Engenharia de emissores quânticos pela presença de materiais bidimensionais: acoplamento com modos de superfície

Leonardo A. Lugarini, Ana B. Monteiro, Victor G. M. Duarte, Denys Derlian C. Brito e André J. C. Chaves Instituto Tecnológico de Aeronáutica, São José dos Campos/ São Paulo - Brasil

Abstract—Emissores quânticos, sistemas capazes de emitir um fóton por ciclo, são uma das peças fundamentais para o estabelecimento de comunicação quântica, que possui grande potencialidade em melhorar a criptografia e tornar a transmissão de informação pelo espaço livre mais seguro. A taxa de informação transmitida no emissor quântico depende do tempo médio para ocorrer a emissão espontânea, que é uma das principais figuras de mérito em fontes de fótons únicos. É possível alterar a taxa de emissão de fótons utilizando o efeito Purcell. Nesse trabalho, exploramos o fato de que a presença de plasmon-polaritons de superfície é capaz de aumentar a taxa de emissão de fótons e estudamos o efeito da preseça de uma folha de grafeno. Por fim, apresentamos perspectivas para trabalhos futuros.

Keywords— Cibersegurança, Tecnologias Quânticas, Comunicação Quântica.

I. INTRODUÇÃO

A comunicação quântica consiste na transmissão de informação através de qubits [1], que pode ser realizada via fibra óptica ou por espaço livre [2] incluindo satélites [3]. Uma das primeiras aplicações práticas de comunicação quântica é no distribuimento de chaves quânticas (QKD), uma das tecnologias quânticas mais maduras [4]. O teorema de nãoclonagem permite desenvolver protocolos de QKD, como por exemplo o BB84 [5], que garantem com um alto grau de confiança de que o canal não está sujeito à escuta de um agente malicioso [6]. Uma das principais motivações para o desenvolvimento da criptografia quântica é o risco que o avanço da computação quântica tem sobre a maioria dos métodos de criptografia atuais [7]. Por exemplo, o uso de informação é fundamental para se conseguir superioridade no campo de batalha, sendo vital portanto a sua segurança. Nesse sentido, a criptografia quântica pode permitir a transmissão de chaves via espaço livre de forma segura [8].

Fonte de fótons únicos corresponde ao ingrediente inicial para o estabelecimento de redes de comunicação quântica [11, 12]. Por exemplo, há protocolos de criptografia quântica que dependem de apenas um único fóton propagando pelo canal de comunicação, como o BB84 [9]. Mesmo em protocolos que dependem de emaranhamento, como o E91 [10], pode ser utilizado métodos de criação de pares emaranhados a partir de fótons únicos [11]. Além de comunicação quântica, fontes de fótons únicos podem ser aplicados em detecção de bioluminescência, sequenciamento de DNA, sensoriamento remoto, tomografia óptica difusa, etc. [14]. A realização física de fontes de fótons únicos se dá através de emissores quânticos [10]. Como exemplo de emissores quânticos, temos pontos quânticos semicondutores, moléculas fluorescentes, defeitos

em materiais bidimensionais, centro de vacância de nitrogênio em diamante, etc.

Uma forma de aumentar a taxa de emissão de fótons é através do acoplamento com os plasmon-polaritons de superfície, modos hibridizados de campo eletromagnético e matéria (plasmons), que acontecem na interface entre um meio dielétrico e condutor [12] ou em materiais bidimensionais [13].

Os materiais bidimensionais são atualmente um campo de pesquisa de grande interesse tanto nacional quanto internacional. Eles se enquadram na categoria de materiais avançados estratégicos e apresentam um potencial significativo para impulsionar a criação de novos produtos e processos inovadores de alto valor tecnológico e econômico, conforme estabelecido pela Portaria MCTI Nº 4.964 e pelo Decreto nº 10.746. Entre os materiais bidimensionais, destacamos o grafeno, uma única folha de átomos de carbono arranjados em uma estrutura tipo favo de mel [14]; o nitreto de Boro hexagonal, que é um isolante [15]; os dicalcogenetos de metais de transição, que são semicondutores [16]; e o fósforo negro, semicondutor com propriedades anisotrópicas [17].

O grafeno, quando dopado, possui a capacidade de suportar os modos de plasmon-polaritons de superfície, altamento confinados em sua superfície. Já foi demonstrado que plasmons-polaritons de superfície em materiais bidimensionais, como grafeno, podem aumentar a taxa de decaimento de emissores quânticos [18].

Nesse trabalho, apresentamos resultados para a taxa de emissão de fótons de um emissor quântico (tratado como um sistema de dois níveis) que se acopla ao campo elétrico através do termo de dipolo imerso em uma cavidade que contém heteroestruturas de materiais 2D. No caso, o acoplamento com plasmons-polaritons em grafeno aumenta em até 5 ordens de grandeza a taxa de emissão de fótons únicos. Começamos na seção II introduzindo brevemente os modos de plasmon-polaritons no grafeno. Depois, na seção III, mostramos a metodologia para o cálculo do Efeito Purcell em sistemas com periodicidade unidimensional. Na seção IV mostramos os resultados para a emissão espontânea em uma folha de grafeno e na seção V temos a conclusão e perspectivas.

II. PLASMON-POLARITONS EM GRAFENO

Os plásmons são excitações coletivas do líquido eletrônico em um material [19]. Quando há um desvio da densidade de carga a partir do estado de equilíbrio, surge uma força restaurativa que busca trazer o sistema de volta ao equilíbrio. De forma análoga ao caso do oscilador harmônico, podemos

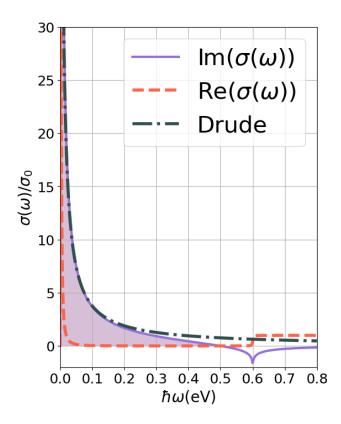


Fig. 1. Condutividade óptica de uma monocamada de grafeno, com $E_F=0.3$ e, $\Gamma=1$ meV e $\sigma_0=e^2/(4\hbar)$. A região sombreada determina a faixa de frequência capaz de suportar modos TM de plasmon-polaritons.

caracterizar essa força por uma frequência característica ω_p , a frequência de plasmon, que irá depender das propriedades do material em questão. Em ressonância com essa frequência, as excitações são auto-sustentáveis, caracterizando o modo coletivo plasmônico. Sob as devidas condições, a componente do campo elétrico da luz pode excitar esse modo coletivo, formando os modos de plasmon-polaritons de superfície [12].

Como consequência das condições de contorno na interface entre dois meios para as componentes do campo eletromagnético, temos que, no caso de uma folha plana de grafeno de condutividade bidimensional $\sigma(\omega)$, onde ω é a frequência do campo eletromagnético, que está posicionada entre dois dielétricos cujas constantes são ϵ_1 e ϵ_2 , modos de plasmonpolaritons de superfície tipo TM (*Transverse Magnetic*) no grafeno serão solução de [13]:

$$\frac{\epsilon_1}{\kappa_1} + \frac{\epsilon_2}{\kappa_2} + i \frac{\sigma(\omega)}{\epsilon_0 \omega} = 0, \tag{1}$$

onde

$$\kappa_i = \sqrt{q^2 - \epsilon_i k_0^2},\tag{2}$$

 $k_0=\omega/c$ é o comprimento de onda da luz no vácuo, c a velocidade da luz, ϵ_0 a permissividade elétrica do vácuo, q o número de onda ao longo do plano de propagação do plasmonpolariton, paralelo a superfície do grafeno. Como κ_i precisa ter parte real positiva, em meios dielétricos com $\epsilon_i>0$, essa equação só terá solução quando $\mathrm{Re}\{\sigma(\omega))\}>0$.

A condutividade óptica do grafeno, para frequências no terahertz, pode ser aproximada pelo termo de Drude, corres-

pondente à transições intrabandas, e é dada por:

$$\sigma(\omega) = \frac{4e^2}{\pi} \frac{E_F}{\hbar\omega + i\Gamma},\tag{3}$$

onde E_F é a energia de Fermi, tipicamente da ordem de centenas de meV, e é a carga fundamental do elétron, \hbar a constante de Planck reduzida, e Γ/\hbar a taxa de relaxamento. Mostramos na Fig. (1) a condutividade óptica do grafeno para uma energia de Fermi de 0.3 eV, onde foi utilizado a fórmula de Mermin [20], incluindo termos interbanda, quanto apenas o termo de Drude (3), mostrando excelente concordância para as frequências mais baixas.

Podemos ver na Fig. 1 que a região de mais baixa frequência do gráfico suporta modos de plasmon-polaritons de superfície. Na condição de que $q\gg k_0$, a equação (1) possui simples solução analítica [21]:

$$\omega = \sqrt{\alpha \frac{E_F}{\epsilon_1 + \epsilon_2} \frac{c}{\hbar} q} - i \frac{\Gamma}{\hbar}, \tag{4}$$

onde $\alpha \approx 1/137$ é a constante de estrutura fina, ou seja, a frequência cresce proporcionalmente à raiz do número de onda. Isso implica que os plasmons-polaritons no grafeno tem o potencial possuirem pequenos comprimentos de onda, com

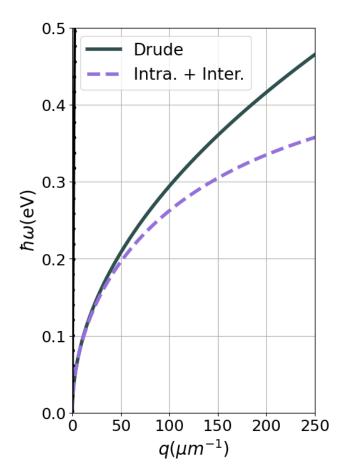


Fig. 2. Relação de dispersão para plasmon-polaritons de superfície no grafeno de uma monocamada de grafeno, com $E_F=0.3$ eV, $\Gamma=1$ meV, $\epsilon_1=\epsilon_2=1$. A linha preta quase vertical corresponde a relação de dispersão para uma onda eletromagnética propagante no vácuo, i.e., $\omega=cq$, o que mostra que plasmon-polaritons se propagam com reduzido comprimento de onda.

Na Fig. (2), mostramos a relação de dispersão para o grafeno considerando tanto a aproximação 4 quanto a solução exata da Eq. (1) para uma folha de grafeno suspensa no ar,

 $\epsilon_1=\epsilon_2=1$. Vemos uma boa concordância entre as duas expressões para as frequências mais baixas.

III. TAXA DE DECAIMENTO DE EMISSORES QUÂNTICOS

Um emissor quântico pode ser tratado como um dipolo elétrico [22], caracterizado pelo momento de dipolo $\mu=(\mu_x,\mu_y,\mu_z)$. Nesse caso, utilizando o método da função de Green diádica, é possível mostrar que o aumento da taxa de emissão espontânea, o chamado fator de Purcell $\frac{P}{P_0}$, para um dipolo a uma distância z_0 de uma interface, é dada pela expressão [22]:

$$\frac{P}{P_0} = 1 + \frac{3(\mu_z^2)}{2|\boldsymbol{\mu}|^2} \int_0^\infty ds \operatorname{Re}\left(\frac{s^3}{s_z} r^p e^{2ik_1 z_0 s_z}\right) + \frac{3(\mu_x^2 + \mu_y^2)}{4|\boldsymbol{\mu}|^2} \int_0^\infty ds \operatorname{Re}\left(\frac{s}{s_z} (r^s - r^p s_z^2) e^{2ik_1 z_0 s_z}\right), \quad (5)$$

onde $s_z=\sqrt{1-s^2},\ r_p$ e r_s são os coeficientes de Fresnel para polarização tipo p e tipo s respectivamente, calculados para o número de onda sk_1 , e k_1 o número de onda do meio onde se encontra o dipolo. Nessa expressão, P_0 é a potência emitida por um dipolo oscilante à uma frequência ω no vácuo, e P no meio laminar em questão. É possível mostrar que a razão P/P_0 é equivalente à razão γ/γ_0 , onde γ_0 é a taxa de emissão espontânea de fótons por um emissor quântico no vácuo, e γ no meio material em questão [22].

A. Método da matriz de transferência

Para o cálculo dos coeficientes de Fresnel r_s e r_p , utilizamos o método da matriz de transferência [23] para sistemas lineares e não homogeneos em apenas uma das direções. Nesse método, decompomos as ondas propagantes no sentido positivo e negativo do eixo não homogêneo.

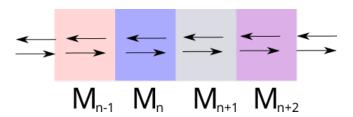


Fig. 3. Representação esquemática do método da matriz de transferência. As setas simbolizam componentes dos campos propagantes no sentido positivo e negativo do eixo em questão, e cada bloco n, composto por materiais distintos, é representado por uma matriz de transferência M_n .

Considerando um sistema contínuo por partes, conforme a figura 3 mostra, construímos a matriz de transferência M_n para cada bloco rotulado por n, conforme a relação:

$$\begin{pmatrix} \psi^{+}(x_{n+1}) \\ \psi^{-}(x_{n+1}) \end{pmatrix} = M_n \begin{pmatrix} \psi^{+}(x_n) \\ \psi^{-}(x_n) \end{pmatrix}$$
 (6)

onde $\psi^\pm(x)$ simboliza a componente elétrica ou magnética da onda propagante, que dependerá se polarização s ou p, e o superscripto \pm o sentido da propagação. As coordenadas x_n e x_{n+1} marcam o início e o fim de cada bloco, caracterizado por uma dada função dielétrica ϵ_n , podendo também ter a presença de um material bidimensional na interface com condutividade σ_n .

A partir da matriz de transferência de cada bloco, a matriz de transferência total M_T é obtida pelo produto de todas

as matrizes. A partir daí, podemos obter os coeficientes de Fresnel a partir dos elementos de matriz de M_T . A vantagem do método da matriz de transferência é que permite o estudo de composição arbitrária de uma for mais simples.



Fig. 4. Representação esquemática de um emissor quântico próximo a uma folha de grafeno.

IV. RESULTADOS

Consideramos a disposição do emissor quântico conforme mostrado na Fig. 4, representado como um dipolo elétrico de momento μ . A presença do material bidimensional, grafeno, irá fazer com que as flutuações do vácuo do campo eletromagnético alteram a emissão espontânea conforme descrito pela Eq. (5). Nessa seção, consideramos o dipolo perpendicular à folha de grafeno, i.e., $\mu = (0,0,\mu_z)$.

Na Fig. 5, mostramos o fator de Purcell P/P_0 como função da frequência do emissor quântico ω para diferentes distâncias z_0 . Podemos ver que há um valor de máximo que depende da distância. O efeito Purcell decai conforme a distância e/ou a frequência aumenta. Porém, permanece em valores extremamentes elevados em toda a gama de frequências e distâncias consideradas.

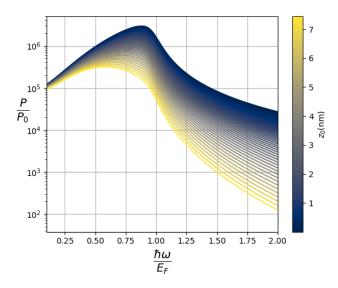


Fig. 5. Fator de de Purcell, P/P_0 , como função da frequência do emissor quântico ω para diferentes distâncias à folha de grafeno z_0 . Podemos ver que há um pico de emissão próximo de $\hbar\omega\approx E_F$.

Para explorar mais a dependência em relação a distância, mostramos na Fig. 6 como o valor de máximo fator de Purcell em função da frequência ω_m depende da distância z_0 , onde mostramos que há uma diminuição em uma ordem de magnitude quando o emissor deixa de estar localizado

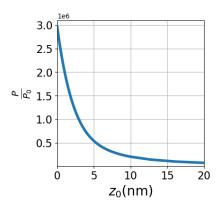


Fig. 6. Máximo fator de Purcell, P/P_0 , como função da distância do emissor quântico em relação à folha de grafeno.

exatamente acima da folha de grafeno e é colocado há uma distância de 20 nm.

Por fim, apresentamos a frequência do emissor quântico onde ocorre o máximo do fator de Purcell. Essa frequência diminui conforme a distância à folha de grafeno aumenta. Essa informação pode ser utilizada para, dado um emissor quântico, se determinar a distância óptima para a sua emissão e/ou, qual o nível de dopagem, expressado pela energia de Fermi, no grafeno, precisa ser escolhido.

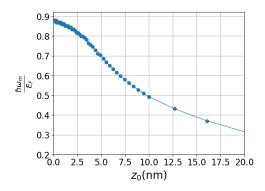


Fig. 7. Frequência onde se observa o máximo de fator de Purcell em função da distância do emissor quântico à folha de grafeno.

O aumento do fator de Purcell observado é devido ao grafeno suportar modos de plasmon-polaritons, conforme mostramos na Fig. 2. O acoplamento do emissor quântico com o grafeno é o responsável pelo comportamento discutido nessa seção.

V. CONCLUSÃO E PERSPECTIVAS

O código desenvolvido pelo grupo para a simulação desse tipo da propagação de ondas em heteroestruturas contendo materiais bidimensionais e o cálculo da taxa de emissão espontânea permite o estudo de sistemas variados. Temos como perspectiva para trabalhos futuros, expandir estudos passados para incluir o acoplamento com outros tipos de modos de superfície. De forma mais específica, será estudado o acoplamento de emissores quânticos com modos de superfície anisotrópicos, primeiro fônons-polaritons em hBN, e depois plasmon-polaritons e excitons-polaritons em fosforeno. Por fim, será estudado o efeito da presença de uma cavidade óptica na taxa de emissão de fótons. Também veremos o acoplamento com modos de Tamm-polaritons na interface entre um metal e

um cristal fotônico. O uso dos efeitos quânticos de plasmonpolaritons em grafeno, ou polaritons em outros materiais bidimensionais, é bastante promissor para viabilizar diversos tipos de tecnologias quânticas.

REFERENCES

- [1] N. Gisin and R. Thew, "Quantum communication," *Nature photonics*, vol. 1, no. 3, pp. 165–171, 2007.
- [2] C. Simon, "Towards a global quantum network," *Nature Photonics*, vol. 11, no. 11, pp. 678–680, Nov 2017. [Online]. Available: https://doi.org/10.1038/s41566-017-0032-0
- [3] J. Yin, Y. Cao, Y.-H. Li, S.-K. Liao, L. Zhang, J.-G. Ren, W.-Q. Cai, W.-Y. Liu, B. Li, H. Dai, G.-B. Li, Q.-M. Lu, Y.-H. Gong, Y. Xu, S.-L. Li, F.-Z. Li, Y.-Y. Yin, Z.-Q. Jiang, M. Li, J.-J. Jia, G. Ren, D. He, Y.-L. Zhou, X.-X. Zhang, N. Wang, X. Chang, Z.-C. Zhu, N.-L. Liu, Y.-A. Chen, C.-Y. Lu, R. Shu, C.-Z. Peng, J.-Y. Wang, and J.-W. Pan, "Satellite-based entanglement distribution over 1200 kilometers," *Science*, vol. 356, no. 6343, pp. 1140–1144, 2017. [Online]. Available: https://www.science.org/doi/abs/10.1126/science.aan3211
- [4] H.-K. Lo, M. Curty, and K. Tamaki, "Secure quantum key distribution," Nature Photonics, vol. 8, no. 8, pp. 595–604, Aug 2014. [Online]. Available: https://doi.org/10.1038/nphoton.2014.149
- [5] C. Bennett and G. Brassard, "Quantum cryptography: Public key distribution and coin tossing, proc. of ieee int. conf. on comput. sys. and sign. proces," 1984.
- Grosshans and Grangier. "Continuous variable states." Phys anantum cryptography using coherent Rev 057902, Jan 2002. Lett.. vol. 88. [Online]. Available: https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.88.057902
- [7] V. Mavroeidis, K. Vishi, M. D. Zych, and A. Jøsang, "The impact of quantum computing on present cryptography," *International Journal* of Advanced Computer Science and Applications, vol. 9, no. 3, 2018. [Online]. Available: http://dx.doi.org/10.14569/IJACSA.2018.090354
- [8] N. Gisin, G. Ribordy, W. Tittel, and H. Zbinden, "Quantum crypto-graphy," Rev. Mod. Phys., vol. 74, pp. 145–195, Mar 2002. [Online]. Available: https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.74.145
- [9] C. H. Bennett and G. Brassard, "Quantum cryptography: Public key distribution and coin tossing," *Theoretical Computer Science*, vol. 560, pp. 7–11, 2014.
- [10] A. K. Ekert, "Quantum cryptography based on bell's theorem," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 67, pp. 661–663, Aug 1991. [Online]. Available: https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.67.661
- [11] S. Takeuchi, "Recent progress in single-photon and entangled-photon generation and applications," *Japanese Journal of Applied Physics*, vol. 53, no. 3, p. 030101, 2014.
- [12] A. A. Maradudin, J. R. Sambles, and W. L. Barnes, *Modern plasmonics*. Elsevier, 2014.
- [13] P. A. D. Gonçalves and N. M. Peres, An introduction to graphene plasmonics. World Scientific, 2016.
- [14] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, "The electronic properties of graphene," *Rev. Mod. Phys.*, vol. 81, pp. 109–162, Jan 2009. [Online]. Available: https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.81.109
- [15] J. D. Caldwell, I. Aharonovich, G. Cassabois, J. H. Edgar, B. Gil, and D. Basov, "Photonics with hexagonal boron nitride," *Nature Reviews Materials*, vol. 4, no. 8, pp. 552–567, 2019.
- [16] S. M. et al., "2D Transition Metal Dichalcogenides," vol. 2, no. 8, pp. 17033–17047, jun 2017. [Online]. Available: https://www.nature.com/articles/natrevmats201733.pdf
- [17] F. Xia, H. Wang, J. C. Hwang, A. C. Neto, and L. Yang, "Black phosphorus and its isoelectronic materials," *Nature Reviews Physics*, vol. 1, no. 5, pp. 306–317, 2019.
- [18] B. A. Ferreira, B. Amorim, A. J. Chaves, and N. M. R. Peres, "Quantization of graphene plasmons," *Phys. Rev. A*, vol. 101, p. 033817, Mar 2020. [Online]. Available: https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.101.033817
- [19] G. Giuliani and G. Vignale, Quantum theory of the electron liquid. Cambridge university press, 2005.
- [20] A. J. C. Chaves, "Photonics of graphene and other two-dimensional materials heterostructures," Ph.D. dissertation, Universidade do Minho (Portugal), 2018.
- [21] Y. V. Bludov, A. Ferreira, N. M. Peres, and M. I. Vasilevskiy, "A primer on surface plasmon-polaritons in graphene," *International Journal of Modern Physics B*, vol. 27, no. 10, p. 1341001, 2013.
- [22] L. Novotny and B. Hecht, Principles of nano-optics. Cambridge university press, 2012.
- [23] P. Markos and C. M. Soukoulis, Wave propagation: from electrons to photonic crystals and left-handed materials. Princeton University Press, 2008.