\text{A.2})$$

$$\nabla \cdot \mathcal{D} = 0, \quad (\text{A.3})$$

$$\nabla \cdot \mathcal{B} = 0, \quad (\text{A.4})$$

onde \mathcal{E} , \mathcal{H} , \mathcal{D} e \mathcal{B} são os campos dependentes do tempo. Se a dependência temporal for na forma $\exp(i\omega t)$, temos para as duas primeiras equações:

$$\nabla \times \mathbf{E} = -i\omega \mathbf{B}, \quad (\text{A.5})$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = +i\omega \mathbf{D}, \quad (\text{A.6})$$

onde \mathbf{E} , \mathbf{H} , \mathbf{D} e \mathbf{B} são os campos independentes do tempo. Para materiais dielétricos não-magnéticos temos $\mathbf{D} = \varepsilon_0 \varepsilon \mathbf{E}$ e $\mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{H}$.

Calculando o divergente do produto cruzado na Eq. (4.6) temos:

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \left[\mathbf{E}_\mu \times \mathbf{H}_\nu^* + \mathbf{E}_\nu^* \times \mathbf{H}_\mu \right] &= \left[\nabla \times \mathbf{E}_\mu \cdot \mathbf{H}_\nu^* - \mathbf{E}_\mu \cdot \nabla \times \mathbf{H}_\nu^* \right] \\ &+ \left(\nabla \times \mathbf{E}_\mu^* \cdot \mathbf{H}_\nu - \mathbf{E}_\mu^* \cdot \nabla \times \mathbf{H}_\nu \right). \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

Usando as equações de Maxwell para os dois modos distintos, nomeados μ e ν , e usando o fato de que a frequência dos dois modos é a mesma:

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \left[\mathbf{E}_\mu \times \mathbf{H}_\nu^* + \mathbf{E}_\nu^* \times \mathbf{H}_\mu \right] &= \left[\left(-i\omega\mu_0\mathbf{H}_\mu \right) \cdot \mathbf{H}_\nu^* - \mathbf{E}_\mu \cdot (i\omega\varepsilon_0\varepsilon\mathbf{E}_\nu)^* \right] \\ &+ \left(\left(-i\omega\mu_0\mathbf{H}_\mu \right)^* \cdot \mathbf{H}_\nu - \mathbf{E}_\mu^* \cdot (i\omega\varepsilon_0\varepsilon\mathbf{E}_\nu) \right) \\ &= 0. \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

Para modos que propagam na direção z , sua dependência em z pode ser decomposta como $\mathbf{E}_\mu(x, y, z) = \mathbf{E}_\mu(x, y) \exp(i\beta_\mu z)$, como visto anteriormente na seção 4.1. Dessa forma o operador ∇ pode ser substituído por:

$$\nabla = \nabla_t + \hat{\mathbf{z}} \partial_z, \quad (\text{A.9})$$

onde ∇_t é o operador que atua apenas nas coordenadas transversas (x e y).

A Eq. (A.8) pode ser escrita então como:

$$\nabla_t \cdot \left[\mathbf{E}_\mu \times \mathbf{H}_\nu^* + \mathbf{E}_\nu^* \times \mathbf{H}_\mu \right] + i(\beta_\mu - \beta_\nu) \hat{\mathbf{z}} \cdot \left[\mathbf{E}_\mu \times \mathbf{H}_\nu^* + \mathbf{E}_\nu^* \times \mathbf{H}_\mu \right] = 0 \quad (\text{A.10})$$

Integrando em uma seção transversal a equação anterior e usando o teorema da divergência 2D, vemos que o primeiro termo é igual a zero ao ser

convertido em uma integral de linha (que se estende ao infinito). Logo, temos:

$$(\beta_\mu - \beta_\nu) \iint \hat{\mathbf{z}} \cdot [\mathbf{E}_\mu \times \mathbf{H}_\nu^* + \mathbf{E}_\nu^* \times \mathbf{H}_\mu] dS = 0. \quad (\text{A.11})$$

Para modos com constante de propagação diferente, isso implica que:

$$\iint \hat{\mathbf{z}} \cdot [\mathbf{E}_\mu \times \mathbf{H}_\nu^* + \mathbf{E}_\nu^* \times \mathbf{H}_\mu] dS = 0 \quad \text{para } \mu \neq \nu, \quad (\text{A.12})$$

que constitui na condição de ortogonalidade dos modos [120].

Apêndice B

Guias de Onda Duplamente

Ancorados

A equação de Euler-Bernoulli [40], $EI d^4w/dz^4 = q(z)$, é usada para descrever deformações $w(z)$ em estruturas tipo viga, onde E é o módulo de Young, I é o segundo momento de área e $q(z)$ é a densidade de força atuando na viga.

Para o caso de guias de onda ancorado nas duas extremidades, temos as seguintes condições de contorno:

$$w(0) = 0, \quad w'(0) = 0, \quad (\text{B.1})$$

$$w(L) = 0, \quad w'(L) = 0, \quad (\text{B.2})$$

onde L é o tamanho do guia de onda.

Para um par de guias de onda, nos temos então:

$$EI \frac{d^4 w^\pm(z)}{dz^4} = \pm(q_1 + q_2) + 2q_b \cos\left(\frac{\pi z}{L_b}\right), \quad (\text{B.3})$$

onde \pm indica o guia de onda da direita/esquerda na Fig. 4.2, e o lado direito da equação (RHS) segue de um processo similar ao da Eq. (4.7).

O termo de batimento q_b possui o mesmo sinal em ambos guias de onda, como mencionado anteriormente, enquanto as forças de modo q_1 e q_2 possuem sinais opostos em guias opostos, por isso o \pm nas equações.

Sem perda de generalidade, podemos assumir o caso onde $A_1 = A_2 = 1$. Mudando as variáveis para isolar forças de batimento de força de modos usando $\delta w = w^+ - w^-$ e $w_m = w^+ + w^-$, onde δw e w_m indicam, respectivamente mudança na posição relativa dos guias de onda e mudança no centro de massa do sistema. Nos temos então:

$$\delta w(z) = \frac{q_1 + q_2}{EI} \frac{L^4}{192} \left[16 \left(\frac{z}{L} - 1 \right)^2 \left(\frac{z}{L} \right)^2 \right], \quad (\text{B.4})$$

para a mudança na coordenada relativa, e onde o termo entre colchetes tem valor máximo unitário e representa a deformação para forças de modo. Note que q_1 e q_2 usualmente possuem sinais opostos, Fig. 4.2, um é atrativo enquanto o outro repulsivo, dessa maneira temos que na superposição, um termo tende a cancelar o outro, resultado em uma deflexão menor do que caso não houvesse superposição.

Para efeitos de comparação, a deformação do centro de massa w_m , causada pela força de batimento, será normalizada pela deformação máxima possível de w , que é causada pelas forças de modo. Assim temos que se a deformação for maior que 1, as forças de batimento irão dominar enquanto

se for menor que 1, as forças de modo irão dominar. Dessa maneira temos:

$$\frac{w_m(z)}{\delta w(L/2)} = \frac{q_b}{q_1 + q_2} \frac{768}{\pi^4 n^4} \left\{ \cos\left(\frac{n\pi z}{L}\right) - 1 + \frac{z^2}{L^2} \left[(\cos n\pi - 1) \left(\frac{2z}{L} - 3\right) + \left(\frac{n\pi z}{L} - n\pi\right) \sin n\pi \right] \right\}, \quad (\text{B.5})$$

onde $n = L/L_b$ e essa quantidade expressa o número de batimentos no comprimento do guia de onda. Essa é a expressão mostrada na Fig. 4.5(a), onde foi usado o fato de que $|q_b| \approx |q_1 + q_2|$ para as distâncias de interesse.

Apêndice C

Guias de Onda Ancorados em Apenas uma Extremidade

Fazendo o mesmo procedimento que o anterior, porém para guias de onda ancorados em apenas uma extremidade, temos as seguintes condições de contorno:

$$w(0) = 0, \quad w'(0) = 0, \quad (\text{C.1})$$

$$w''(L) = 0, \quad w'''(L) = 0, \quad (\text{C.2})$$

Mudando as variáveis e resolvendo temos:

$$\delta w(z) = \frac{q_1 + q_2}{EI} \frac{L^4}{4} \left[\frac{1}{3} \left(\frac{z}{L} \left(\frac{z}{L} - 4 \right) + 6 \right) \left(\frac{z}{L} \right)^2 \right], \quad (\text{C.3})$$

para a mudança na separação entre os guias de onda, e:

$$\begin{aligned} \frac{w_m(z)}{\delta w(L)} = & \frac{q_b}{q_1 + q_2} \frac{128}{17n^4\pi^4} \left\{ 6 \left(\cos \left(\frac{n\pi z}{L} \right) - 1 \right) \right. \\ & \left. + \frac{n^2\pi^2 z^2}{L^2} \left[3 \cos n\pi - \left(\frac{n\pi z}{L} - 3n\pi \right) \sin n\pi \right] \right\}, \quad (\text{C.4}) \end{aligned}$$

para a mudança na coordenada do centro de massa, que constitui a expressão mostrada na Fig. 4.5(b).

Bibliografia

- [1] T.L. Koch e U. Koren. «Semiconductor photonic integrated circuits». Em: *IEEE Journal of Quantum Electronics* 27.3 (1991), pp. 641–653. ISSN: 00189197. DOI: 10.1109/3.81373.
- [2] R. Nagarajan et al. «Large-scale photonic integrated circuits». Em: *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics* 11.1 (2005), pp. 50–65. ISSN: 1077-260X. DOI: 10.1109/JSTQE.2004.841721.
- [3] Mark A. Foster et al. «Broad-band optical parametric gain on a silicon photonic chip». Em: *Nature* 441.7096 (2006), pp. 960–963. ISSN: 0028-0836. DOI: 10.1038/nature04932.
- [4] D. Sahin et al. «Waveguide photon-number-resolving detectors for quantum photonic integrated circuits». Em: *Applied Physics Letters* 103.11 (2013), p. 111116. ISSN: 0003-6951. DOI: 10.1063/1.4820842.
- [5] Min Ren et al. «Nano-optomechanical Actuator and Pull-Back Instability». Em: *ACS Nano* 7.2 (2013), pp. 1676–1681. ISSN: 1936-0851. DOI: 10.1021/nn3056687.
- [6] J. G. Huang et al. «Torsional frequency mixing and sensing in optomechanical resonators». Em: *Applied Physics Letters* 111.11 (2017), p. 111102. ISSN: 0003-6951. DOI: 10.1063/1.4986811.

- [7] Y. Z. Shi et al. «High-resolution and multi-range particle separation by microscopic vibration in an optofluidic chip». Em: *Lab on a Chip* 17.14 (2017), pp. 2443–2450. ISSN: 1473-0197. DOI: 10.1039/C7LC00484B.
- [8] C. Koos et al. «All-optical high-speed signal processing with silicon–organic hybrid slot waveguides». Em: *Nature Photonics* 3.4 (2009), pp. 216–219. ISSN: 1749-4885. DOI: 10.1038/nphoton.2009.25.
- [9] Fengnian Xia et al. «An asymmetric twin-waveguide high-bandwidth photodiode using a lateral taper coupler». Em: *IEEE Photonics Technology Letters* 13.8 (2001), pp. 845–847. ISSN: 1041-1135. DOI: 10.1109/68.935823.
- [10] Ansheng Liu et al. «High-speed optical modulation based on carrier depletion in a silicon waveguide». Em: *Optics Express* 15.2 (2007), p. 660. ISSN: 1094-4087. DOI: 10.1364/OE.15.000660.
- [11] John David Jackson. *Classical Electrodynamics*. Third Edit. Wiley, 1998. ISBN: 9780471309321.
- [12] A.W. Snyder e J. Love. *Optical Waveguide Theory*. Springer Science & Business Media, 1983, p. 734. ISBN: 9780412099502.
- [13] J. M. Heaton et al. «Novel 1-to-N way integrated optical beam splitters using symmetric mode mixing in GaAs/AlGaAs multimode waveguides». Em: *Applied Physics Letters* 61.15 (1992), pp. 1754–1756. ISSN: 0003-6951. DOI: 10.1063/1.108495.
- [14] Pi-Gang Luan e Kar-Der Chang. «Periodic dielectric waveguide beam splitter based on co-directional coupling». Em: *Optics Express* 15.8 (2007), p. 4536. ISSN: 1094-4087. DOI: 10.1364/OE.15.004536.

- [15] E. A. J. Marcatili. «Dielectric Rectangular Waveguide and Directional Coupler for Integrated Optics». Em: *Bell System Technical Journal* 48.7 (1969), pp. 2071–2102. ISSN: 00058580. DOI: 10.1002/j.1538-7305.1969.tb01166.x.
- [16] S. Somekh et al. «Channel optical waveguide directional couplers». Em: *Applied Physics Letters* 22.1 (1973), pp. 46–47. ISSN: 0003-6951. DOI: 10.1063/1.1654468.
- [17] A. Yariv. «Coupled-mode theory for guided-wave optics». Em: *IEEE Journal of Quantum Electronics* 9.9 (1973), pp. 919–933. ISSN: 0018-9197. DOI: 10.1109/JQE.1973.1077767.
- [18] A. Hardy e W. Streifer. «Coupled mode theory of parallel waveguides». Em: *Journal of Lightwave Technology* 3.5 (1985), pp. 1135–1146. ISSN: 0733-8724. DOI: 10.1109/JLT.1985.1074291.
- [19] H. Haus et al. «Coupled-mode theory of optical waveguides». Em: *Journal of Lightwave Technology* 5.1 (1987), pp. 16–23. ISSN: 0733-8724. DOI: 10.1109/JLT.1987.1075416.
- [20] Michelle L Povinelli et al. «Evanescent-wave bonding between optical waveguides». Em: *Optics Letters* 30.22 (2005), p. 3042. ISSN: 0146-9592. DOI: 10.1364/OL.30.003042. arXiv: 0509073 [physics].
- [21] M L Povinelli et al. «Enhancement mechanisms for optical forces in integrated optics». Em: ed. por Kishan Dholakia e Gabriel C. Spalding. Vol. 6326. 1. 2006, p. 632609. ISBN: 0-8194-6405-8. DOI: 10.1117/12.681066.

- [22] Lukas Novotny e Bert Hecht. *Principles of nano-optics*. Cambridge University Press, 2006. ISBN: 978-0-521-83224-3.
- [23] W. H. P. Pernice, Mo Li e H. X. Tang. «A mechanical Kerr effect in deformable photonic media». Em: *Applied Physics Letters* 95.12 (2009), p. 123507. ISSN: 0003-6951. DOI: 10.1063/1.3236530.
- [24] Jing Ma e Michelle L. Povinelli. «Mechanical Kerr nonlinearities due to bipolar optical forces between deformable silicon waveguides». Em: *Optics Express* 19.11 (2011), p. 10102. ISSN: 1094-4087. DOI: 10.1364/OE.19.010102.
- [25] Mahmood Bagheri et al. «Dynamic manipulation of nanomechanical resonators in the high-amplitude regime and non-volatile mechanical memory operation». Em: *Nature Nanotechnology* 6.11 (2011), pp. 726–732. ISSN: 1748-3387. DOI: 10.1038/nnano.2011.180. arXiv: 1109.4681.
- [26] Mo Li, W. H. P. Pernice e H. X. Tang. «Tunable bipolar optical interactions between guided lightwaves». Em: *Nature Photonics* 3.8 (2009), pp. 464–468. ISSN: 1749-4885. DOI: 10.1038/nphoton.2009.116.
- [27] W. H. P. Pernice et al. «Modeling of the optical force between propagating lightwaves in parallel 3D waveguides». Em: *Optics Express* 17.18 (2009), p. 16032. ISSN: 1094-4087. DOI: 10.1364/OE.17.016032.
- [28] P.S.J. Russell, D. Culverhouse e F. Farahi. «Theory of forward stimulated Brillouin scattering in dual-mode single-core fibers». Em: *IEEE Journal of Quantum Electronics* 27.3 (1991), pp. 836–842. ISSN: 00189197. DOI: 10.1109/3.81397.

- [29] Peter T. Rakich et al. «Giant Enhancement of Stimulated Brillouin Scattering in the Subwavelength Limit». Em: *Physical Review X* 2.1 (2012), p. 011008. ISSN: 2160-3308. DOI: 10.1103/PhysRevX.2.011008.
- [30] C. Wolff et al. «Stimulated Brillouin scattering in integrated photonic waveguides: Forces, scattering mechanisms, and coupled-mode analysis». Em: *Physical Review A* 92.1 (2015), p. 013836. ISSN: 1050-2947. DOI: 10.1103/PhysRevA.92.013836.
- [31] Masud Mansuripur. «Electromagnetic force and torque in ponderable media». Em: *Optics Express* 16.19 (2008), p. 14821. ISSN: 1094-4087. DOI: 10.1364/OE.16.014821.
- [32] A. R. Zakharian et al. «Single-beam trapping of micro-beads in polarized light: Numerical simulations». Em: *Optics Express* 14.8 (2006), p. 3660. ISSN: 1094-4087. DOI: 10.1364/OE.14.003660.
- [33] Masud Mansuripur, Armis R. Zakharian e Ewan M. Wright. «Electromagnetic force distribution inside matter». Em: *Physical Review A* 88.2 (2013), p. 023826. ISSN: 1050-2947. DOI: 10.1103/PhysRevA.88.023826.
- [34] Amir M. Jazayeri e Khashayar Mehrany. «Critical study and discrimination of different formulations of electromagnetic force density and consequent stress tensors inside matter». Em: *Physical Review A* 89.4 (2014), p. 043845. ISSN: 1050-2947. DOI: 10.1103/PhysRevA.89.043845.
- [35] Halina Rubinsztein-Dunlop et al. «Roadmap on structured light». Em: *Journal of Optics* 19.1 (2017), p. 013001. ISSN: 2040-8978. DOI: 10.1088/2040-8978/19/1/013001.

- [36] Peter T. Rakich, Miloš A. Popovic e Zheng Wang. «General treatment of optical forces and potentials in mechanically variable photonic systems». Em: *Optics Express* 17.20 (2009), p. 18116. ISSN: 1094-4087. DOI: 10.1364/OE.17.018116.
- [37] Brandon A. Kemp, Tomasz M. Grzegorzczak e Jin Au Kong. «Ab initio study of the radiation pressure on dielectric and magnetic media». Em: *Optics Express* 13.23 (2005), p. 9280. ISSN: 1094-4087. DOI: 10.1364/OPEX.13.009280.
- [38] Yue Sun, Thomas P. White e Andrey a. Sukhorukov. «Coupled-mode theory analysis of optical forces between longitudinally shifted periodic waveguides». Em: *Journal of the Optical Society of America B* 30.3 (2013), p. 736. ISSN: 0740-3224. DOI: 10.1364/JOSAB.30.000736.
- [39] L. He, H. Li e M. Li. «Optomechanical measurement of photon spin angular momentum and optical torque in integrated photonic devices». Em: *Science Advances* 2.9 (2016), e1600485–e1600485. ISSN: 2375-2548. DOI: 10.1126/sciadv.1600485. arXiv: 1603.08950.
- [40] Stephen P. Timoshenko. *History of Strength of Materials*. Dover Publications, 1983.
- [41] S. F. Mahmoud. «2.9 Mode Orthogonality». Em: *Electromagnetic Waveguides: Theory and Applications*. The Institution of Engineering e Technology, 1991.
- [42] Shun Lien Chuang. *Physics of Photonic Devices*. Wiley, 2009, pp. 1–841. ISBN: 9788578110796. DOI: 10.1017/CB09781107415324.004. arXiv: arXiv:1011.1669v3.

- [43] Max Abraham. «Zur Elektrodynamik bewegter Körper». Em: *Rendiconti del Circolo Matematico di Palermo* 28.1 (1909), pp. 1–28. ISSN: 0009-725X. DOI: 10.1007/BF03018208.
- [44] Hermann Minkowski. *Die Grundgleichungen für die elektromagnetischen Vorgänge in bewegten Körpern*. 1907.
- [45] Elizabeth J. Kowalski et al. «Linearly Polarized Modes of a Corrugated Metallic Waveguide». Em: *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques* 58.11 (2010), pp. 2772–2780. ISSN: 0018-9480. DOI: 10.1109/TMTT.2010.2078972.
- [46] S. S. Quek e G. R. Liu. *Finite Element Method: A Practical Course*. Elsevier, 2003. ISBN: 9780080472768.
- [47] Anastasis C. Polycarpou. *Introduction to the Finite Element Method in Electromagnetics*. Morgan & Claypool Publishers, 2006. ISBN: 1598290460.
- [48] Gérard Meunier. *The Finite Element Method for Electromagnetic Modeling*. John Wiley & Sons, 2010. ISBN: 9780470393802.
- [49] Wujiong Sun et al. «Analytic derivation of electrostrictive tensors and their application to optical force density calculations». Em: *Physical Review B* 91.23 (2015), p. 235439. ISSN: 1098-0121. DOI: 10.1103/PhysRevB.91.235439.
- [50] Avigdor Einat e Uriel Levy. «Analysis of the optical force in the Micro Ring Resonator». Em: *Optics Express* 19.21 (2011), p. 20405. ISSN: 1094-4087. DOI: 10.1364/OE.19.020405.

- [51] K. S. Novoselov et al. «Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene». Em: *Nature* 438.7065 (2005), pp. 197–200. ISSN: 0028-0836. DOI: 10.1038/nature04233.
- [52] E. H. Hwang, S. Adam e S. Das Sarma. «Carrier Transport in Two-Dimensional Graphene Layers». Em: *Physical Review Letters* 98.18 (2007), p. 186806. ISSN: 0031-9007. DOI: 10.1103/PhysRevLett.98.186806.
- [53] Fengnian Xia et al. «Graphene Field-Effect Transistors with High On/Off Current Ratio and Large Transport Band Gap at Room Temperature». Em: *Nano Letters* 10.2 (2010), pp. 715–718. ISSN: 1530-6984. DOI: 10.1021/nl9039636.
- [54] Andrea Splendiani et al. «Emerging Photoluminescence in Monolayer MoS₂». Em: *Nano Letters* 10.4 (2010), pp. 1271–1275. ISSN: 1530-6984. DOI: 10.1021/nl903868w.
- [55] Sasha Stankovich et al. «Graphene-based composite materials». Em: *Nature* 442.7100 (2006), pp. 282–286. ISSN: 0028-0836. DOI: 10.1038/nature04969.
- [56] I. W. Frank et al. «Mechanical properties of suspended graphene sheets». Em: *Journal of Vacuum Science & Technology B: Microelectronics and Nanometer Structures* 25.6 (2007), p. 2558. ISSN: 10711023. DOI: 10.1116/1.2789446.
- [57] Mohammad A. Rafiee et al. «Enhanced Mechanical Properties of Nanocomposites at Low Graphene Content». Em: *ACS Nano* 3.12 (2009), pp. 3884–3890. ISSN: 1936-0851. DOI: 10.1021/nn9010472.

- [58] Hannu-Pekka Komsa et al. «Two-Dimensional Transition Metal Dichalcogenides under Electron Irradiation: Defect Production and Doping». Em: *Physical Review Letters* 109.3 (2012), p. 035503. ISSN: 0031-9007. DOI: 10.1103/PhysRevLett.109.035503.
- [59] Zhiming M. Wang. *MoS₂: Materials, Physics, and Devices*. Springer, 2013.
- [60] Oriol Lopez-Sanchez et al. «Ultrasensitive photodetectors based on monolayer MoS₂». Em: *Nature Nanotechnology* 8.7 (2013), pp. 497–501. ISSN: 1748-3387. DOI: 10.1038/nnano.2013.100.
- [61] Der-Hsien Lien et al. «Engineering Light Outcoupling in 2D Materials». Em: *Nano Letters* 15.2 (2015), pp. 1356–1361. ISSN: 1530-6984. DOI: 10.1021/nl504632u.
- [62] Zhuo Wang et al. «Giant photoluminescence enhancement in tungsten diselenide–gold plasmonic hybrid structures». Em: *Nature Communications* 7 (2016), p. 11283. ISSN: 2041-1723. DOI: 10.1038/ncomms11283.
- [63] Kin Fai Mak et al. «Atomically Thin MoS₂: A New Direct-Gap Semiconductor». Em: *Physical Review Letters* 105.13 (2010), p. 136805. ISSN: 0031-9007. DOI: 10.1103/PhysRevLett.105.136805.
- [64] Xin-Yao Yu et al. «Ultrathin MoS₂ Nanosheets Supported on N-doped Carbon Nanoboxes with Enhanced Lithium Storage and Electrocatalytic Properties». Em: *Angewandte Chemie International Edition* 54.25 (2015), pp. 7395–7398. ISSN: 14337851. DOI: 10.1002/anie.201502117.
- [65] Meng-Lin Tsai et al. «Monolayer MoS₂ Heterojunction Solar Cells». Em: *ACS Nano* 8.8 (2014), pp. 8317–8322. ISSN: 1936-0851. DOI: 10.1021/nn502776h.

- [66] Qing Hua Wang et al. «Electronics and optoelectronics of two-dimensional transition metal dichalcogenides». Em: *Nature Nanotechnology* 7.11 (2012), pp. 699–712. ISSN: 1748-3387. DOI: 10.1038/nnano.2012.193.
- [67] L Ottaviano et al. «Mechanical exfoliation and layer number identification of MoS₂ revisited». Em: *2D Materials* 4.4 (2017), p. 045013. ISSN: 2053-1583. DOI: 10.1088/2053-1583/aa8764.
- [68] Goki Eda et al. «Photoluminescence from Chemically Exfoliated MoS₂». Em: *Nano Letters* 11.12 (2011), pp. 5111–5116. ISSN: 1530-6984. DOI: 10.1021/nl201874w.
- [69] Vivek Pachauri, Klaus Kern e Kannan Balasubramanian. «Chemically exfoliated large-area two-dimensional flakes of molybdenum disulfide for device applications». Em: *APL Materials* 1.3 (2013), p. 032102. ISSN: 2166-532X. DOI: 10.1063/1.4820423.
- [70] Yi-Hsien Lee et al. «Synthesis of Large-Area MoS₂ Atomic Layers with Chemical Vapor Deposition». Em: *Advanced Materials* 24.17 (2012), pp. 2320–2325. ISSN: 09359648. DOI: 10.1002/adma.201104798.
- [71] Yongjie Zhan et al. «Large-Area Vapor-Phase Growth and Characterization of MoS₂ Atomic Layers on a SiO₂ Substrate». Em: *Small* 8.7 (2012), pp. 966–971. ISSN: 16136810. DOI: 10.1002/smll.201102654.
- [72] S. N. Heo et al. «Perspective: Highly ordered MoS₂ thin films grown by multi-step chemical vapor deposition process». Em: *APL Materials* 4.3 (2016), p. 030901. ISSN: 2166-532X. DOI: 10.1063/1.4943288.

- [73] Andres Castellanos-Gomez et al. «Deterministic transfer of two-dimensional materials by all-dry viscoelastic stamping». Em: *2D Materials* 1.1 (2014), p. 011002. ISSN: 2053-1583. DOI: 10.1088/2053-1583/1/1/011002.
- [74] R. Suzuki et al. «Valley-dependent spin polarization in bulk MoS₂ with broken inversion symmetry». Em: *Nature Nanotechnology* 9.8 (2014), pp. 611–617. ISSN: 1748-3387. DOI: 10.1038/nnano.2014.148.
- [75] Wanxiang Feng et al. «Intrinsic spin Hall effect in monolayers of group-VI dichalcogenides: A first-principles study». Em: *Physical Review B* 86.16 (2012), p. 165108. ISSN: 1098-0121. DOI: 10.1103/PhysRevB.86.165108.
- [76] Dror Sarid. *Scanning Force Microscopy: With Applications to Electric, Magnetic, and Atomic Forces*. Oxford University Press, 1994. ISBN: 9780195344691.
- [77] Peter Eaton e Paul West. *Atomic Force Microscopy*. Oxford University Press, 2010. ISBN: 9780199570454.
- [78] Greg Haugstad. *Atomic Force Microscopy: Understanding Basic Modes and Advanced Applications*. John Wiley & Sons, 2012. ISBN: 9781118360682.
- [79] Ernst Meyer, Hans Josef Hug e Roland Bennewitz. *Scanning Probe Microscopy: The Lab on a Tip*. Springer Science & Business Media, 2013. ISBN: 9783662098011.
- [80] Gerd K. Bennig. *Atomic force microscope and method for imaging surfaces with atomic resolution*. 1988.
- [81] G. Binnig, C. F. Quate e Ch. Gerber. «Atomic Force Microscope». Em: *Physical Review Letters* 56.9 (1986), pp. 930–933. ISSN: 0031-9007. DOI: 10.1103/PhysRevLett.56.930.

- [82] Reifenger Ronald G. *Fundamentals Of Atomic Force Microscopy - Part I: Foundations*. World Scientific, 2015. ISBN: 9789814630375.
- [83] J H Hoh e C A Schoenenberger. «Surface morphology and mechanical properties of MDCK monolayers by atomic force microscopy». Em: *Journal of Cell Science* 107.5 (1994), 1105 LP –1114.
- [84] S.N. Magonov, V. Elings e M.-H. Whangbo. «Phase imaging and stiffness in tapping-mode atomic force microscopy». Em: *Surface Science* 375.2-3 (1997), pp. L385–L391. ISSN: 00396028. DOI: 10.1016/S0039-6028(96)01591-9.
- [85] Satoru Fujisawa et al. «Lateral force curve for atomic force/lateral force microscope calibration». Em: *Applied Physics Letters* 66.4 (1995), pp. 526–528. ISSN: 0003-6951. DOI: 10.1063/1.114078.
- [86] Evan V. Anderson. *Atomic Force Microscopy: Lateral-Force Calibration and Force-Curve Analysis*. Worcester Polytechnic Institute, 2012.
- [87] Hagen Söngen, Ralf Bechstein e Angelika Kühnle. «Quantitative atomic force microscopy». Em: *Journal of Physics: Condensed Matter* 29.27 (2017), p. 274001. ISSN: 0953-8984. DOI: 10.1088/1361-648X/aa6f8b.
- [88] J. P. Cleveland et al. «Energy dissipation in tapping-mode atomic force microscopy». Em: *Applied Physics Letters* 72.20 (1998), pp. 2613–2615. ISSN: 0003-6951. DOI: 10.1063/1.121434.
- [89] Javier Tamayo e Ricardo García. «Relationship between phase shift and energy dissipation in tapping-mode scanning force microscopy». Em: *Applied Physics Letters* 73.20 (1998), pp. 2926–2928. ISSN: 0003-6951. DOI: 10.1063/1.122632.

- [90] Phaedon Avouris, Tobias Hertel e Richard Martel. «Atomic force microscope tip-induced local oxidation of silicon: kinetics, mechanism, and nanofabrication». Em: *Applied Physics Letters* 71.2 (1997), pp. 285–287. ISSN: 0003-6951. DOI: 10.1063/1.119521.
- [91] Cristiano Albonetti et al. «Parallel-local anodic oxidation of silicon surfaces by soft stamps». Em: *Nanotechnology* 19.43 (2008), p. 435303. ISSN: 0957-4484. DOI: 10.1088/0957-4484/19/43/435303.
- [92] R Held et al. «Nanolithography by local anodic oxidation of metal films using an atomic force microscope». Em: *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures* 2.1-4 (1998), pp. 748–752. ISSN: 13869477. DOI: 10.1016/S1386-9477(98)00153-2.
- [93] M. Donarelli et al. «Few layered MoS₂ lithography with an AFM tip: description of the technique and nanospectroscopy investigations». Em: *Nanoscale* 7.26 (2015), pp. 11453–11459. ISSN: 2040-3364. DOI: 10.1039/C5NR02337H.
- [94] Yu K Ryu e Ricardo Garcia. «Advanced oxidation scanning probe lithography». Em: *Nanotechnology* 28.14 (2017), p. 142003. ISSN: 0957-4484. DOI: 10.1088/1361-6528/aa5651.
- [95] Arancha I. Dago, Yu K. Ryu e Ricardo Garcia. «Sub-20 nm patterning of thin layer WSe₂ by scanning probe lithography». Em: *Applied Physics Letters* 109.16 (2016), p. 163103. ISSN: 0003-6951. DOI: 10.1063/1.4965840.

- [96] Elena Pinilla-Cienfuegos et al. «Local Oxidation Nanolithography on Metallic Transition Metal Dichalcogenides Surfaces». Em: *Applied Sciences* 6.9 (2016), p. 250. ISSN: 2076-3417. DOI: 10.3390/app6090250.
- [97] S Masubuchi, M Arai e T Machida. «Atomic Force Microscopy Based Tunable Local Anodic Oxidation of Graphene». Em: *Nano Letters* 11.11 (2011), pp. 4542–4546. ISSN: 15306984. DOI: Doi10.1021/Nl201448q.
- [98] Miroslav Bartošík et al. «Role of humidity in local anodic oxidation: A study of water condensation and electric field distribution». Em: *Physical Review B* 79.19 (2009), p. 195406. ISSN: 1098-0121. DOI: 10.1103/PhysRevB.79.195406.
- [99] Changgu Lee et al. «Anomalous Lattice Vibrations of Single- and Few-Layer MoS₂». Em: *ACS Nano* 4.5 (2010), pp. 2695–2700. ISSN: 1936-0851. DOI: 10.1021/nn1003937.
- [100] Judith A. Halstead. «Teaching the Spin Selection Rule: An Inductive Approach». Em: *Journal of Chemical Education* 90.1 (2013), pp. 70–75. ISSN: 0021-9584. DOI: 10.1021/ed200795t.
- [101] Maria C. Tamargo. *II-VI Semiconductor Materials and their Applications*. CRC Press, 2002. ISBN: 9781560329145.
- [102] Aaron R. Clapp, Igor L. Medintz e Hedi Mattoussi. «Förster Resonance Energy Transfer Investigations Using Quantum-Dot Fluorophores». Em: *ChemPhysChem* 7.1 (2006), pp. 47–57. ISSN: 1439-4235. DOI: 10.1002/cphc.200500217.

- [103] Gregory H. Wannier. «The Structure of Electronic Excitation Levels in Insulating Crystals». Em: *Physical Review* 52.3 (1937), pp. 191–197. ISSN: 0031-899X. DOI: 10.1103/PhysRev.52.191.
- [104] J. Frenkel. «On the Transformation of light into Heat in Solids. I». Em: *Physical Review* 37.1 (1931), pp. 17–44. ISSN: 0031-899X. DOI: 10.1103/PhysRev.37.17.
- [105] Yulu Liu et al. «Layer-by-Layer Thinning of MoS₂ by Plasma». Em: *ACS Nano* 7.5 (2013), pp. 4202–4209. ISSN: 1936-0851. DOI: 10.1021/nn400644t.
- [106] Timothy C. Berkelbach, Mark S. Hybertsen e David R. Reichman. «Theory of neutral and charged excitons in monolayer transition metal dichalcogenides». Em: *Physical Review B* 88.4 (2013), p. 045318. ISSN: 1098-0121. DOI: 10.1103/PhysRevB.88.045318.
- [107] Kin Fai Mak et al. «Tightly bound trions in monolayer MoS₂». Em: *Nature Materials* 12.3 (2012), pp. 207–211. ISSN: 1476-1122. DOI: 10.1038/nmat3505.
- [108] Yuanyuan Li et al. «Photoluminescence of monolayer MoS₂ on LaAlO₃ and SrTiO₃ substrates». Em: *Nanoscale* 6.24 (2014), pp. 15248–15254. ISSN: 2040-3364. DOI: 10.1039/C4NR04602A.
- [109] Shinichiro Mouri, Yuhei Miyauchi e Kazunari Matsuda. «Tunable Photoluminescence of Monolayer MoS₂ via Chemical Doping». Em: *Nano Letters* 13.12 (2013), pp. 5944–5948. ISSN: 1530-6984. DOI: 10.1021/nl403036h.

- [110] Hye Min Oh et al. «Modulating Electronic Properties of Monolayer MoS₂ via Electron-Withdrawing Functional Groups of Graphene Oxide». Em: *ACS Nano* 10.11 (2016), pp. 10446–10453. ISSN: 1936-0851. DOI: 10.1021/acsnano.6b06319.
- [111] Bráulio S. Archanjo et al. «Characterization of Metal Oxide-Based Gas Nanosensors and Microsensors Fabricated via Local Anodic Oxidation Using Atomic Force Microscopy». Em: *Advances in Materials Science and Engineering* 2013 (2013), pp. 1–13. ISSN: 1687-8434. DOI: 10.1155/2013/898565.
- [112] Narae Kang et al. «Photoluminescence Quenching in Single-Layer MoS₂ via Oxygen Plasma Treatment». Em: *The Journal of Physical Chemistry C* 118.36 (2014), pp. 21258–21263. ISSN: 1932-7447. DOI: 10.1021/jp506964m.
- [113] Norman M.D Brown, Naiyi Cui e Archibald McKinley. «An XPS study of the surface modification of natural MoS₂ following treatment in an RF-oxygen plasma». Em: *Applied Surface Science* 134.1-4 (1998), pp. 11–21. ISSN: 01694332. DOI: 10.1016/S0169-4332(98)00252-9.
- [114] Christian Stelling et al. «Plasmonic nanomeshes: their ambivalent role as transparent electrodes in organic solar cells». Em: *Scientific Reports* 7 (2017), p. 42530. ISSN: 2045-2322. DOI: 10.1038/srep42530.
- [115] Hong Li et al. «From Bulk to Monolayer MoS₂: Evolution of Raman Scattering». Em: *Advanced Functional Materials* 22.7 (2012), pp. 1385–1390. ISSN: 1616301X. DOI: 10.1002/adfm.201102111.

- [116] Xiaoxu Wei et al. «Mo-O bond doping and related-defect assisted enhancement of photoluminescence in monolayer MoS₂». Em: *AIP Advances* 4.12 (2014), p. 123004. ISSN: 2158-3226. DOI: 10.1063/1.4897522.
- [117] A Castellanos-Gomez et al. «Laser-Thinning of MoS₂: On Demand Generation of a Single-Layer Semiconductor». Em: *Nano Letters* 12.6 (2012), pp. 3187–3192. ISSN: 1530-6984. DOI: 10.1021/nl301164v.
- [118] Jumiati Wu et al. «Layer Thinning and Etching of Mechanically Exfoliated MoS₂ Nanosheets by Thermal Annealing in Air». Em: *Small* 9.19 (2013), n/a–n/a. ISSN: 16136810. DOI: 10.1002/smll.201301542.
- [119] Guru P. Neupane et al. «Formation of nanosized monolayer MoS₂ by oxygen-assisted thinning of multilayer MoS₂». Em: *Journal of Applied Physics* 120.5 (2016), p. 051702. ISSN: 0021-8979. DOI: 10.1063/1.4958939.
- [120] Chin-Lin Chen. «Orthogonality and Orthonormality of Guided Modes». Em: *Foundations for Guided-Wave Optics*. Wiley-Interscience, 2006. ISBN: 9780471756873.