



UNIVERSIDADE ESTADUAL DE FEIRA DE SANTANA

Autorizada pelo Decreto Federal nº 77.496 de 27/04/76  
Recredenciamento pelo Decreto nº 17.228 de 25/11/2016



PRÓ-REITORIA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO  
COORDENAÇÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA

## XXIV SEMINÁRIO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UEFS SEMANA NACIONAL DE CIÊNCIA E TECNOLOGIA - 2020

### *Uma expressão ansatz para a contribuição das transições interbandas para a parte imaginária da função dielétrica.*

**Gabriel Lobo Matias de Souza<sup>1</sup>; Antônio Vieira de Andrade Neto**<sup>2</sup>;

1. Bolsista Fapesb/CNPq, Graduando em Licenciatura em física, Universidade Estadual de Feira de Santana, e-mail: [gabrielmslobo@hotmail.com](mailto:gabrielmslobo@hotmail.com)
2. Orientador, Departamento de física, Universidade Estadual de Feira de Santana, e-mail: [aneto@uefs.br](mailto:aneto@uefs.br)

**PALAVRAS-CHAVE:** Plasmônica ; Sistema metal/dielétrico ; elétrons de condução

### INTRODUÇÃO

A intensa investigação, tanto teórico quanto experimental, das propriedades eletrônicas, óticas e magnéticas dos sistemas estudados na Física da Matéria Condensada, permitiu a criação de novas disciplinas como a fotônica, e, mais recentemente foi desenvolvida a Plasmônica, uma subárea da nanofotônica, uma nova disciplina que tem como objetivo investigar a interação entre a luz e os elétrons de condução presentes em sistemas metálicos de uma interface metal/dielétrico. Tal interação dá origem a um tipo de quasipartícula resultante do acoplamento entre fótons e plásmons de superfície, a qual é denominada como plásmo-polárítos de superfície SPPs (Surface Plasmon-Polaritons) [1]

Os Plásmo-Polárítos de Superfície podem ser visualizados como uma onda eletromagnética superficial que se propaga na interface entre o metal e o dielétrico e que decai exponencialmente com a distância na direção perpendicular à interface (onda evanescente), provocando o confinamento da luz na interface metal/dielétrico.

Em particular, as propriedades óticas dos metais são especialmente importantes para a compreensão e desenvolvimento de estruturas plasmônicas. É bem conhecido que a função dielétrica dos metais, com destaque para o ouro, é dominada por duas contribuições: uma que corresponde aos elétrons livres (elétrons de condução) e está associada as transições intrabanda e pode ser descrita pelo modelo de Drude; a outra corresponde aos elétrons ligados e está associada aos processos óticos interbandas, para os quais o modelo de Drude não é adequado.

Desse modo, a fim de reproduzir os resultados experimentais para o ouro na faixa de pequenos comprimentos de onda (grandes valores de energia para os fótons) tivemos que investigar as transições interbandas desse material. Os resultados por nós obtidos estão descritos adiante na Seção RESULTADOS ENCONTRADOS, aproximando assim resultados teóricos dos resultados experimentais.

### MATERIAL E MÉTODOS OU METODOLOGIA (ou equivalente)

Iniciamos o trabalho com a revisão bibliográfica selecionando artigos na base de dados da Capes. Estes artigos foram buscados com as palavras chaves “plásmo-polaritons”, “relação de dispersão”, “modelo de Lindhard-Drude”, usando assim os

artigos que mais fizessem o uso dos modelos de Drude e Lindhard-Drude em sistemas plasmônicos a fim de obter dados teóricos do sistema. Foram utilizados filtros que buscassem artigos entre os períodos de 2010 a 2020. Os artigos selecionados apresentavam o uso dos modelos de Drude e Lindhard-Drude para sistemas plasmônicos na física teórica, tais informações irão acrescentar na construção da proposta deste trabalho., Além dessas bases de dados foi usada também a Sciello. Além disto foram usados livros de eletromagnetismo [2] e de plasmônica [3],[4] para o embasamento teórico, e também fizemos o uso da linguagem de programação python [5] para plotagem dos gráficos do presente trabalho. Do ponto de vista da física teórica, foi estudado o eletromagnetismo de Maxwell, em particular as condições de contorno sobre o campo eletromagnético numa interface metal/dielétrico, bem como os modelos de Drude-Sommerfeld e Drude-Lorentz.

### **RESULTADOS E/OU DISCUSSÃO (ou Análise e discussão dos resultados)**

Na descrição da interação da radiação eletromagnética com os elétrons quase livres de um metal, é muito comum a utilização do modelo de Drude, o qual, conforme já mencionado na Introdução, descreve a função dielétrica  $\epsilon(\omega)$  de forma satisfatória quando a radiação incidente leva apenas a transições eletrônicas dentro da mesma banda de condução (transições intrabanda). Em um modelo clássico, a contribuição dos elétrons ligados (bound electrons) são levados em conta utilizando o chamado modelo de Drude-Lorentz, no qual a aplicação de um campo elétrico externo provoca o deslocamento das camadas eletrônicas em relação ao núcleo atômico positivo, produzindo um momento de dipolo elétrico que contribui para a função dielétrica do material. Contudo, mesmo o modelo de Drude-Lorentz falha na reprodução dos valores experimentais quando a energia da radiação incidente for capaz de produzir transições interbandas. Para o ouro isso acontece para energias do fóton a partir de 1,8 eV. Desse modo, para a obtenção de resultados realísticos, é necessário uma expressão para a parte imaginária da função dielétrica capaz de reproduzir os resultados experimentais de forma confiável.

#### ***Função dielétrica segundo o modelo de Drude- Sommerfeld***

No contexto do modelo de Drude, a equação de movimento para os elétrons de condução é:

$$m_e \frac{\partial^2 r}{\partial t^2} + m_e \Gamma \frac{\partial r}{\partial t} = e E_0 e^{-i\omega t} \quad (1)$$

A partir da solução da equação diferencial do movimento, equação (1), obtemos a equação da função dielétrica em função da frequência, equação (2), a qual possui uma parte real e uma parte imaginária, onde  $\omega_p = \sqrt{ne/(m\epsilon_0)}$  é a frequência de plasma de volume [12-4].

$$\epsilon_{Drude}(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + \Gamma^2} + i \frac{\Gamma \omega_p^2}{\omega(\omega^2 + \Gamma^2)} \quad (2)$$

#### ***Função dielétrica segundo o modelo de Drude de Lorentz para transições interbandas***

Para os elétrons ligados, os quais podem ser modelados como um conjunto de osciladores, usamos o modelo de Lorentz. Aplicando o mesmo método que foi usado

acima para os elétrons livres para descrever a resposta dos elétrons ligados, a equação do movimento para esse caso é escrita como

$$m \frac{\partial^2 r}{\partial t^2} + m\gamma \frac{\partial r}{\partial t} + ar = eE_0 e^{-i\omega t} \quad (3)$$

A partir da equação (3) obtém-se a função dielétrica para os elétrons ligados

$$\varepsilon(\omega) = 1 + \frac{\omega_p^2(\omega_0^2 - \omega^2)}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \gamma^2\omega^2} + i \frac{\gamma^2\omega_p^2\omega}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \gamma^2\omega^2} \quad (4)$$

Um modelo mais adequado certamente será a soma das contribuições dos elétrons livres (modelo de Drude-Sommerfeld) com as contribuições dos elétrons ligados (modelo de Drude-Lorentz). Para a parte real temos a equação (5) e para a imaginária a equação (6)

$$\varepsilon_{Drude + interbandas}(\omega) = 1 + \frac{\omega_p^2(\omega_0^2 - \omega^2)}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \gamma^2\omega^2} - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + \Gamma^2} \quad (5)$$

$$\varepsilon_{Drude + interbandas}(\omega) = i \frac{\Gamma\omega_p^2}{\omega(\omega^2 + \Gamma^2)} + i \frac{\gamma^2\omega_p^2\omega}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \gamma^2\omega^2} \quad (6)$$

***Uma nova expressão para a contribuição das transições interbandas para a parte imaginária da função dielétrica.***

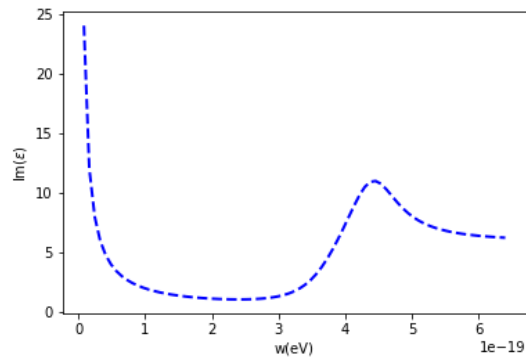
A Figura 2 abaixo, retirada da Referência [6], mostra o gráfico da parte imaginária da função dielétrica para o ouro em função da frequência. A linha tracejada é o resultado teórico correspondente a soma das contribuições dos modelos de Drude-Sommerfeld e Drude-Lorentz. Os círculos representam pontos experimentais e a curva em vermelho corresponde aos valores experimentais. Claramente observa-se uma discrepância entre a previsão teórica clássica (linha tracejada em preto) e o resultado experimental (curva vermelha) a partir de aproximadamente 2 eV. Isso nos obrigou a procurar uma expressão que pudesse de alguma forma reproduzir os resultados experimentais nessa faixa de energia. Após algumas tentativas chegamos a seguinte função ansatz

$$\varepsilon_{ansatz} = \frac{A}{2} [\tanh\left(\frac{\omega - \omega_c}{\Delta}\right) + 1] \quad (7)$$

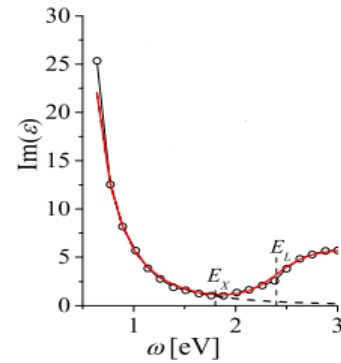
onde  $A = 5,6$  eV,  $\omega_c = 2,4$  eV e  $\Delta = 0,3$  eV. Esse é um importante resultado obtido no presente trabalho. Assim, temos a seguinte expressão para a parte imaginária da função dielétrica

$$\varepsilon_{Drude - Lorentz}(\omega) = i \frac{\Gamma\omega_p^2}{\omega(\omega^2 + \Gamma^2)} + i \frac{\gamma^2\omega_p^2\omega}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \gamma^2\omega^2} + \frac{A}{2} [\tanh\left(\frac{\omega - \omega_c}{\Delta}\right) + 1] \quad (8)$$

A Figura 1 mostra o gráfico da equação 8. Observa-se um bom acordo qualitativo entre nosso resultado e os valores experimentais (figura 2). Continuaremos trabalhando nos parâmetros utilizados a fim de melhorar quantitativamente esse acordo.



**Figura 1:** Parte imaginária da função dielétrica do ouro, os parâmetros usados são  $\omega_c=2.4$  eV,  $\Delta=0.3$  eV e  $A=5.6$



**Figura 2:** Parte imaginária da função dielétrica do ouro, a linha tracejada em preto é a curva teórica clássica e a linha vermelha representa os valores experimentais.

## CONSIDERAÇÕES FINAIS (ou Conclusão)

A função dielétrica é uma quantidade fundamental na determinação de várias propriedades físicas dos materiais. No caso do ouro, que é um importante material utilizado em sistemas plasmônicos, sabe-se que os modelos normalmente utilizados apresentam discrepâncias com os valores experimentais para energias dos fótons incidentes a partir de 1,8 eV. Assim, para uma descrição mais acurada desse material faz-se necessário um modelo teórico que reproduza melhor os resultados experimentais nessa faixa de energia. Com esse objetivo, procuramos determinar uma função ansatz relativamente simples e que ao mesmo tempo descreva de forma adequada as transições interbandas. A equação (7) acima atende a esses critérios e acreditamos que esse é um resultado importante do presente trabalho. Como próximos passos do trabalho, calcularemos algumas propriedades óticas de sistemas plasmônicos levando em conta o resultado aqui obtido.

## REFERÊNCIAS

- [1] A. V. Andrade-Neto, Aroldo Ribeiro Neto e Ado Jorio. Relação de dispersão para os plásmo-polaritons de superfície em uma interface plana metal/dielétrico. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, vol. 39, no.3, e3310 (2017).
- [2] John R. Reitz, Frederick J. Milford e Robert W. Christy, **Fundamentos da Teoria Eletromagnética**. (Editora Campus, São Paulo, 1982), p. 95, p. 199.
- [3] NOVOTNY,L;HECHT,T. Principles of nano-optics. New York;2006
- [4] Stefan Alexander Maier, Plasmonics: fundamentals and applications. (Springer, 2007).
- [5] Banin,S.L ;**Python 3: Conceitos e aplicações : Uma abordagem didática**. Érica (2018).
- [6] Anastasiya Derkachova, Krystyna Kolwas and Iraidia Demchenko, Dielectric Function for Gold in Plasmonics Applications: Size Dependence of Plasmon Resonance Frequencies and Damping Rates for Nanospheres. *Plasmonics*, 11, 941, (2016).