

UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARÁ
INSTITUTO DE TECNOLOGIA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA ELÉTRICA

ANTENAS DE GRAFENO COM CONTROLE DE DIAGRAMA DE RADIAÇÃO:
PROJETO E MODELAGEM VIA MÉTODO FDTD

NILTON RODOLFO NASCIMENTO MELO RODRIGUES

DM 25 / 2015

UFPA / ITEC / PPGEE
Campus Universitário do Guamá
Belém-Pará-Brasil
2015

UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARÁ
INSTITUTO DE TECNOLOGIA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA ELÉTRICA

NILTON RODOLFO NASCIMENTO MELO RODRIGUES

ANTENAS DE GRAFENO COM CONTROLE DE DIAGRAMA DE RADIAÇÃO:
PROJETO E MODELAGEM VIA MÉTODO FDTD

DM 25 / 2015

UFPA / ITEC / PPGEE
Campus Universitário do Guamá
Belém-Pará-Brasil
2015

UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARÁ
INSTITUTO DE TECNOLOGIA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA ELÉTRICA

NILTON RODOLFO NASCIMENTO MELO RODRIGUES

ANTENAS DE GRAFENO COM CONTROLE DE DIAGRAMA DE RADIAÇÃO:
PROJETO E MODELAGEM VIA MÉTODO FDTD

Dissertação submetida à
Banca Examinadora do Programa
de Pós-Graduação em Engenha-
ria Elétrica da UFPA para a
obtenção do Grau de Mestre em
Engenharia Elétrica na área de
Telecomunicações.

UFPA / ITEC / PPGEE
Campus Universitário do Guamá
Belém-Pará-Brasil
2015

Dados Internacionais de Catalogação-na-Publicação (CIP)
Sistema de Bibliotecas da UFPA

Rodrigues, Nilton Rodolfo Nascimento Melo, 1990-

Antenas de grafeno com controle de diagrama de radiação: projeto e modelagem via método fdtd / Nilton Rodolfo Nascimento Melo Rodrigues. - 2015.

Orientador: Rodrigo Melo e Silva de Oliveira;

Coorientador: Victor Alexandrovich Dmitriev.

Dissertação (Mestrado) - Universidade Federal do Pará, Instituto de Tecnologia, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Elétrica, Belém, 2015.

1. Campos eletromagnéticos - modelos matemáticos. 2. Diferenças finitas. 3. Carbono - materiais. I. Título.

CDD 22. ed. 530.141

**“ANTENAS DE GRAFENO COM CONTROLE DE DIAGRAMA DE RADIAÇÃO:
PROJETO E MODELAGEM VIA METODO FDTD”**

AUTOR: NILTON RODOLFO NASCIMENTO MELO RODRIGUES

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO SUBMETIDA À BANCA EXAMINADORA APROVADA PELO COLEGIADO DO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA ELÉTRICA, SENDO JULGADA ADEQUADA PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE MESTRE EM ENGENHARIA ELÉTRICA NA ÁREA DE TELECOMUNICAÇÕES.

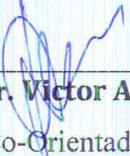
APROVADA EM: 28/08/2015

BANCA EXAMINADORA:



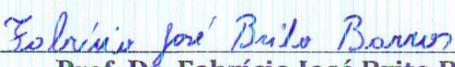
Prof. Dr. Rodrigo Melo e Silva de Oliveira

(Orientador – PPGEE/UFPA)



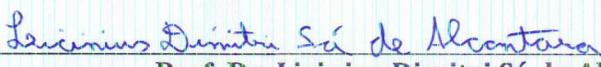
Prof. Dr. Victor Alexandrovich Dmitriev

(Co-Orientador – PPGEE/UFPA)



Prof. Dr. Fabrício José Brito Barros

(Avaliador Externo ao Programa – CAMTUC/UFPA)



Prof. Dr. Licinius Dimitri Sá de Alcantara

(Avaliador Externo - UFRA)

VISTO:

Prof. Dr. Evaldo Gonçalves Pelaes
(Coordenador do PPGEE/ITEC/UFPA)

*A Deus e aos meus pais
Raimundo Rodrigues
(em memória) e Sônia Melo.*

Agradecimentos

Agradeço a Deus por ter sido tão bom comigo durante este período de mestrado e por colocar em meu caminho todas as pessoas que contribuíram direta e indiretamente para a construção deste trabalho – em especial, as que são abaixo citadas.

Agradeço à mulher que faz de tudo para a minha educação e cuidado: à minha mãe Sônia Melo. Deixo também um agradecimento especial à minha querida avó Raimunda e aos meus tios Selma e Roberto. Ao restante de minha família e aos amigos da igreja: obrigado! Um abraço aos meus amigos e irmãos Anderson, Eduardo, Janyson, Renan, Victor e Wirley.

À Ediene, minha amada noiva, por todo o carinho, compreensão, paciência e companheirismo durante este tempo de mestrado. Você é muito especial para mim, princesa.

Ao estimado professor Rodrigo que, além de um excepcional orientador, tem contribuído grandemente para o meu desenvolvimento profissional. Obrigado por sua orientação e pelo privilégio de trabalhar e aprender com o senhor no LEMag (Laboratório de Eletromagnetismo). Gostaria também de registrar os meus agradecimentos a cada colega do LEMag: Brazão, Daiyuki, Daniel, Elisson, Lorena, Ramon, Pedro, Reinaldo, Rodrigo Paiva, Washington e Weliton.

Agradeço, também, ao prof. Victor por todo o apoio dado em sua coorientação neste trabalho. Aproveito para agradecer ao Clerisson, Ewerton, Gustavo, André e todo o pessoal do Laboratório de Nanofotônica e Nanoeletrônica.

Não posso deixar de agradecer a todos os meus professores do PPGEE e colegas de turma. Obrigado pelas boas experiências que tivemos juntos.

Agradeço à CAPES pela concessão de bolsa de mestrado e à comunidade de *software* livre que disponibilizou alguns dos excelentes recursos computacionais utilizados neste trabalho.

*“Sobre tudo o que se deve guardar, guarda o teu coração,
porque dele procedem as fontes da vida.”*

Provérbios 4.23

Lista de Símbolos

\vec{E}	Vetor Intensidade de Campo Elétrico
\vec{H}	Vetor Intensidade de Campo Magnético
\vec{J}	Vetor Densidade de Corrente Elétrica
\vec{B}	Vetor Densidade de Fluxo Magnético
ϵ	Permissividade Elétrica
μ	Permeabilidade Magnética
σ	Condutividade Elétrica
t	Tempo
x, y e z	Coordenadas do Sistema Cartesiano
D_x, D_y e D_z	Componentes de \vec{D}
B_x, B_y e B_z	Componentes de \vec{B}
$\frac{\partial f}{\partial \alpha}$	Derivada Parcial de f em relação a α
(i, j, k)	Endereçamento no Espaço Discretizado
n	Índice Temporal
\mathbf{j}	$\sqrt{-1}$
Δ_x, Δ_y e Δ_z	Incrementos Espaciais
Δ_t	Incremento Temporal
$\nabla \times \vec{P}$	Operador Rotacional de \vec{P}
$V(t)$ e $I(t)$	Sinais Temporais de Tensão e Corrente
$\tilde{V}(f)$ e $\tilde{I}(f)$	Transformadas de Fourier de $V(t)$ e $I(t)$
Γ	Coefficiente de Reflexão
RL	Perda de Retorno
\hat{x}, \hat{y} e \hat{z}	Versores do Sistema de Coordenadas Cartesiano
\hat{k}_x, \hat{k}_y e \hat{k}_z	Versores do Espaço Recíproco

ω	Frequência Angular
f	Frequência
λ	Comprimento de Onda
E_F	Nível de Fermi
v_F	Velocidade de Fermi
m	Massa
H	Operador Hamiltoniano
\vec{k}	Vetor de Onda
ψ	Função de Onda
Γ	Taxa de Espalhamento
τ_0	Tempo de Relaxação
q_e	Carga do Elétron
k_B	Constante de Boltzmann
T	Temperatura
\hbar	Constante de Planck Reduzida
μ_c	Potencial Químico

Lista de Siglas

FDTD	<i>Finite-Difference Time-Domain</i>
CPML	<i>Convolutional Perfectly Matched Layer</i>
HFSS	<i>High Frequency Structure Simulator</i>
FEM	<i>Finite Element Method</i>
SPP	<i>Surface Plasmons Polaritons</i>
PLRC	<i>Piecewise Linear Recursive Convolution</i>
TM	<i>Transverse Magnetic</i>

Lista de Ilustrações

- 2.1 (a) Ilustração da estrutura geométrica do grafite (adaptada de [25]) e (b) ilustração da formação de três alótropos do carbono a partir do grafeno (adaptada de [1]). 6
- 2.2 Rede direta do grafeno. Os pontos representam os átomos de carbono e as linhas cheias indicam as ligações covalentes. As letras A e B representam a base da rede, constituída por dois átomos (adaptada de [24]). 9
- 2.3 Rede recíproca do grafeno. A primeira zona de Brillouin está destacada em azul (adaptada de [24]). 11
- 2.4 Configuração eletrônica dos átomos de carbono: (a) no estado fundamental e (b) no grafeno (adaptada de [24]). (c) Ilustração dos orbitais sp^2 e p ; e (d) formação de ligações covalentes σ e π (adaptada de [32]). (e) Rede cristalina do grafeno, com destaque para os orbitais sp^2 (em amarelo) e o orbital p (em azul) de cada átomo de sua estrutura (adaptada de [34]). . . 12
- 2.5 Estrutura de bandas do grafeno: (a) em duas dimensões (adaptada de [35]), (b) em três dimensões, (c) em baixas energias (cones de Dirac) (adaptadas de [27]) e (d) com inclusão das bandas σ (adaptada de [24]). 14
- 2.6 Comparação simplificada entre as estruturas de bandas dos materiais metálicos, semicondutores e isolantes. 15

2.7	<i>Setup</i> experimental utilizado no experimento envolvendo a aplicação de tensão de porta V_g : (a) e (b) (adaptadas de [26]). (c) Curva de resistividade ρ do grafeno em função de V_g e ilustração de que o nível de Fermi é alterado com a modificação de V_g (adaptada de [1]).	17
2.8	Diagrama esquemático de como variar o potencial químico μ_c de uma folha de grafeno via: (a) método químico, (b) campo elétrico uniforme e (c) tensão de <i>gate</i> (adaptada de [41]).	20
2.9	Célula de Yee e a disposição das componentes de campo elétrico e magnético.	23
3.1	Exemplo de malha temporal utilizada no método FDTD.	30
3.2	Fluxograma do algoritmo para geração de resultados, com uso da formulação FDTD proposta.	33
4.1	Antena de grafeno [3] modelada para validação do método proposto.	35
4.2	Grafeno modelado no espaço FDTD: (a) uma parte da folha no espaço 3D e (b) duas folhas de grafeno, os eletrodos A e B (PEC) e a fonte de corrente. E_x e E_y são as componentes de campo elétrico nas folhas de grafeno.	35
4.3	Sinais transitórios: (a) correntes totais que fluem para o eletrodo B e (b) tensões no <i>gap</i>	36
4.4	Validação do método proposto: curvas das partes real (RE) e imaginária (IM) das impedâncias das antenas 1 e 2.	37
4.5	Distribuição de corrente nas folhas de grafeno para a antena 1, $f = 1,02$ THz.	38
4.6	Antena bow-tie de grafeno: (a) geometria e distribuição de corrente, $f = 0,90$ THz e (b) impedância Z	39
4.7	(a) Geometria da antena proposta para controle do diagrama de radiação. (b) Malha computacional utilizada no HFSS, (c) com destaque em uma região que contém um eletrodo metálico.	41

4.8	Impedância de entrada da antena proposta: (a) parte real e (b) parte imaginária.	43
4.9	Perda de retorno da antena proposta, com $\mathbf{Z}_0 = \mathbf{Z}_{fotodiodo} = 25 \Omega$	44
4.10	Diagrama de radiação para as configurações 1 e 2, na frequência de 1,84 THz, nos planos: (a) $\theta = 90^\circ$, (b) $\phi = 0^\circ$ e (c) $\phi = 90^\circ$. Em todos os casos, $\mu_{c0} = 0,3$ eV.	46
4.11	Diagrama de radiação para as configurações 1 e 3, na frequência de 1,84 THz, nos planos: (a) $\theta = 90^\circ$, (b) $\phi = 0^\circ$ e (c) $\phi = 90^\circ$. Em todos os casos, $\mu_{c0} = 0,3$ eV.	47
4.12	Distribuição de corrente do dispositivo nas configurações (a) 1, (b) 2 e (c) 3.	48
4.13	Comparação entre a impedância da configuração 1 calculada pelo método FEM e a obtida por meio do FDTD: (a) parte real e (b) parte imaginária.	50
4.14	Comparação entre as impedâncias das configurações 2 e 3 calculadas pelo método FEM e as obtidas por meio do FDTD: (a) parte real e (b) parte imaginária.	51

Lista de Tabelas

4.1	Lista de configurações do dispositivo.	42
4.2	Características do dispositivo em cada configuração: eficiência total, dire- tividade, relação frente-costa e ganho.	48

Sumário

1	Introdução	1
2	Fundamentação teórica	4
2.1	Grafeno	4
2.1.1	Considerações iniciais	4
2.1.2	Estrutura cristalina	7
2.1.3	Propriedades eletrônicas	10
2.1.4	Modelagem numérica de antenas de grafeno	17
2.2	O método das diferenças finitas no domínio do tempo (FDTD)	20
2.2.1	A célula de Yee e as equações de Maxwell	21
2.2.2	Precisão e estabilidade	24
2.2.3	A truncagem do método FDTD por CPML	25
3	Formulação FDTD desenvolvida	29
3.1	Formulação matemática	29
4	Resultados	34
4.1	Validação da formulação numérica proposta	34
4.1.1	Ajuste da frequência de ressonância	38
4.2	Antena de grafeno com controle dinâmico do diagrama de radiação	40
4.2.1	Descrição do projeto e do sistema de funcionamento	40

4.2.2	Validação adicional da formulação proposta	47
5	Considerações finais	52
5.1	Conclusão e sugestões de trabalhos futuros	52
5.2	Publicação gerada	53

Resumo

Neste trabalho, é desenvolvida uma formulação matemática para representar folhas de Grafeno no grid 3D utilizado para resolver as equações de Maxwell com o algoritmo de Yee. A técnica, válida para a faixa de intrabanda, é baseada em convoluções recursivas e na técnica de planos finos (*thinsheets*). O *software* HFSS é utilizado para projetar, pela primeira vez, antenas de grafeno com controle dinâmico da direção do lóbulo principal de radiação através do potencial eletroquímico de folhas de grafeno utilizadas como elementos passivos. O método numérico desenvolvido neste trabalho concorda muito bem com os resultados obtidos via HFSS (que é baseado no método dos elementos finitos).

Palavras-chave: Antenas de Grafeno, Método FDTD, convolução recursiva, técnica *thin sheets*, método para controle do diagrama de radiação.

Abstract

In this work, it is developed a mathematical formulation for modelling Graphene sheets in the three-dimensional lattice used to solve Maxwell's equations with Yee's algorithm. The technique is based on piecewise linear recursive convolution method and on thin material sheets technique, valid in intraband range. The HFSS software is used for to designing, for the first time, graphene antennas with dynamic control of the radiation pattern main lobe by tuning the chemical potential of graphene sheets used as passive elements. The numerical method developed in this work fully agrees with the results obtained by using HFSS (this one is based on the Finite Element Method).

Keywords: Graphene antennas, FDTD method, Recursive convolution, thin sheets technique, dynamic radiation pattern control method.

Capítulo 1

Introdução

O grafeno consiste em átomos de carbono arranjados em uma rede hexagonal bidimensional em forma de favo de mel, formando uma folha com a espessura de um átomo [1]. Devido às suas potenciais aplicações, este material recentemente tem atraído bastante interesse em pesquisa em muitos campos de tecnologia [2], incluindo nanofotônica e particularmente em antenas que operam em terahertz [3–6]. As principais características atrativas do grafeno são a possibilidade de reconfigurabilidade espectral dinâmica (pela modificação do potencial químico) [5], relativamente baixas perdas na banda de terahertz (em relação a metais) [7] e a possibilidade de miniaturizar antenas (perto de 6% do comprimento de onda no espaço livre) devido a efeitos plasmônicos [3]. Considerou-se um regime de sinais com pequenas amplitudes, em que a influência do campo eletromagnético relativo a modos de plasmons polaritons de superfície (*surface plasmons polaritons* - SPP) no potencial químico do grafeno é negligenciável.

Dessa forma, a condutividade do grafeno é geralmente modelada pelo formalismo de Kubo, o qual pode incluir as componentes da intrabanda e da interbanda [8]. Um dos desafios nos cálculos numéricos de tais estruturas são as diferentes escalas de dimensões dos dispositivos reais. O comprimento e a largura de dispositivos podem ser de 3 a 4 ordens maiores que suas espessuras [3–5, 9, 10]. Em muitos trabalhos publicados recentemente acerca de antenas de grafeno e tópicos relacionados, cálculos foram efetuados

por alguns simuladores comerciais [3–5]. Tais cálculos requerem uma quantidade considerável de recursos computacionais por causa dos altos níveis de discretização necessários para representar folhas de grafeno. Além disso, esses simuladores geralmente são baseados em técnicas no domínio da frequência, em que uma simulação é executada para cada frequência de interesse. Em contraste, com técnicas no domínio do tempo a resposta impulsiva de uma dada estrutura pode ser obtida com a execução de uma única simulação [11].

Recentemente, o modelo de linha de transmissão (TLM) [12] e modelos analíticos no domínio do tempo [13] têm sido aplicados para modelagem de dispositivos de grafeno. Um método amplamente conhecido, poderoso e ainda relativamente simples em eletrodinâmica computacional é o método das Diferenças Finitas no Domínio do Tempo (FDTD) [11]. Recentemente, o FDTD tem sido usado para modelagem de dispositivos baseados em grafeno [9,10]. Em [9], uma formulação da condutividade do grafeno baseada em múltiplos pares complexos conjugados de resíduos de pólos é apresentada. Em [10], uma técnica de condição de contorno superficial precisa é proposta para modelagem de folhas de grafeno posicionadas nos planos do campo magnético da célula de Yee (explorando o modo TM no grafeno). Entretanto, o uso das componentes de \vec{H} pode dificultar o estabelecimento de tensões e correntes controladas entre duas (ou mais) folhas de grafeno, devido à natureza da célula de Yee [11], na qual as componentes de campo não são posicionadas no mesmo ponto do espaço.

Neste trabalho, desenvolveu-se uma formulação FDTD baseada nas técnicas de convolução recursiva linear por intervalos (PLRC) [14] e de planos finos [15] para incluir o grafeno nos planos das células de Yee com as componentes de campo elétrico tangenciais às folhas. Isso é possível porque o modo plasmônico no grafeno também é caracterizado por densidades de corrente tangenciais [4,8]. A formulação proposta possui duas vantagens principais: 1) ela é matematicamente muito simples e precisa; e 2) soluções numéricas corretas são obtidas para folhas de grafeno posicionadas nos planos paralelos às compo-

mentos do campo \vec{E} nas células de Yee, simplificando a modelagem FDTD de dispositivos fotônicos alimentados por fontes de tensão ou corrente. Além disso, o *software* HFSS foi utilizado para cálculo de características de uma antena de grafeno que possui controle dinâmico do diagrama de radiação. A referida antena é uma proposta inédita aqui concebida. Nesse contexto, destaca-se que antenas de grafeno são bastante interessantes para uso na comunicação entre dispositivos nanoeletrônicos a pequenas distâncias [16–18].

O presente trabalho é formado por cinco Capítulos organizados da seguinte maneira:

- No Capítulo 1, a organização geral do trabalho é apresentada;
- No Capítulo 2, apresenta-se a fundamentação teórica relacionada tanto ao grafeno quanto ao método FDTD;
- No Capítulo 3, descreve-se a formulação FDTD proposta neste trabalho;
- No Capítulo 4, os resultados obtidos via simulação numérica são apresentados;
- No Capítulo 5, por fim, são feitas as considerações finais deste trabalho.

Capítulo 2

Fundamentação teórica

2.1 Grafeno

2.1.1 Considerações iniciais

O grafeno é um material artificial, termodinamicamente estável, que possui uma rede cristalina bidimensional (2D) formada apenas por átomos de carbono dispostos em uma estrutura hexagonal, na forma de favo de mel [1]. Logo, o grafeno possui a espessura de um átomo de carbono.

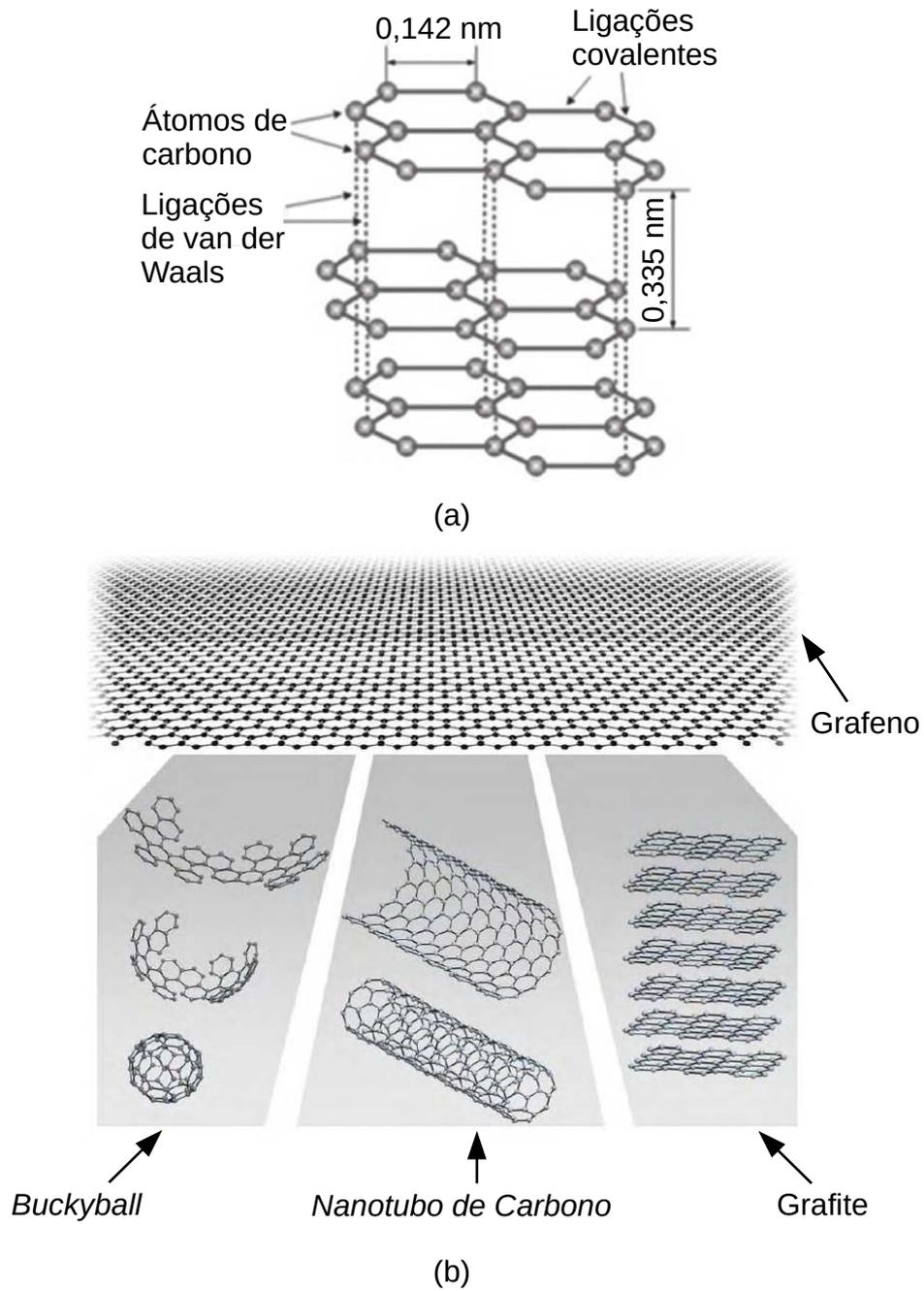
Como constituinte do grafite, cuja estrutura cristalina tridimensional (3D) é construída por várias folhas de grafeno empilhadas umas sobre as outras (Fig. 2.1), o grafeno vinha sendo utilizado apenas como ferramenta de estudo teórico de propriedades do grafite [19–21] e de outros materiais compostos de carbono, desde o trabalho publicado em 1947 por Wallace [19]; o qual determinou a estrutura de bandas do grafite, em uma abordagem inicial, considerando a condução de elétrons no material apenas na direção longitudinal às camadas de grafeno que o constituem. Nesta abordagem, as interações entre folhas de grafeno foram desprezadas pelo fato do espaçamento entre planos ($3,35 \text{ \AA}$) ser grande em relação à distância entre dois átomos de carbono vizinhos e coplanares ($1,42 \text{ \AA}$) no grafite [19], conforme ilustrado na Fig. 2.1(a) ($1 \text{ \AA} = 0,1 \text{ nm}$).

É importante notar que o grafeno é o material-base na formação de outros alótropos do carbono, tais como: o *buckyball* (ou fullereno) C_{60} , estrutura com o formato de uma bola de futebol (icosaedro truncado), constituída por 60 átomos de carbono dispostos em 12 pentágonos e 20 hexágonos, na qual cada átomo se posiciona em um dos vértices do sólido e realiza duas ligações covalentes simples e uma dupla [22]; e o nanotubo de carbono, em que os átomos de carbono estão arrançados em uma estrutura cilíndrica (mais precisamente, poliédrica), com diâmetro da ordem de 0,5 a 5 nm e comprimento da ordem de micrômetros a centímetros [23, 24], de acordo com a Fig. 2.1(b).

No entanto, até os primeiros anos do século XXI, a comunidade científica considerava pouco provável a possibilidade de se obter o grafeno de maneira isolada, pois pensava-se que tal material 2D não fosse estável, o que levaria à formação de estruturas curvas, tais como fuligem, fullereno ou nanotubo de carbono [1]. Esse pensamento era proveniente dos argumentos apresentados por Peierls e Landau, segundo os quais não era possível a existência de cristais estritamente bidimensionais, já que eles seriam termodinamicamente instáveis; de modo que a flutuação térmica destruiria a ordem da longa disposição de átomos de carbono, ocasionando a fundição da rede cristalina bidimensional [1, 25].

Porém, no ano de 2004, para o começo de uma nova era da ciência, os pesquisadores Geim, Novoselov e seus colaboradores publicaram o primeiro trabalho acerca da obtenção experimental do grafeno [26]. No experimento realizado por eles, primeiramente efetuou-se o processo de esfoliação mecânica, com uso de fita adesiva, para extração de camadas de uma cristal de grafite (cujo princípio é semelhante ao de escrever em uma folha de papel com lápis, de maneira mais controlada). Após isto, as finas camadas de grafite presentes na fita adesiva eram transferidas para um substrato composto de silício e óxido de silício [25, 26]. Com uso de microscopia ótica, a qual permite a análise dos fragmentos ultrafinos de grafite depositados no substrato, foi possível isolar e identificar um único plano de átomos de carbono. Então, pela primeira vez, as propriedades intrínsecas do grafeno foram caracterizadas [25, 26]. Desta forma, deu-se início ao que se pode chamar

Figura 2.1: (a) Ilustração da estrutura geométrica do grafite (adaptada de [25]) e (b) ilustração da formação de três alótropos do carbono a partir do grafeno (adaptada de [1]).



de “a corrida de ouro do grafeno” [1]. Por causa de seus experimentos inovadores sobre o grafeno, os pesquisadores Geim e Novoselov foram os vencedores do prêmio Nobel de Física em 2010.

O grande entusiasmo por parte da comunidade científica na realização de pesquisas sobre o grafeno deve-se às características extraordinárias que ele possui. Dentre estas, têm-se que: embora seja extremamente fino, com espessura aproximadamente igual ao espaçamento entre duas camadas consecutivas no grafite ($\sim 0,34$ nm) [24, 25], o grafeno possui grande rigidez mecânica e, ao mesmo tempo, é altamente flexível. Além disso, este material apresenta boa transparência ótica e alta condutividade térmica [27]. Por isso, o grafeno tem sido considerado um ótimo candidato para ser utilizado em novas tecnologias nas áreas de Física, Química, Biologia e Engenharia [2, 25].

2.1.2 Estrutura cristalina

A análise da estrutura cristalina do grafeno é fundamental para o estudo de suas propriedades físicas. Tal análise pode ser realizada tanto no espaço da posição (ou direto), cuja unidade é o metro (m), quanto no espaço recíproco (ou de Fourier), o qual se relaciona com a periodicidade da rede direta e possui o inverso do metro (m^{-1}) como unidade. O estudo de características de um cristal em dois domínios tem a mesma ideia da análise de um sinal nos domínios do tempo e da frequência, através do uso de transformadas de Fourier [24].

Rede direta

Os cristais são definidos por arranjos periódicos de átomos. A estrutura cristalina de um material pode ser descrita em termos de uma célula unitária, formada por uma rede e um grupo de átomos, denominado base, conectados uns aos outros nesta rede. Pela repetição da célula unitária, a estrutura do cristal pode ser construída sem sobreposição de pontos [28, 29]. A rede cristalina de um material é classificada como uma rede de Bravais se, a partir de qualquer um de seus átomos, a disposição dos pontos observada em todas as direções é exatamente a mesma. A posição de todos os pontos de rede (átomos) pode ser determinada em função de vetores de translação, chamados de vetores

de rede primitiva. Estes vetores são determinados a partir de combinações lineares dos vetores-base primitivos definidos pela célula unitária da rede cristalina [24, 29].

A rede direta do grafeno pode ser considerada uma rede de Bravais com base de dois átomos A e B [24, 27], em que cada átomo de carbono está ligado com outros três átomos vizinhos mais próximos, conforme indicado na Fig. 2.2. Observa-se que a rede do grafeno é formada pela sobreposição de duas sub-redes triangulares (Fig. 2.2). Além disso, a Fig. 2.2 ilustra, também, a célula unitária da rede (em linha tracejada) definida por um paralelogramo equilátero de aresta $a = a_{cc}\sqrt{3} = 2,46 \text{ \AA}$, em que $a_{cc} = 1,42 \text{ \AA}$ é a distância entre dois átomos de carbono vizinhos. Então, os vetores-base primitivos da rede são definidos por

$$\vec{a}_1 = \frac{\sqrt{3}a}{2}\hat{x} + \frac{a}{2}\hat{y}$$

e

$$\vec{a}_2 = \frac{\sqrt{3}a}{2}\hat{x} - \frac{a}{2}\hat{y}.$$

Para exemplificar o uso de vetores de rede primitiva, a Fig. 2.2 indica os vetores que descrevem a distância entre um átomo do tipo A e seus três vizinhos mais próximos, dados por [24, 30]:

$$\vec{R}_1 = \frac{a}{\sqrt{3}}\hat{x},$$

$$\vec{R}_2 = -\vec{a}_2 + \vec{R}_1 = \frac{a}{2}\left(-\frac{1}{\sqrt{3}}\hat{x} + \hat{y}\right)$$

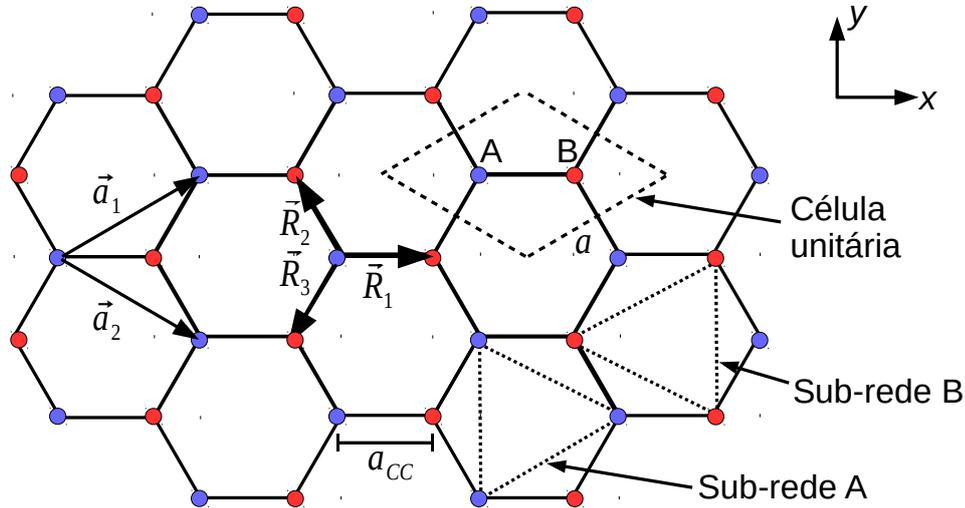
e

$$\vec{R}_3 = -\vec{a}_1 + \vec{R}_1 = \frac{a}{2}\left(-\frac{1}{\sqrt{3}}\hat{x} - \hat{y}\right).$$

Rede recíproca

A periodicidade do arranjo de átomos de um cristal estabelece a situação ideal para que as suas propriedades sejam analisadas a partir de transformadas de Fourier. Dessa

Figura 2.2: Rede direta do grafeno. Os pontos representam os átomos de carbono e as linhas cheias indicam as ligações covalentes. As letras A e B representam a base da rede, constituída por dois átomos (adaptada de [24]).



forma, tem-se que a rede recíproca de um material é definida pela transformada de Fourier discreta de sua rede direta [24, 31]. A análise de um material no domínio recíproco é realizada por diversos motivos, dentre os quais têm-se que: a rede recíproca facilita a interpretação de dados relacionados à difração de feixes de radiação; a partir da rede recíproca, é possível efetuar cálculos que envolvem superfícies ou planos da rede cristalina; e a rede recíproca auxilia na análise de ondas com propagação no interior do cristal, quer de elétrons ou de vibrações da rede [29, 31]. Dentro do escopo deste trabalho, destaca-se a importância da rede recíproca na determinação da estrutura de bandas de materiais.

A rede recíproca do grafeno, descrita em termos do vetor de onda \vec{k} , consiste em uma estrutura hexagonal, rotacionada em 90° em relação à rede direta. A célula unitária de Wigner-Seitz¹ no espaço recíproco define a região mais importante para o cálculo das bandas de energia permitidas no material. Esta região é chamada de primeira zona de Brillouin, na qual há três pontos de alta simetria que são importantes no estudo da relação

¹Embora seja possível construir mais de uma célula unitária em uma rede cristalina, a célula unitária de Wigner-Seitz é amplamente utilizada porquanto ela é obtida através de um processo de geometria [24, 29].

de dispersão (estrutura de bandas) do grafeno. Tais pontos são chamados de Γ (no centro), M (no ponto médio de suas arestas) e K (nos seus vértices)², conforme indicado na Fig.

2.3. Os vetores de rede recíproca são dados pelas relações

$$\vec{\mathbf{b}}_1 = \frac{2\pi}{\sqrt{3}a}\hat{k}_x + \frac{2\pi}{a}\hat{k}_y$$

e

$$\vec{\mathbf{b}}_2 = \frac{2\pi}{\sqrt{3}a}\hat{k}_x - \frac{2\pi}{a}\hat{k}_y,$$

os quais são obtidos aplicando-se operações de álgebra vetorial sobre os vetores \vec{a}_1 e \vec{a}_2 [24, 31]. Além disso, tomando-se por base a Fig. 2.3, as distâncias entre o centro Γ e os pontos K, K' e M são dadas, respectivamente, pelos vetores

$$\vec{\mathbf{K}} = \frac{2\pi}{\sqrt{3}a}\hat{k}_x + \frac{2\pi}{3a}\hat{k}_y,$$

$$\vec{\mathbf{K}}' = \frac{2\pi}{\sqrt{3}a}\hat{k}_x - \frac{2\pi}{3a}\hat{k}_y$$

e

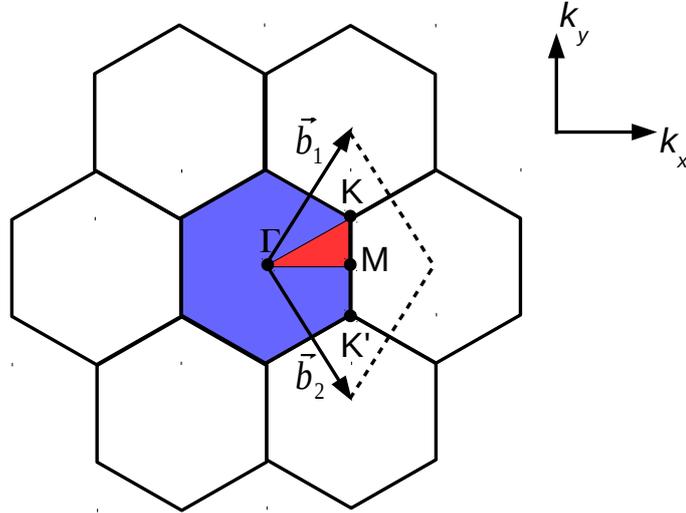
$$\vec{\mathbf{M}} = \frac{2\pi}{\sqrt{3}a}\hat{k}_x.$$

2.1.3 Propriedades eletrônicas

Os seis elétrons do átomo de carbono estão distribuídos na configuração eletrônica: $1s^2 2s^2 2p^2$. A sua primeira camada eletrônica é completamente preenchida com dois elétrons de *spin* opostos (representados pelas setas que apontam para cima e para baixo na Fig. 2.4) e, no estado fundamental, os quatro elétrons de valência do carbono ocupam os orbitais $2s$ e $2p$. No entanto, quando os átomos de carbono formam ligações químicas, os seus elétrons de valência interagem e formam diferentes distribuições, segundo os conceitos de *promoção* e *hibridização* introduzidos por Linus Pauling [32, 33].

²K' é utilizado na Fig. 2.3 somente para destacar outro vértice do hexágono. Entretanto, às vezes faz-se distinção entre os pontos K e K', particularmente em estudos relacionados a vibrações de rede [24].

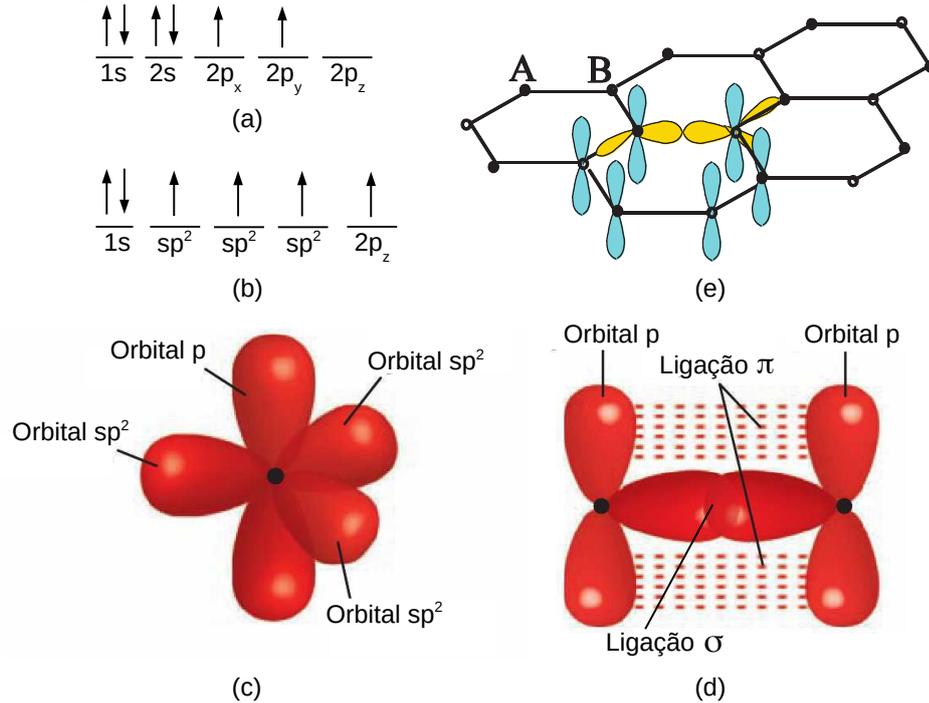
Figura 2.3: Rede recíproca do grafeno. A primeira zona de Brillouin está destacada em azul (adaptada de [24]).



Para a construção da estrutura cristalina do grafeno, primeiramente, a configuração eletrônica de cada um de seus átomos se torna: $1s^2 2s^1 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^1$. Ou seja, um dos elétrons de valência do orbital $2s$ (do átomo de carbono em seu estado fundamental) é promovido (excitado) ao orbital $2p_z$, de maior energia. Após isso, a interação entre o orbital $2s$ e os orbitais $2p_x$ e $2p_y$ resulta em três novos orbitais hibridizados sp^2 (Fig. 2.4(b)) [24,33]. Os orbitais sp^2 , separados por ângulos de 120° entre si, distribuem-se paralelamente ao plano que contém o arranjo de átomos e o orbital p é perpendicular à folha de grafeno, tal como ilustrado na Fig. 2.4(c). Portanto, cada átomo de carbono da rede cristalina do grafeno participa de três ligações covalentes do tipo σ , originadas por meio da sobreposição dos orbitais sp^2 , e de uma ligação covalente do tipo π , resultante da interação entre os orbitais p (Fig. 2.4(d)). Os elétrons estão mais fracamente ligados aos átomos de carbono nas ligações π do que nas ligações σ . Por isso, os elétrons π possuem papel fundamental na física do grafeno [24,33]. A Fig. 2.4(e) ilustra a rede cristalina do grafeno, enfatizando os padrões das nuvens eletrônicas relacionadas aos orbitais sp^2 e $2p_z$.

As propriedades eletrônicas do grafeno são determinadas a partir de sua estrutura de bandas, a qual descreve a energia $E(\vec{k})$ dos seus estados eletrônicos em função do vetor

Figura 2.4: Configuração eletrônica dos átomos de carbono: (a) no estado fundamental e (b) no grafeno (adaptada de [24]). (c) Ilustração dos orbitais sp^2 e p ; e (d) formação de ligações covalentes σ e π (adaptada de [32]). (e) Rede cristalina do grafeno, com destaque para os orbitais sp^2 (em amarelo) e o orbital p (em azul) de cada átomo de sua estrutura (adaptada de [34]).



de onda \vec{k} . Esta análise em função de \vec{k} fundamenta-se no comportamento ondulatório dos elétrons. Devido ao caráter periódico do espaço recíproco, a relação de dispersão do grafeno é caracterizada na primeira zona de Brillouin e, por simetria, nas linhas definidas pelas arestas do triângulo de vértices K, Γ e M (Fig. 2.3). A Fig. 2.5 ilustra os níveis de energia dos estados π e π^* . A existência de dois estados relacionados aos orbitais $2p_z$, em que π^* é chamado de antiligação de π , deve-se ao fato da célula unitária da rede direta do grafeno possuir dois átomos (A e B). Os estados π pertencem à banda de valência (localizada abaixo do nível de Fermi E_F) e os estados π^* fazem parte da banda de condução, localizada acima de E_F ³. No grafeno, estas duas bandas se interceptam

³O nível de Fermi é o nível de energia do maior estado ocupado por elétrons de um sólido em repouso,

nos pontos K (K') da primeira zona de Brillouin [27]. Esta é uma das características mais importantes da estrutura de bandas do grafeno, porquanto ela descreve algumas das principais propriedades físicas deste material.

Primeiro, a baixas energias, isto é, em níveis próximos ao nível de Fermi E_F , as bandas π e π^* apresentam a relação de dispersão linear

$$E_{\text{grafeno}\pm} = \pm v_F \hbar k, \quad (2.1)$$

em que $v_F \approx 1 \times 10^6$ m/s é a velocidade de Fermi, \hbar a constante de Planck reduzida (J.s) e $k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$ o módulo do vetor de onda \vec{k} [27, 30]. Além disso, o espectro eletrônico possui a forma de dois cones que se interceptam nos seis pontos K, chamados de pontos de Dirac (Fig. 2.5(c)). Esta nomenclatura dada aos vértices da primeira zona de Brillouin deve-se ao fato da equação (2.1) possuir a mesma forma (linear) da relação de dispersão das partículas relativísticas de Dirac, dada por

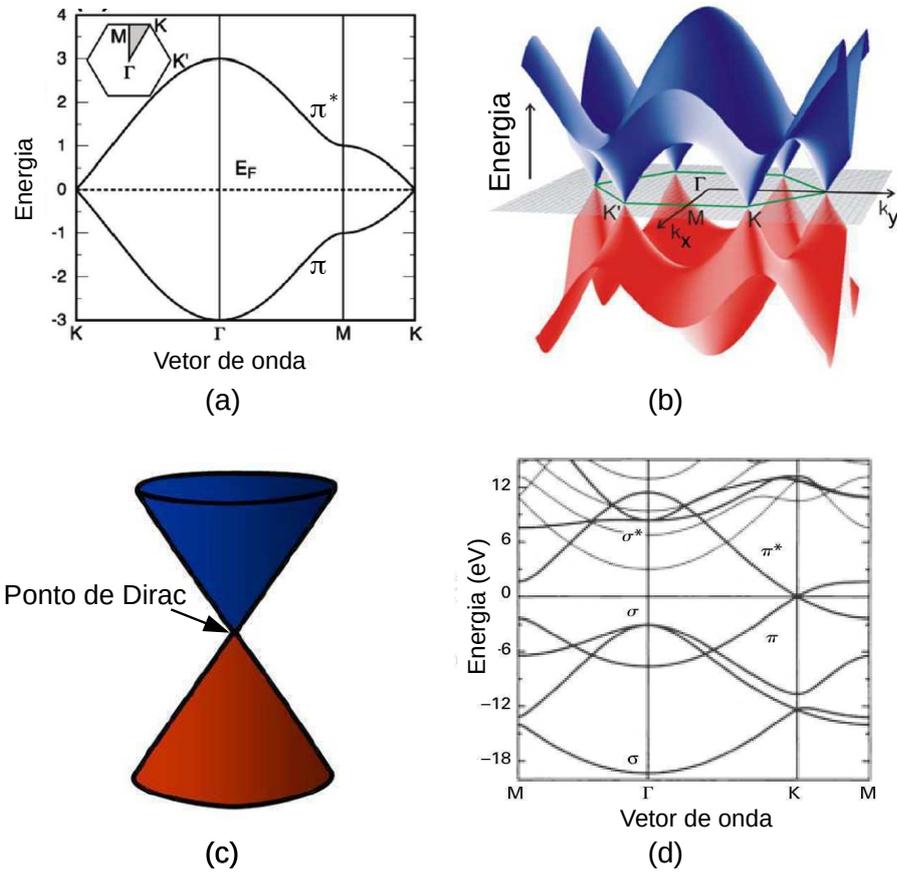
$$E_{\pm} = \pm \sqrt{m^2 c^4 + \hbar^2 k^2 c^2}, \quad (2.2)$$

em que m é a massa da partícula e $c \approx 3 \times 10^8$ m/s a velocidade da luz no vácuo, quando $m = 0$.

Portanto, no grafeno, os elétrons se propagam como partículas de Dirac (férmions) sem massa (o movimento deles não possui inércia, por apresentarem massa efetiva nula) à velocidade de Fermi, a qual é 300 vezes menor que a velocidade da luz [24, 27, 30, 33]. Por causa desta propriedade espetacular, o grafeno pode ser utilizado em antenas transmissoras (ou receptoras) de sinais elétricos de comprimentos de onda da ordem de micrômetros, que operam em frequências de alguns THz. Por exemplo, para emitir um sinal de $\lambda = 1 \mu\text{m}$ em uma antena de grafeno, a frequência de operação da antena seria de 1 THz, pois $f = v_F/\lambda$. Entretanto, em uma antena convencional, a frequência deveria ser de $f = 300$ THz.

à temperatura $T = 0$ K.

Figura 2.5: Estrutura de bandas do grafeno: (a) em duas dimensões (adaptada de [35]), (b) em três dimensões, (c) em baixas energias (cones de Dirac) (adaptadas de [27]) e (d) com inclusão das bandas σ (adaptada de [24]).

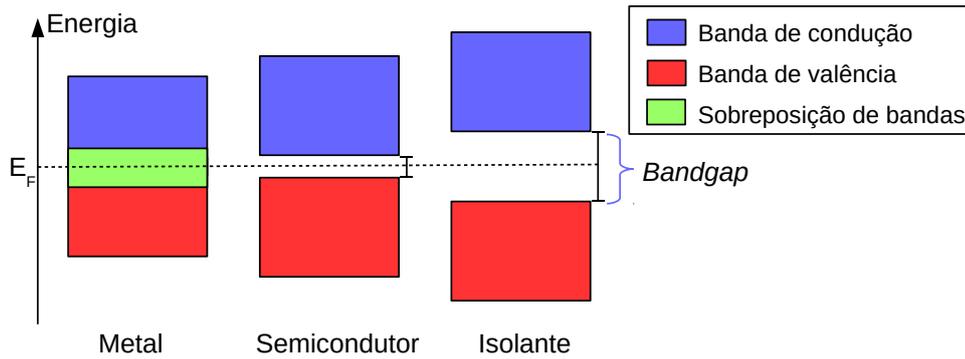


A intercepção das bandas de valência e condução nos pontos de Dirac implica, também, na caracterização do grafeno como um material semimetálico (ou semiconductor de *gap* nulo) [24,27,33]. Esta propriedade do material fundamenta-se no fato de que: nos metais, há sobreposição das bandas de condução e valência para alguns valores de energia; nos semicondutores, existe um *bandgap* entre estas bandas; e nos materiais isolantes, o *bandgap* é bem maior que nos semicondutores⁴ [29,36]. A Fig. 2.6 ilustra a estrutura de bandas típica destas classes de materiais. Com essas ideias em mente, tem-se que os elétrons dos estados π são os que participam mais facilmente da condução de corrente elétrica no

⁴O *bandgap* nos semicondutores pode ser da ordem de 1 eV e nos isolantes, da ordem de 3,5 a 6 eV ou mais [36].

grafeno, visto que a energia necessária para excitá-los de forma a transferi-los da banda de valência para estados pertencentes à banda de condução é muito menor (nula nos pontos de Dirac) que o *bandgap* existente para os estados σ [24], de acordo com a Fig. 2.5(d).

Figura 2.6: Comparação simplificada entre as estruturas de bandas dos materiais metálicos, semicondutores e isolantes.



Vale ressaltar que o cálculo da relação de dispersão do grafeno pode ser efetuado por meio de técnicas de primeiros princípios [24, 37] ou através de métodos aproximados [24, 38]. É comum o uso do método *tight-binding* na realização dos cálculos envolvidos, no qual considera-se apenas as interações eletrônicas de cada átomo com os seus vizinhos mais próximos, conforme descrito em [24, 30, 37, 38]. Nesta aproximação, o operador Hamiltoniano H relacionado à energia do sistema, utilizado na resolução da equação de Schrödinger independente do tempo [24]

$$H\psi(\vec{k}, \vec{r}) = E(\vec{k})\psi(\vec{k}, \vec{r}), \quad (2.3)$$

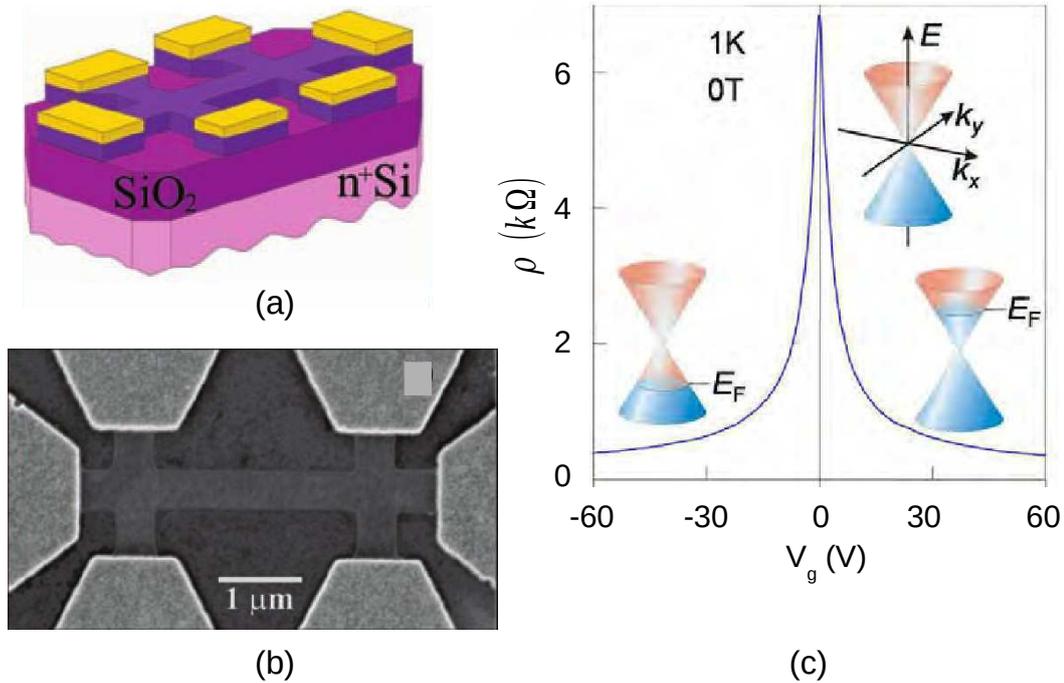
pode ser escrito em termos dos níveis de energia V_{intra} , V_{σ} e $V_{pp\pi}$ [37], os quais são definidos da seguinte maneira: V_{intra} é a energia característica dos elétrons que oscilam entre diferentes orbitais no mesmo átomo (intrabanda); V_{σ} é a energia relacionada com a oscilação dos elétrons entre as duas sub-redes (A e B) ao longo dos orbitais planares (interbanda); e $V_{pp\pi}$ é a energia devido à oscilação de elétrons entre duas sub-redes com orbitais perpendiculares ao plano.

Outra propriedade importante do grafeno é a possibilidade de alteração das suas características de transporte através da aplicação de uma tensão de porta V_g (*gate*). Isto foi observado por Geim e Novoselov [1,26] através do experimento realizado a partir do *setup* indicado nas Figs. 2.7(a) e 2.7(b). Este experimento consistiu em medir a resistividade de uma amostra de grafeno, em uma estrutura cuja a geometria está ilustrada na Fig. 2.7(a), disposta sobre um substrato formado por uma camada de silício dopado (camada condutora) e por outra de óxido de silício (camada isolante), utilizando contatos elétricos de ouro para medição de corrente elétrica entre estes terminais (de ouro). Dessa forma, verificou-se que, para altos valores de V_g (aplicada entre as camadas condutora e isolante do substrato), a resistividade do grafeno decai de valores da ordem de $k\Omega$ para valores próximos a 100Ω , de acordo com o gráfico apresentado na Fig. 2.7(c). Observa-se que ao invés de ser $\Omega.m$, como no caso 3D, a unidade da resistividade superficial do grafeno é Ω [26].

Então, tem-se que a condutividade elétrica ($\sigma = 1/\rho$) do grafeno pode ser controlada a partir do valor de V_g , porquanto a aplicação desta tensão elétrica altera o potencial eletroquímico do grafeno. Do ponto de vista da estrutura de bandas, a variação do potencial químico da folha de grafeno modifica a posição do nível de Fermi E_F e, portanto, gera uma pequena sobreposição entre as bandas de condução e valência, o que facilita o transporte de portadores de carga (elétrons ou buracos⁵) neste material [1, 26, 27]. Dessa forma, conforme ilustrado na Fig. 2.7(c), o nível de Fermi é deslocado para um nível de energia maior quando $V_g > 0$, o que implica na indução de elétrons para estados localizados na banda de condução. Dualmente, o nível de Fermi é deslocado para baixo e o transporte no grafeno é baseado em buracos quando $V_g < 0$ [26, 27].

⁵Em resumo, um buraco é um portador de carga positiva localizado em estados desocupados por elétrons, quando estes são excitados da banda de valência para a de condução [36].

Figura 2.7: *Setup* experimental utilizado no experimento envolvendo a aplicação de tensão de porta V_g : (a) e (b) (adaptadas de [26]). (c) Curva de resistividade ρ do grafeno em função de V_g e ilustração de que o nível de Fermi é alterado com a modificação de V_g (adaptada de [1]).



2.1.4 Modelagem numérica de antenas de grafeno

Por causa de suas propriedades interessantes e incomuns, o grafeno tem sido objeto de pesquisa em várias áreas de ciência e tecnologia. Em especial, devido às suas excelentes características de transporte eletrônico, há grande ênfase no estudo relacionado à utilização do grafeno na implementação de antenas e dispositivos que operam em frequências ultra-altas. Particularmente, espera-se que o grafeno (em um futuro próximo) possibilite uma revolução na eletrônica, de modo que seja possível construir dispositivos em escala nanométrica baseados em grafeno (e não em silício), com características adequadas para o funcionamento na faixa de terahertz [25, 39].

Nesse contexto, antenas de grafeno com dimensões da ordem de alguns micrômetros

possuem papel fundamental na emissão e na recepção de sinais na faixa do infravermelho, pelo fato de possuírem efeitos plasmônicos que as possibilitam irradiar ondas eletromagnéticas na banda de frequências de 0,1 a 10 THz [39], com eficiência de radiação maior que a de antenas metálicas que operam nesta região do espectro eletromagnético. Além de que, conforme a breve discussão realizada na seção 2.1.3, esta faixa de frequências é aproximadamente duas ordens de grandeza menor que a banda de frequências na qual uma antena metálica, de mesmas dimensões, opera (possui ressonância). Dessa forma, o grafeno possibilita o processo de miniaturização de antenas. A Fig. 4.1 ilustra a geometria de uma das antenas de grafeno que são analisadas no Capítulo 4.

O princípio de funcionamento das antenas de grafeno, no modo de recepção, é descrito a seguir [3, 39]. A interação com uma onda eletromagnética, que incide perpendicularmente à estrutura da antena, fornece energia aos elétrons livres da folha de grafeno e, então, estes participam da condução de corrente. Por causa dessa interação, modos plasmônicos superficiais (SPP), na interface entre a camada de grafeno e o substrato, também são excitados na faixa de terahertz. Além disso, no modo de transmissão, ao excitar a folha de grafeno (pertencente à antena) com uma corrente variante no tempo, uma onda plasmônica é gerada na interface com a camada dielétrica do material.

A condutividade elétrica do grafeno relaciona-se diretamente com as suas propriedades de radiação e, por isso, muitas análises de antenas de grafeno têm sido realizadas através de métodos numéricos que envolvem modelos de tal parâmetro eletromagnético. O uso de métodos numéricos no estudo de características de dispositivos fotônicos é essencial, pois, através de tais métodos, pode-se realizar inúmeras análises de um dispositivo, em diversos *setups* computacionais (cenários), antes da confecção de protótipos físicos. Isto reduz o custo financeiro envolvido no número total de execuções de experimentos reais, porque o *software* em que se realiza a análise numérica funciona como um laboratório virtual.

Conforme apresentado em [8], o grafeno pode ser representado por um plano de espessura infinitesimal caracterizado por uma condutividade superficial $\sigma(\omega, \mu_c, \Gamma, T)$, dada

por:

$$\sigma(\omega, \mu_c, \Gamma, T) = \frac{\mathbf{j}q_e^2(\omega - \mathbf{j}2\Gamma)}{\pi\hbar^2} \left[\frac{1}{(\omega - \mathbf{j}2\Gamma)^2} \int_0^\infty \varepsilon \left(\frac{\partial f_d(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} - \frac{\partial f_d(-\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \right) d\varepsilon + \int_0^\infty \frac{f_d(-\varepsilon) - f_d(\varepsilon)}{(\omega - \mathbf{j}2\Gamma)^2 - 4(\varepsilon/\hbar)^2} d\varepsilon \right], \quad (2.4)$$

a qual resulta do formalismo de Kubo [8, 40], sendo que o primeiro termo da equação deve-se às contribuições da intrabanda e o segundo termo refere-se às contribuições da interbanda. Na equação (2.4), têm-se que: ω é a frequência angular, μ_c o potencial químico, Γ a taxa de espalhamento, T a temperatura, $\mathbf{j} = \sqrt{-1}$, q_e a carga do elétron, \hbar a constante de Planck reduzida, ε a energia e $f_d(\varepsilon) = \left(e^{(\varepsilon - \mu_c)/k_B T} + 1 \right)^{-1}$ a distribuição de Fermi-Dirac, na qual k_B é a constante de Boltzmann.

O termo de (2.4) relacionado à intrabanda do grafeno pode ser calculado pela equação [8]:

$$\sigma_{intra}(\omega, \mu_c, \Gamma, T) = -\mathbf{j} \frac{q_e^2 k_B T}{\pi \hbar^2 (\omega - \mathbf{j}2\Gamma)} \left(\frac{\mu_c}{k_B T} + 2 \ln \left(1 + e^{-\mu_c/k_B T} \right) \right). \quad (2.5)$$

As partes real e imaginária deste termo atendem às relações: $\sigma'_{intra} \geq 0$ e $\sigma''_{intra} < 0$, sendo $\sigma_{intra} = \sigma'_{intra} + \mathbf{j}\sigma''_{intra}$. Para o termo que indica as contribuições da interbanda, no entanto, tem-se uma função em forma fechada apenas para o caso em que $k_B T \ll |\mu_c|$, dada por [8]

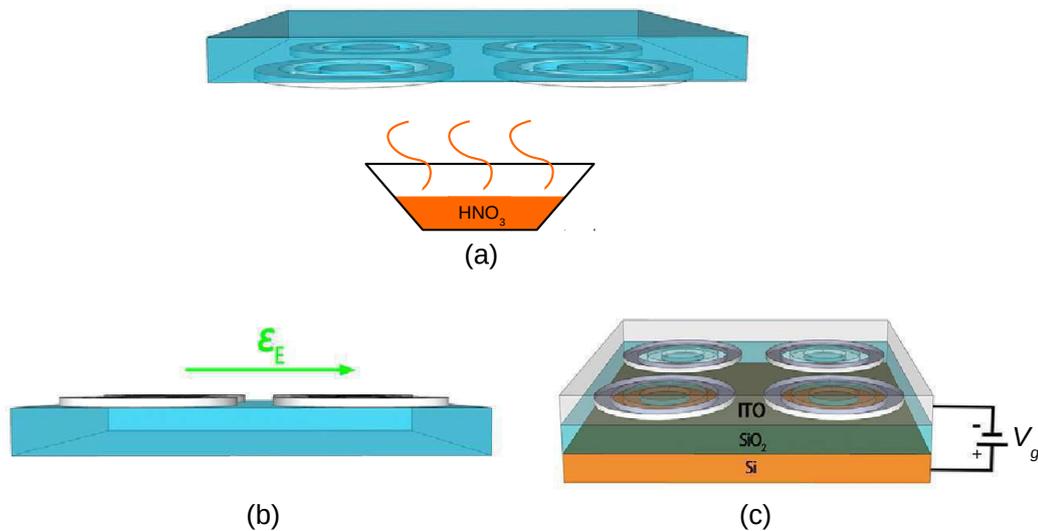
$$\sigma_{inter}(\omega, \mu_c, \Gamma, T) \approx \frac{-\mathbf{j}q_e^2}{4\pi\hbar} \ln \left(\frac{2|\mu_c| - (\omega - \mathbf{j}2\Gamma)\hbar}{2|\mu_c| + (\omega - \mathbf{j}2\Gamma)\hbar} \right). \quad (2.6)$$

A parte imaginária deste termo segue a relação: $\sigma''_{inter} > 0$, para $\mu_c \neq 0$ [8].

De acordo com a descrição apresentada na seção 2.1.3, a condutividade do grafeno pode ser alterada através do ajuste do valor do potencial químico μ_c por meio da aplicação de uma tensão de polarização (campo elétrico externo), conforme ilustrado na Fig. 2.8. Como consequência disto, pode-se modificar o valor da frequência de ressonância de antenas baseadas em grafeno por meio da variação de μ_c . Por isso, os pontos de operação das antenas de grafeno podem ser reconfigurados dinamicamente através do valor do potencial

químico [5]. Esta característica do grafeno é explorada, neste trabalho, no projeto de uma antena reconfigurável dinamicamente, que opera na faixa de terahertz.

Figura 2.8: Diagrama esquemático de como variar o potencial químico μ_c de uma folha de grafeno via: (a) método químico, (b) campo elétrico uniforme e (c) tensão de *gate* (adaptada de [41]).



2.2 O método das diferenças finitas no domínio do tempo (FDTD)

No ano de 1965, Frank Harlow desenvolveu e implementou computacionalmente um método de diferenças finitas para solucionar equações diferenciais que descrevem o movimento de fluidos compressíveis, conforme trabalho desenvolvido em [42]. Depois de um ano do trabalho apresentado por Frank Harlow, Kane Yee desenvolveu um algoritmo que soluciona as equações rotacionais de Maxwell no domínio do tempo de forma prática e eficiente, também utilizando diferenças finitas [43]. Para atender às leis de Faraday e Ampère, o método de Yee considera uma distribuição geométrica (espacial) discretizada das componentes do campo elétrico \vec{E} e do campo magnético \vec{H} ; e utiliza

aproximações centradas para as derivadas temporais e espaciais por diferenças finitas, produzindo equações explícitas para a atualização temporal das componentes de campo. Com estas características, o método gera soluções de onda completa. O método de Yee, que é conhecido hoje por *Finite-Difference Time-Domain method* (FDTD) [11] passou então a ser difundido no meio científico e também aperfeiçoado, como a introdução do critério de estabilidade, conforme trabalho desenvolvido em [44] e de técnicas de truncagem do espaço de análise [45].

No método FDTD, o conjunto de componentes de campo nas equações de Maxwell é atualizado a cada passo de tempo, de forma que os valores de campo de um instante atual fornecem os valores para cálculo de campos em um instante futuro. Com essa discretização, os problemas considerados de difícil solução analítica, devido às geometrias de diferentes características e condições de contorno distintas, tornam-se problemas discretos simples e de implementação computacional relativamente fácil. Portanto, a importância dos métodos numéricos consiste no fato de que apenas problemas simples em eletromagnetismo podem ser solucionados analiticamente.

2.2.1 A célula de Yee e as equações de Maxwell

Considerando um meio isotrópico, não-dispersivo e com perdas elétricas, a propagação eletromagnética pode ser modelada utilizando-se as equações de Maxwell em sua forma diferencial no domínio do tempo. As equações rotacionais de Maxwell são dadas por:

$$\nabla \times \vec{E} = -\mu \frac{\partial \vec{H}}{\partial t} \quad (2.7)$$

e

$$\nabla \times \vec{H} = \epsilon \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} + \sigma \vec{E}, \quad (2.8)$$

em que \vec{E} é o vetor intensidade de campo elétrico (V/m), \vec{H} é o vetor intensidade de campo magnético (A/m), $\vec{J} = \sigma \vec{E}$ é o vetor densidade de corrente elétrica (A/m²) e ϵ , μ e

σ são, respectivamente, os parâmetros eletromagnéticos do meio: permissividade elétrica (F/m), permeabilidade magnética (H/m) e condutividade elétrica (S/m).

A lei de Faraday (2.7) descreve como a circulação de campo elétrico produz variação temporal do campo magnético. A lei de Ampère (2.8), corrigida por Maxwell, é dual a (2.7) e leva em consideração as perdas ôhmicas. Expandindo as equações (2.7) e (2.8) em coordenadas retangulares, têm-se:

$$\frac{\partial H_x}{\partial t} = \frac{1}{\mu} \left(\frac{\partial E_y}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial y} \right), \quad (2.9)$$

$$\frac{\partial H_y}{\partial t} = \frac{1}{\mu} \left(\frac{\partial E_z}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial z} \right), \quad (2.10)$$

$$\frac{\partial H_z}{\partial t} = \frac{1}{\mu} \left(\frac{\partial E_x}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial x} \right) \quad (2.11)$$

e

$$\frac{\partial E_x}{\partial t} = \frac{1}{\epsilon} \left(\frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z} - \sigma E_x \right), \quad (2.12)$$

$$\frac{\partial E_y}{\partial t} = \frac{1}{\epsilon} \left(\frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial x} - \sigma E_y \right), \quad (2.13)$$

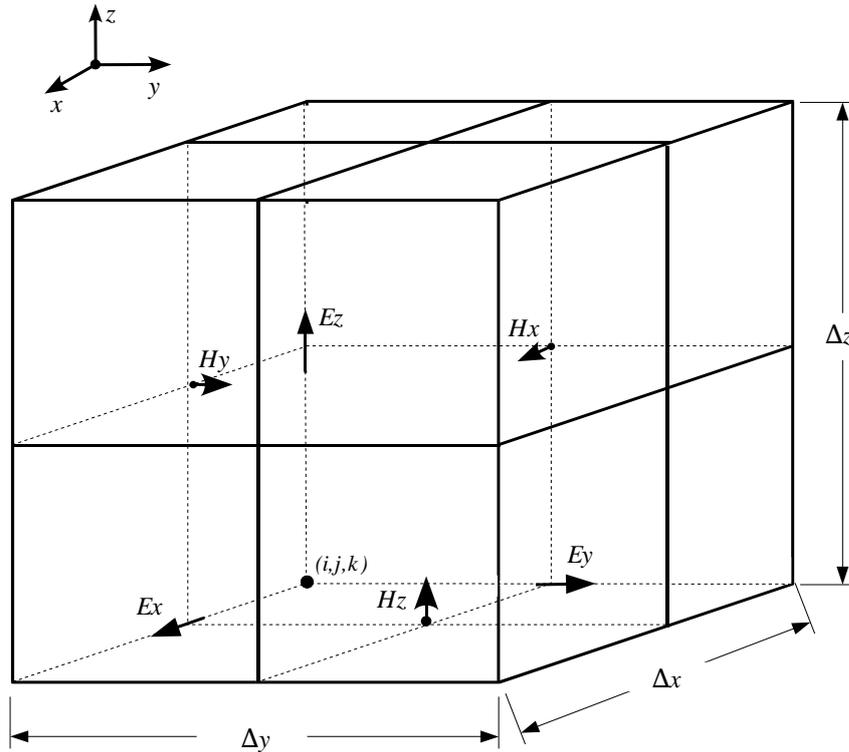
$$\frac{\partial E_z}{\partial t} = \frac{1}{\epsilon} \left(\frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} - \sigma E_z \right), \quad (2.14)$$

nas quais E_x, E_y, E_z e H_x, H_y, H_z são as componentes do vetor intensidade de campo elétrico e do vetor intensidade de campo magnético, respectivamente. Todas as componentes estão em função do tempo t e das coordenadas espaciais x, y e z .

O algoritmo de Yee discretiza as equações de Maxwell no tempo e no espaço, de modo a facilitar os cálculos. A solução destas equações é obtida partindo-se da representação da região de análise do problema por um conjunto de paralelepípedos, denominados células de Yee. Em cada célula do domínio de análise, as componentes de campo elétrico estão localizadas no centro das arestas e as de campo magnético no centro de suas faces, de acordo com a Fig. 2.9. A posição (x, y, z) dos pontos da região de análise é dada pelas coordenadas $x = i\Delta x$, $y = j\Delta y$ e $z = k\Delta z$, sendo (i, j, k) a posição discreta de uma

célula de Yee do domínio e Δx , Δy e Δz os incrementos espaciais relativos a x , y e z , respectivamente. Verifica-se, também, que as componentes de campo magnético são defasadas no tempo das componentes de campo elétrico pelo intervalo $\Delta t/2$, em que Δt é o incremento temporal.

Figura 2.9: Célula de Yee e a disposição das componentes de campo elétrico e magnético.



As equações de atualização para as componentes cartesianas de \vec{E} e \vec{H} são obtidas a partir da célula de Yee [43] e da aproximação centrada das derivadas [44]. Para efeito de exemplificação, as componentes x dos campos elétrico e magnético podem ser aproximadas por:

$$E_{x(i+\frac{1}{2},j,k)}^{n+1} = E_{x(i+\frac{1}{2},j,k)}^n \left(\frac{1 - \sigma \frac{\Delta t}{2\epsilon}}{1 + \sigma \frac{\Delta t}{2\epsilon}} \right) +$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{\Delta_t}{\epsilon \left(1 + \sigma \frac{\Delta_t}{2\epsilon}\right)} \left[\frac{H_z^{n+\frac{1}{2}}(i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}, k) - H_z^{n+\frac{1}{2}}(i+\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}, k)}{\Delta_y} \right] \\
& - \frac{\Delta_t}{\epsilon \left(1 + \sigma \frac{\Delta_t}{2\epsilon}\right)} \left[\frac{H_y^{n+\frac{1}{2}}(i+\frac{1}{2}, j, k+\frac{1}{2}) - H_y^{n+\frac{1}{2}}(i+\frac{1}{2}, j, k-\frac{1}{2})}{\Delta_z} \right]
\end{aligned} \tag{2.15}$$

e

$$\begin{aligned}
& H_x^{n+\frac{1}{2}}(i, j+\frac{1}{2}, k+\frac{1}{2}) = H_x^{n-\frac{1}{2}}(i, j+\frac{1}{2}, k+\frac{1}{2}) + \\
& + \frac{\Delta_t}{\mu} \left[\frac{E_y^n(i, j+\frac{1}{2}, k+1) - E_y^n(i, j+\frac{1}{2}, k)}{\Delta_z} - \frac{E_z^n(i, j+1, k+\frac{1}{2}) - E_z^n(i, j, k+\frac{1}{2})}{\Delta_y} \right].
\end{aligned} \tag{2.16}$$

2.2.2 Precisão e estabilidade

É necessário atender a condições que garantam precisão e estabilidade para assegurar que os valores computados através do método FDTD convirjam para a solução analítica, minimizando a dispersão numérica. As aproximações nos cálculos criam erros que são propagados, acumulando desvios de fase e de magnitude que, em certas condições, impedem que fenômenos físicos sejam representados adequadamente [46]. Desta forma, é preciso estabelecer critérios para que as equações (2.15)-(2.16) convirjam para a solução exata. Este processo está relacionado aos incrementos espaciais Δ_x , Δ_y e Δ_z , juntamente com o incremento temporal Δ_t .

Para garantir a precisão e minimizar estes efeitos numéricos de dispersão, deve-se ter pelo menos 10 células para representar o menor comprimento de onda propagante λ_{min} [47], o qual é dado por

$$\lambda_{min} = \frac{v_{min}}{f_{max}}, \tag{2.17}$$

em que v_{min} é a velocidade mínima de propagação da onda no espaço de análise e f_{max} a máxima frequência com energia significativa no espectro do pulso propagante. Então, o

incremento espacial obedece ao seguinte critério:

$$\Delta x, y, z \leq \frac{\lambda_{min}}{10}. \quad (2.18)$$

O incremento temporal Δt , que está associado com a máxima distância que a onda irá percorrer dentro da célula, neste caso a diagonal, pode ser representado pela condição de Courant [48]:

$$\Delta t < \frac{1}{v_{max} \sqrt{\frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2} + \frac{1}{\Delta z^2}}}, \quad (2.19)$$

na qual $v_{max} = 1/\sqrt{\mu_{min}\epsilon_{min}}$ é a velocidade máxima da onda eletromagnética na região de análise. A condição (2.19) é demonstrada para o método FDTD por Taflove e Brodwin em [44].

2.2.3 A truncagem do método FDTD por CPML

Para que problemas abertos de eletromagnetismo sejam solucionados numericamente, usando somente as equações mostradas na seção anterior, são necessárias malhas com quantidades infinitas de células, além de um número infinito de iterações. Logo, este processo seria inviável computacionalmente. Em virtude disso, foram propostas técnicas de truncagem, aplicadas geralmente nas bordas ou limites da malha computacional para evitar reflexões. Com a truncagem, a propagação da onda eletromagnética se comporta de tal forma que a onda é absorvida nos limites da malha computacional, pois ao incidir na fronteira a onda sofre atenuação e praticamente não retorna à região de análise. As técnicas apresentadas em [49], [50] e [51] são conhecidas como ABCs (*Absorbing Boundary Conditions*) e algumas são chamadas de PML (*Perfectly Matched Layer*), pois baseiam-se na ideia de camadas perfeitamente casadas com a região de análise.

Neste trabalho, a absorção das ondas foi feita por meio da técnica CPML [45] (*Convolutional Perfectly Matched Layer*). Uma das vantagens dessa técnica é que as ondas são absorvidas em meios isotrópicos e homogêneos, bem como em meios não homogêneos, dispersivos, com perdas ou meios anisotrópicos não-lineares. Além disso, a CPML apresenta

economia de memória em comparação com a terminação de uma formulação tradicional da PML [45].

Na formulação CPML, realiza-se um mapeamento complexo das coordenadas espaciais. No domínio da frequência, a equação (2.12) adquirida pela lei de Ampère, é dada por

$$\mathbf{j}\omega\epsilon\mathbf{E}_x + \sigma\mathbf{E}_x = \frac{1}{s_y} \frac{\partial\mathbf{H}_z}{\partial y} - \frac{1}{s_z} \frac{\partial\mathbf{H}_y}{\partial z}, \quad (2.20)$$

em que s_l é uma função da frequência, originalmente proposta por Berenger, definida pela equação:

$$s_l = 1 + \frac{\sigma_l}{\mathbf{j}\omega\epsilon_0}, \quad (l = x, y \text{ ou } z). \quad (2.21)$$

A equação (2.20) é então transformada para o domínio do tempo, e obtém-se:

$$\epsilon \frac{\partial E_x}{\partial t} + \sigma E_x = \bar{s}_y(t) * \frac{\partial H_z}{\partial y} - \bar{s}_z(t) * \frac{\partial H_y}{\partial z} \quad (2.22)$$

na qual $\bar{s}_l(t)$ é a transformada inversa de Fourier da função s_l^{-1} [45] e $*$ denota a operação de convolução.

No lado direito da equação (2.22) é utilizado o método de convolução recursiva, originalmente proposto por Luebbers, *et al* [52]. O método da CPML baseia-se na introdução da função \bar{s}_l nas equações de Maxwell no domínio do tempo, conforme definido em (2.22). Para garantir absorção de sinais de baixa frequência, (2.21) é modificada para a seguinte expressão [45]:

$$s_l = \kappa_l + \frac{\sigma_l}{\alpha_l + \mathbf{j}\omega\epsilon_0}, \quad (l = x, y \text{ ou } z) \quad (2.23)$$

onde α_l e σ_l são assumidos como reais e positivos e κ_l é real e maior ou igual a 1.

Em seguida, usando-se a teoria da transformada de Fourier, pode-se mostrar que $\bar{s}_l(t)$ é dada por:

$$\bar{s}_l(t) = \frac{\delta(t)}{\kappa_l} - \frac{\sigma_l}{\epsilon_0\kappa_l^2} \exp\left[-\left(\frac{\sigma_l}{\epsilon_0\kappa_l} + \frac{\alpha_l}{\epsilon_0}\right)t\right] u(t) = \frac{\delta(t)}{\kappa_l} + \zeta_l(t), \quad (2.24)$$

em que $\delta(t)$ é a função impulso unitário e $u(t)$ a função degrau. A partir de (2.22) e de (2.24), obtém-se, no domínio do tempo, a equação:

$$\epsilon_r \epsilon_0 \frac{\partial E_x}{\partial t} + \sigma E_x = \frac{1}{\kappa_y} \frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{1}{\kappa_z} \frac{\partial H_y}{\partial z} + \zeta_y(t) * \frac{\partial H_z}{\partial y} - \zeta_z(t) * \frac{1}{\kappa_z} \frac{\partial H_y}{\partial z}. \quad (2.25)$$

Para permitir a representação eficiente das convoluções em (2.25), a resposta discreta ao impulso para $\zeta_l(t)$ é definida por:

$$\begin{aligned} Z_{0_l}(m) &= \int_{m\Delta_t}^{(m+1)\Delta_t} \zeta_l(\tau) d\tau = -\frac{\sigma_l}{\epsilon_0 \kappa_l^2} \int_{m\Delta_t}^{(m+1)\Delta_t} \exp\left[-\left(\frac{\sigma_l}{\epsilon_0 \kappa_l} + \frac{\alpha}{\epsilon_0}\right)\tau\right] d\tau \\ &= a_l \exp\left[-\left(\frac{\sigma_l}{\kappa_l} + \alpha\right)\frac{m\Delta_t}{\epsilon_0}\right], \end{aligned} \quad (2.26)$$

na qual

$$a_l = \frac{\sigma_l}{(\sigma_l \kappa_l + \kappa_l^2 \alpha)} \left\{ \exp\left[-\left(\frac{\sigma_l}{\kappa_l} + \alpha\right)\frac{\Delta_t}{\epsilon_0}\right] - 1 \right\}. \quad (2.27)$$

Discretizando a equação (2.25) e utilizando (2.26) e (2.27), tem-se:

$$\begin{aligned} &\epsilon_r \epsilon_0 \frac{E_{x_{i+\frac{1}{2},j,k}}^{n+1} - E_{x_{i+\frac{1}{2},j,k}}^n}{\Delta_t} + \sigma \frac{E_{x_{i+\frac{1}{2},j,k}}^{n+1} + E_{x_{i+\frac{1}{2},j,k}}^n}{2} \\ &= \frac{H_{z_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}}^{n+\frac{1}{2}} - H_{z_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k}}^{n+\frac{1}{2}}}{\kappa_y \Delta_y} - \frac{H_{y_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}}^{n+\frac{1}{2}} - H_{y_{i+\frac{1}{2},j,k-\frac{1}{2}}}^{n+\frac{1}{2}}}{\kappa_z \Delta_z} \\ &+ \sum_{m=0}^{n-1} Z_{0_y}(m) \frac{H_{z_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}}^{n-m+\frac{1}{2}} - H_{z_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k}}^{n-m+\frac{1}{2}}}{\Delta_y} - \sum_{m=0}^{n-1} Z_{0_z}(m) \frac{H_{y_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}}^{n-m+\frac{1}{2}} - H_{y_{i+\frac{1}{2},j,k-\frac{1}{2}}}^{n-m+\frac{1}{2}}}{\Delta_z}. \end{aligned} \quad (2.28)$$

Cada convolução discreta em (2.28) é computacionalmente inviável, pois seria aplicada a todas as componentes de campo, de todas as células da CPML, e dependeria de todos os

instantes de tempo passados. Felizmente, a convolução recursiva proposta em [52] pode ser aplicada, devido à forma exponencial de $Z_{0_l}(m)$. Por fim, um conjunto de expressões auxiliares Ψ_l é introduzido e implementado em (2.28), da seguinte forma:

$$\begin{aligned}
& \epsilon_r \epsilon_0 \frac{E_{x_{i+\frac{1}{2},j,k}}^{n+1} - E_{x_{i+\frac{1}{2},j,k}}^n}{\Delta_t} + \sigma \frac{E_{x_{i+\frac{1}{2},j,k}}^{n+1} + E_{x_{i+\frac{1}{2},j,k}}^n}{2} \\
&= \frac{H_{z_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}}^{n+\frac{1}{2}} - H_{z_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k}}^{n+\frac{1}{2}}}{\kappa_y \Delta_y} - \frac{H_{y_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}}^{n+\frac{1}{2}} - H_{y_{i+\frac{1}{2},j,k-\frac{1}{2}}}^{n+\frac{1}{2}}}{\kappa_z \Delta_z} \\
& \quad + \Psi_{e_{xy}_{i+\frac{1}{2},j,k}}^{n+\frac{1}{2}} - \Psi_{e_{xz}_{i+\frac{1}{2},j,k}}^{n+\frac{1}{2}}, \tag{2.29}
\end{aligned}$$

sendo

$$\Psi_{e_{xy}_{i+\frac{1}{2},j,k}}^{n+\frac{1}{2}} = b_y \Psi_{e_{xy}_{i+\frac{1}{2},j,k}}^{n-\frac{1}{2}} + a_y \left(\frac{H_{z_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}}^{n+\frac{1}{2}} - H_{z_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k}}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta_y} \right), \tag{2.30}$$

$$\Psi_{e_{xz}_{i+\frac{1}{2},j,k}}^{n+\frac{1}{2}} = b_z \Psi_{e_{xz}_{i+\frac{1}{2},j,k}}^{n-\frac{1}{2}} + a_z \left(\frac{H_{y_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}}^{n+\frac{1}{2}} - H_{y_{i+\frac{1}{2},j,k-\frac{1}{2}}}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta_z} \right), \tag{2.31}$$

$$b_l = \exp \left[- \left(\frac{\sigma_l}{\kappa_l} + \alpha_l \right) \frac{\Delta_t}{\epsilon_0} \right] \quad (l = x, y \text{ ou } z) \tag{2.32}$$

e a_l dado por (2.27). Expressões similares são obtidas para os campos restantes.

Esta formulação é estável dentro do limite de Courant (2.19) para valores positivos de σ_l e α_l e para valores reais de $\kappa_l \geq 1$.

Capítulo 3

Formulação FDTD desenvolvida

3.1 Formulação matemática

O comportamento dispersivo na faixa de frequências da intrabanda do grafeno pode ser modelado pela condutividade superficial

$$\tilde{\sigma}(\omega) = \frac{\sigma^*}{d} \left(\frac{1}{\mathbf{j}\omega + 2\Gamma} \right), \quad (3.1)$$

a qual é uma aproximação da fórmula de Kubo [8]. Em (3.1), $\Gamma = 1/(2\tau_0)$, d é a espessura da folha de grafeno [5] e

$$\sigma^* = \frac{q_e^2 k_B T}{\pi \hbar^2} \left(\frac{\mu_c}{k_B T} + 2 \ln \left(1 + e^{-\mu_c/k_B T} \right) \right),$$

em que τ_0 é o tempo de relaxação, q_e a carga do elétron, k_B a constante de Boltzmann, T a temperatura, \hbar a constante de Planck reduzida e μ_c o potencial químico [8].

Tal como demonstrado em [11, 15], incorporar uma folha fina condutiva na grade FDTD 3D (no espaço livre) produz uma condutividade efetiva $\tilde{\sigma}_{\text{eff}} = (d/\Delta)\tilde{\sigma}$, na qual Δ é a aresta de uma célula de Yee cúbica. Por meio do cálculo da transformada inversa de Fourier de $\tilde{\sigma}_{\text{eff}}$, pode-se obter a condutividade efetiva

$$\sigma(t) = G_C e^{-2\Gamma t}, \quad t > 0, \quad (3.2)$$

em que $G_C = \sigma^*/\Delta$. Nas equações de Maxwell

$$\frac{\partial \vec{D}}{\partial t} + \vec{J} = \nabla \times \vec{H} \quad (3.3)$$

e

$$\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = -\nabla \times \vec{E}, \quad (3.4)$$

com $\vec{D}(t) = \epsilon \vec{E}(t)$ e $\vec{B}(t) = \mu \vec{H}(t)$, para o cálculo da densidade de corrente \vec{J} , pode-se usar a condutividade (3.2), de forma que a convolução

$$\vec{J}(t) = \int_0^t \vec{E}(t - \tau) \sigma(\tau) d\tau \quad (3.5)$$

é calculada para as densidades de corrente tangenciais ao grafeno. Para este problema, a lei de Ampère em (3.3) se torna

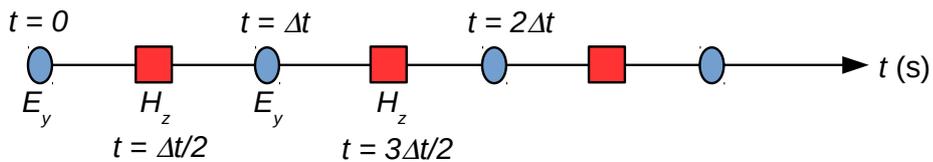
$$\epsilon \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} + \left(\int_0^t \vec{E}(t - \tau) \sigma(\tau) d\tau \right) = \nabla \times \vec{H}. \quad (3.6)$$

Devido ao comportamento exponencial de $\sigma(t)$ em (3.2), é possível calcular a convolução em (3.6) por um processo recursivo usando a técnica PLRC descrita em [14].

A fim de simplificar a demonstração do método, tratar-se-á o problema para uma dimensão espacial e o tempo. Utilizam-se E_y e H_z como as componentes de campo para uma onda propagando-se paralelamente à direção x .

Levando em consideração que $\tau = m\Delta t$ e que \vec{E} e \vec{H} são calculados respectivamente nos instantes discretos FDTD n e $n + \frac{1}{2}$ (conforme ilustrado na Fig. 3.1), obtém-se para o termo $\frac{\partial D_y}{\partial t} + J_y$ em (3.3) e (3.6) a seguinte expressão:

Figura 3.1: Exemplo de malha temporal utilizada no método FDTD.



$$\begin{aligned}
\left\{ \frac{\partial D_y}{\partial t} + J_y \right\}^{n+\frac{1}{2}} &\approx \epsilon \left(\frac{E_y^{n+1} - E_y^n}{\Delta t} \right) + \left(\frac{J_y^{n+1} + J_y^n}{2} \right) = \\
&= \epsilon \left(\frac{E_y^{n+1} - E_y^n}{\Delta t} \right) + \frac{1}{2} \int_0^{(n+1)\Delta t} E_y^{(n+1)-m} \sigma(\tau) d\tau + \\
&\quad + \frac{1}{2} \int_0^{n\Delta t} E_y^{n-m} \sigma(\tau) d\tau, \tag{3.7}
\end{aligned}$$

em que $t = n\Delta t$ e a densidade de corrente média $\frac{1}{2} (J_y^{n+1} + J_y^n)$ é usada em (3.7) para estabelecer a sincronização entre J_y e H_z em (3.6).

A função E_y pode ser considerada constante durante cada passo discreto FDTD. Portanto, pode-se escrever uma aproximação linear por intervalos da seguinte forma:

$$J_y^n \approx \sum_{m=0}^{n-1} E_y^{n-m} \int_{m\Delta t}^{(m+1)\Delta t} \sigma(\tau) d\tau. \tag{3.8}$$

Aplicando (3.8) para J_y^n e J_y^{n+1} , extraindo o primeiro termo ($m = 0$) de J_y^{n+1} e agrupando os somatórios restantes, (3.7) se torna

$$\begin{aligned}
\left\{ \frac{\partial D_y}{\partial t} + J_y \right\}^{n+\frac{1}{2}} &\approx \epsilon \left(\frac{E_y^{n+1} - E_y^n}{\Delta t} \right) + \\
&\quad + \frac{1}{2} E_y^{n+1} \int_0^{\Delta t} \sigma(\tau) d\tau + \\
&\quad + \frac{1}{2} \sum_{m=0}^{n-1} E_y^{n-m} \left(\int_{(m+1)\Delta t}^{(m+2)\Delta t} \sigma(\tau) d\tau + \int_{m\Delta t}^{(m+1)\Delta t} \sigma(\tau) d\tau \right). \tag{3.9}
\end{aligned}$$

Para simplificar a notação em (3.9), definem-se as funções

$$\sigma_m(i) = \int_{m\Delta t}^{(m+1)\Delta t} \sigma(\tau, i) d\tau \tag{3.10}$$

e

$$S_m(i) = \sigma_m(i) + \sigma_{m+1}(i), \tag{3.11}$$

em que $x = i\Delta x$. Como resultado, da lei de Ampère e (3.9)-(3.11), verifica-se que

$$E_y^{n+1}(i) = \frac{(\nabla \times \vec{H})_y + \frac{\epsilon(i)}{\Delta t} E_y^n(i) - \frac{1}{2} \Psi_y^n(i)}{\frac{\epsilon(i)}{\Delta t} + \frac{1}{2} \sigma_0(i)}, \tag{3.12}$$

em que $(\nabla \times \vec{H})_y$ é a componente y de $\nabla \times \vec{H}$ e $\Psi_y^n(i)$ é a seguinte convolução para a i -ésima célula FDTD:

$$\Psi_y^n(i) = \sum_{m=0}^{n-1} E_y^{n-m}(i) S_m(i). \quad (3.13)$$

Neste ponto, pode-se notar que o cálculo de (3.12) é computacionalmente inviável por causa da presente forma de (3.13). Por isso, o objetivo aqui é obter uma equação recursiva FDTD para Ψ_y^n em (3.13). Substituindo (3.2) em (3.10), obtém-se

$$\sigma_m(i) = \int_{m\Delta t}^{(m+1)\Delta t} G_C e^{-2\Gamma\tau} d\tau \quad (3.14)$$

e após a integração

$$\sigma_m(i) = \frac{G_C}{2\Gamma} \left(e^{-2\Gamma m\Delta t} - e^{-2\Gamma(m+1)\Delta t} \right)_i. \quad (3.15)$$

De (3.15), nota-se que

$$\sigma_{m+1}(i) = \frac{G_C}{2\Gamma} \left(e^{-2\Gamma(m+1)\Delta t} - e^{-2\Gamma(m+2)\Delta t} \right)_i = e^{-2\Gamma\Delta t} \sigma_m(i). \quad (3.16)$$

Adicionalmente, de (3.11) e (3.16), tem-se a relação recursiva

$$S_{m+1}(i) = e^{-2\Gamma\Delta t} S_m(i). \quad (3.17)$$

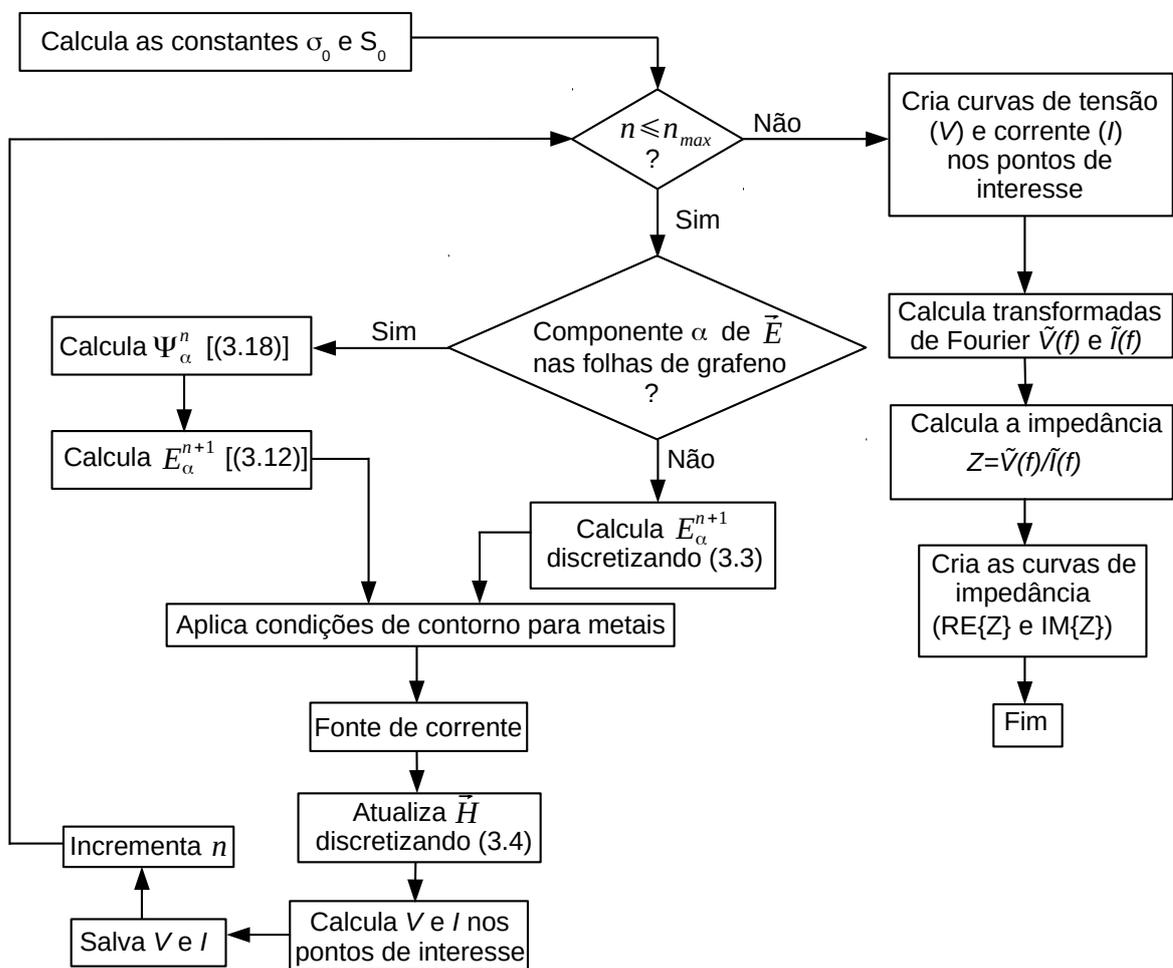
Como consequência, as expressões (3.13) e (3.17) levam à simples equação de atualização recursiva FDTD para (3.13), dada por

$$\Psi_y^n(i) = E_y^n(i) S_0(i) + e^{-2\Gamma\Delta t} \Psi_y^{n-1}(i), \quad (3.18)$$

com $\Psi_y^0(i) = 0$. Uma vez que (3.18) é calculado, E_y pode ser atualizado com (3.12). Observa-se que $\sigma_0 = (1 - e^{-2\Gamma\Delta t}) G_C / (2\Gamma)$ e $S_0 = (1 - e^{-4\Gamma\Delta t}) G_C / (2\Gamma)$ são obtidas de (3.15) e (3.11).

A Fig. 3.2 ilustra o algoritmo desenvolvido para realizar simulações FDTD, com uso da formulação proposta neste trabalho para modelagem de folhas de grafeno na faixa de intrabanda.

Figura 3.2: Fluxograma do algoritmo para geração de resultados, com uso da formulação FDTD proposta.



Capítulo 4

Resultados

4.1 Validação da formulação numérica proposta

A fim de validar a metodologia FDTD desenvolvida neste trabalho, duas antenas baseadas em grafeno propostas em [3] foram modeladas com ela. Ambas consistem em duas folhas de grafeno coplanares posicionadas em um substrato de vidro semi-infinito com $\epsilon_r = 3,8$ e $\sigma = 0$ conforme ilustrado na Fig. 4.1. As folhas estão separadas por um *gap* de $S_g = 3 \mu\text{m}$ para as duas antenas. A antena 1 é descrita pelos parâmetros $L = 17 \mu\text{m}$, $W = 10 \mu\text{m}$ e $\mu_c = 0,13 \text{ eV}$ e a antena 2 é caracterizada por $L = 23 \mu\text{m}$, $W = 20 \mu\text{m}$ e $\mu_c = 0,25 \text{ eV}$.

A Fig. 4.2(a) apresenta uma parte da folha de grafeno na malha 3D. As componentes E_x e E_y do vetor campo elétrico \vec{E} nas folhas de grafeno (indicadas nas Figs. 4.2 (a) e (b)) foram calculadas utilizando a técnica proposta. Esses campos produzem a densidade de corrente dada por (3.5). As outras componentes de campo foram calculadas pelas suas correspondentes equações FDTD originais. A fim de evitar problemas de precisão numérica durante o cálculo de (3.12) e (3.18), os coeficientes σ_0, S_0, G_c e $e^{-2\Gamma\Delta t}$ foram calculados por meio do uso da biblioteca *Multiple Precision library* GMP/MPFR da GNU.

Os resultados em [3] foram obtidos por meio do simulador FEM no domínio da

Figura 4.1: Antena de grafeno [3] modelada para validação do método proposto.

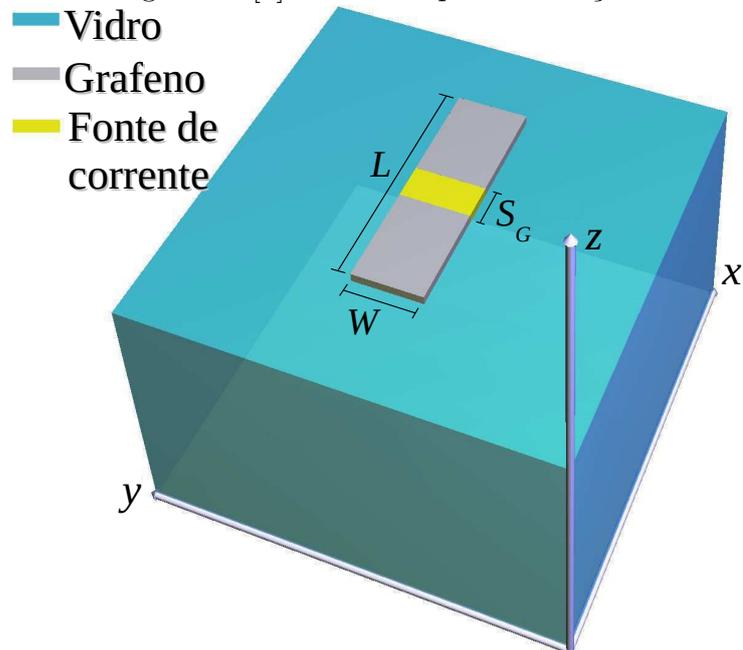
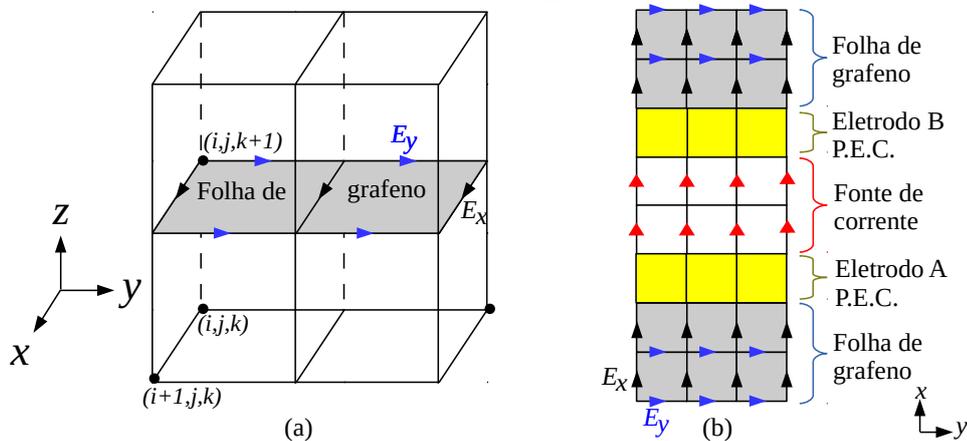


Figura 4.2: Grafeno modelado no espaço FDTD: (a) uma parte da folha no espaço 3D e (b) duas folhas de grafeno, os eletrodos A e B (PEC) e a fonte de corrente. E_x e E_y são as componentes de campo elétrico nas folhas de grafeno.

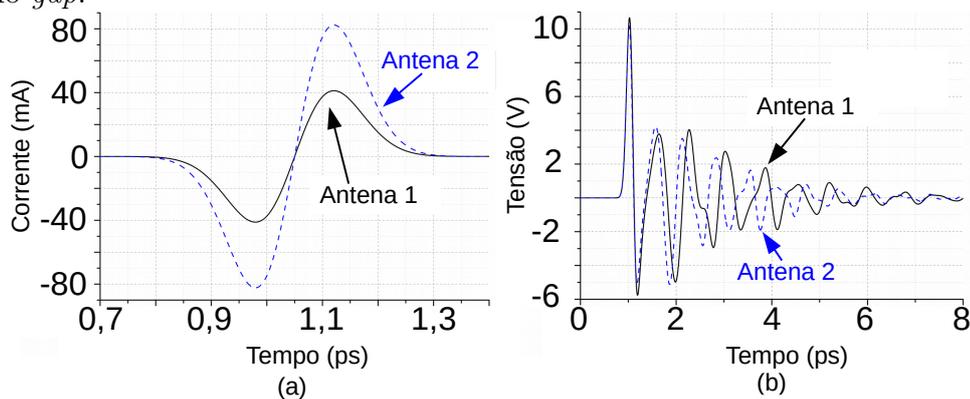


frequência HFSS e no presente trabalho foi concebida a estrutura de excitação ilustrada na Fig. 4.2(b), a qual consiste em uma fonte de corrente localizada no plano da antena entre dois eletrodos perfeitamente condutores (PEC) A e B. Os eletrodos metálicos foram inseridos no modelo FDTD exclusivamente porque eles foram utilizados na porta de

excitação do HFSS. Os eletrodos possuem 500 nm de largura.

As densidades de corrente J_x no *gap* da antena seguem um pulso monociclo de acordo com a fonte de corrente *soft* [11] implementada. A maior parte da energia do pulso está contida na faixa espectral 0,2-1,8 THz. As impedâncias das antenas foram calculadas por meio das transformadas de Fourier $\tilde{V}(f)$ e $\tilde{I}(f)$ do transitório de tensão $V(t) = \sum E_x \Delta_x$ produzido entre os eletrodos e o transitório de corrente total $I(t)$ injetado no eletrodo B (Fig. 4.2(b)). As tensões $V(t)$ e correntes totais $I(t)$ obtidas para ambas as antenas são apresentadas na Fig. 4.3.

Figura 4.3: Sinais transitórios: (a) correntes totais que fluem para o eletrodo B e (b) tensões no *gap*.



Para as antenas de grafeno modeladas pelo método FDTD, foram utilizadas células de Yee cúbicas com $\Delta = 500$ nm (passo espacial) e definida uma malha $96 \times 90 \times 71$. A antena 1 foi simulada também com $\Delta = 250$ nm e $\Delta = 125$ nm. O domínio computacional foi truncado pelo uso da formulação CPML [11] e a estabilidade numérica foi obtida quando definiu-se Δ_t como 99% do limite de Courant [11].

A Fig. 4.4 apresenta a comparação entre curvas de impedância obtidas com a formulação PLRC-FDTD proposta neste trabalho e os resultados de [3] para as mesmas antenas. Pode-se observar que para $\Delta = 500$ nm os resultados concordam bem em termos de frequências de ressonância (em que a parte imaginária da impedância é nula). Pequenos desvios são observados para os picos da parte real da impedância para a antena 1

(aproximadamente 4%) e para a antena 2 (aproximadamente 1,5%). A Fig. 4.4 também apresenta curvas de impedância obtidas para a antena 1 com níveis de discretização maiores ($\Delta = 250$ nm e $\Delta = 125$ nm).

Observa-se que 1) todas as frequências de ressonância ainda estão próximas às dadas em [3] e deslocamentos muito pequenos são observados, como esperado, e 2) os picos da parte real da impedância convergem para os valores dados por [3]. Isso significa que a formulação proposta pode modelar a espessura do grafeno d independentemente de Δ , desde que $\Delta > d/2$ e $\Delta \leq \lambda_{\min}/10$. Modificações nos resultados devem-se simplesmente ao aumento da precisão no cálculo numérico das derivadas nas equações de Maxwell e a correspondente redução da dispersão numérica [11].

Finalmente, a Fig. 4.5 apresenta a distribuição espacial de corrente para a antena 1 na frequência de ressonância 1,02 THz, obtida via transformadas de Fourier discretas. Este resultado também concorda plenamente com o diagrama de corrente em [3].

Figura 4.4: Validação do método proposto: curvas das partes real (RE) e imaginária (IM) das impedâncias das antenas 1 e 2.

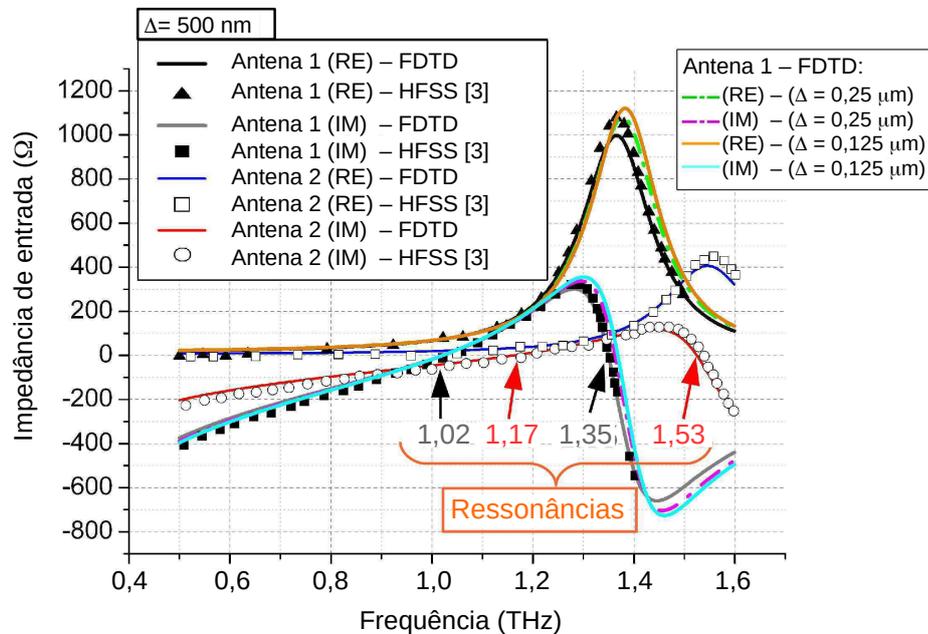
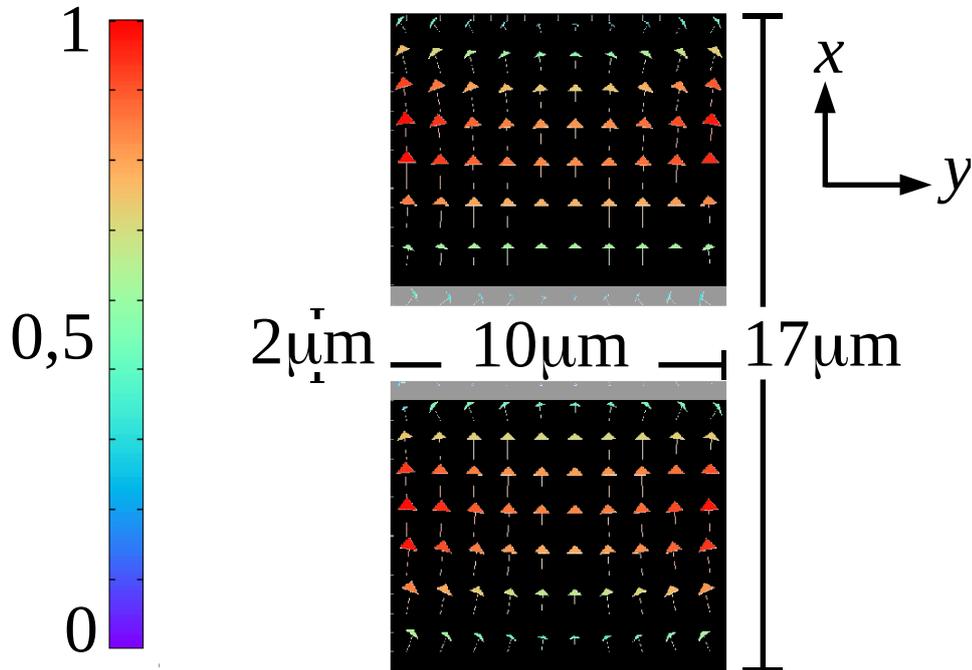


Figura 4.5: Distribuição de corrente nas folhas de grafeno para a antena 1, $f = 1,02$ THz.



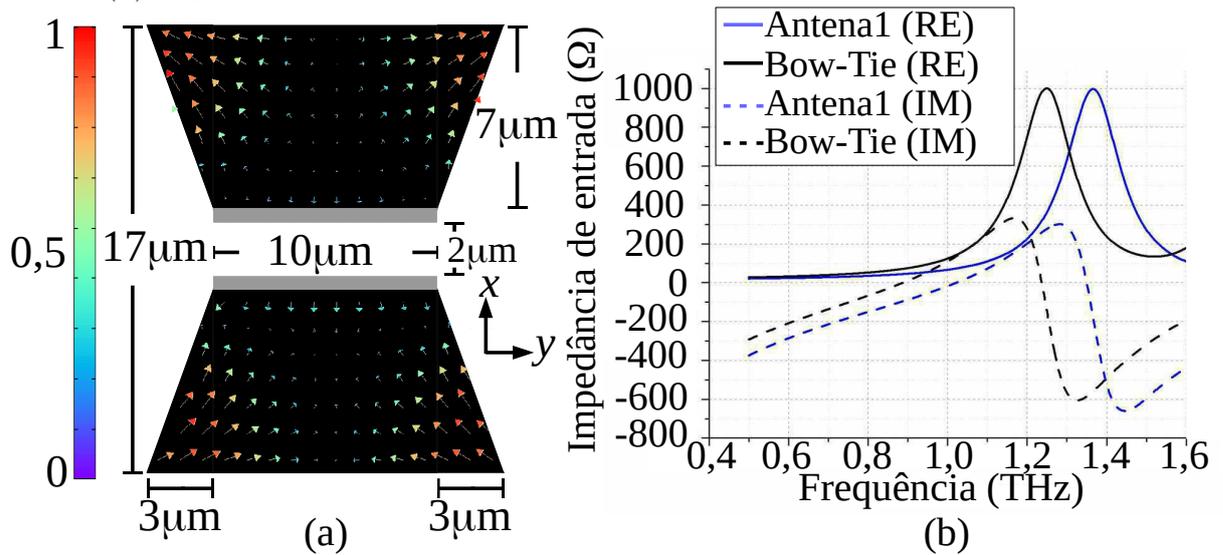
4.1.1 Ajuste da frequência de ressonância

Nesta seção, realiza-se a análise de um exemplo de antenas de grafeno apresentadas na Fig. 4.1, com uso da técnica FDTD desenvolvida. Ele consiste do crescimento gradual da largura das folhas de grafeno, conforme ilustrado pela Fig. 4.6(a). Então, lida-se com uma antena bow-tie.

Para a antena ilustrada na Fig. 4.6, a largura da antena 1 é progressivamente aumentada partindo dos eletrodos metálicos de $10\mu\text{m}$ a $16\mu\text{m}$ no final. O comprimento do dispositivo inicial (antena 1) foi mantido. Esta modificação geométrica da antena retangular usual pode ser usada para modificar a frequência de ressonância. A Fig. 4.6(b) apresenta a comparação das curvas de impedância para a antena 1 e para a antena bow-tie. Nota-se que as ressonâncias foram deslocadas de $1,35$ THz para $1,237$ THz e de $1,02$ THz para $0,90$ THz. Esse efeito pode ser entendido analisando-se as Figs. 4.5 e 4.6(a), nas quais verifica-se que a geometria bow-tie força a maior parte da corrente a fluir em trajetórias maiores do que os caminhos nos quais a corrente flui na antena com geome-

tria retangular. Este efeito é esperado e mostra a consistência física do modelo numérico desenvolvido.

Figura 4.6: Antena bow-tie de grafeno: (a) geometria e distribuição de corrente, $f = 0,90$ THz e (b) impedância Z .



4.2 Antena de grafeno com controle dinâmico do diagrama de radiação

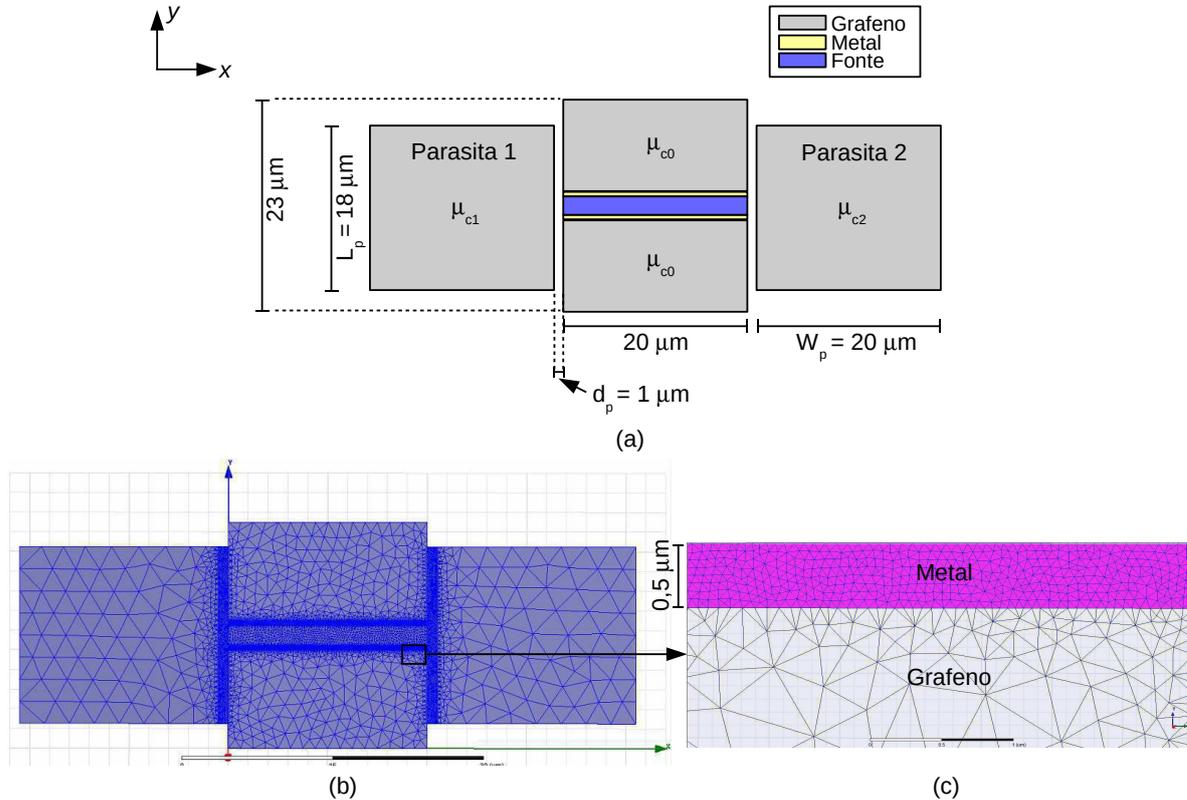
Como contribuição adicional, nesta seção é apresentado um novo dispositivo cujo funcionamento é baseado na variação do potencial químico das folhas de grafeno que o compõem. Esta antena é formada por um dipolo (cuja geometria é apresentada em [3]) e dois elementos parasitas de grafeno, incluídos em lados opostos do referido dispositivo, com dimensões iguais. Os elementos parasitas interagem com o dipolo de maneira a alterar o fluxo de corrente nas folhas de grafeno, o que determina um padrão de radiação característico para cada conjunto de potenciais químicos utilizados na antena. O controle do diagrama é realizado através da modificação do potencial eletroquímico das folhas de grafeno postas às proximidades da antena dipolo (também de grafeno).

4.2.1 Descrição do projeto e do sistema de funcionamento

Conforme indicado na Fig. 4.7(a), as dimensões do dipolo são as mesmas da antena 2 de [3] ($L = 23 \mu\text{m}$ e $W = 20 \mu\text{m}$) e os elementos parasitas têm dimensões $L_p = 18 \mu\text{m}$ e $W_p = 20 \mu\text{m}$. A distância entre os elementos parasitas e o dipolo é $d_p = 1 \mu\text{m}$. O potencial químico das folhas pertencentes ao dipolo é μ_{c0} e o das que formam os elementos parasitas 1 e 2 são, respectivamente, μ_{c1} e μ_{c2} .

A análise da antena no espaço livre foi realizada com uso do *software* HFSS e os resultados são comparados aos obtidos com a formulação FDTD desenvolvida neste trabalho. Nas simulações executadas no *software* HFSS, a antena é excitada por uma porta de elementos concentrados (*lumped port*) de alta impedância ($1 \text{ M}\Omega$). Dessa forma, a região da fonte (Fig 4.7(a)) funciona praticamente como espaço livre, de modo que é considerado, entre os eletrodos da antena, apenas o campo imposto pela fonte, semelhantemente à análise realizada nas nossas simulações FDTD. Isso permite o estudo do desempenho da antena em função da impedância da fonte de alimentação a ser utilizada em determinada

Figura 4.7: (a) Geometria da antena proposta para controle do diagrama de radiação. (b) Malha computacional utilizada no HFSS, (c) com destaque em uma região que contém um eletrodo metálico.



aplicação [53].

A malha computacional utilizada no HFSS foi construída de modo que a menor dimensão de cada objeto que a compõe é representada por pelo menos 8 elementos (triângulos), a fim de atender ao critério de precisão do método dos elementos finitos (FEM). Isto é indicado nas Figs. 4.7(b) e 4.7(c).

Nesta parte do trabalho, o principal objetivo é utilizar refletores de grafeno próximos ao dipolo previamente analisado (Fig. 4.7(a)). A ideia é que, como o grafeno pode ter suas características elétricas controladas através do potencial eletroquímico, possa-se impor algum controle sobre o diagrama de radiação da antena de forma inteligente. Portanto, visa-se obter uma *smart antenna* de grafeno do ponto de vista do diagrama de radiação.

Nas configurações propostas neste trabalho, definidas na Tabela 4.1, obtidas após a realização de várias simulações numéricas (com várias combinações de potenciais químicos), verificou-se que o controle do diagrama de radiação do dispositivo é realizado através da variação dos potenciais μ_{c1} e μ_{c2} , mantendo-se o dipolo com $\mu_{c0} = 0,3$ eV.

Tabela 4.1: Lista de configurações do dispositivo.

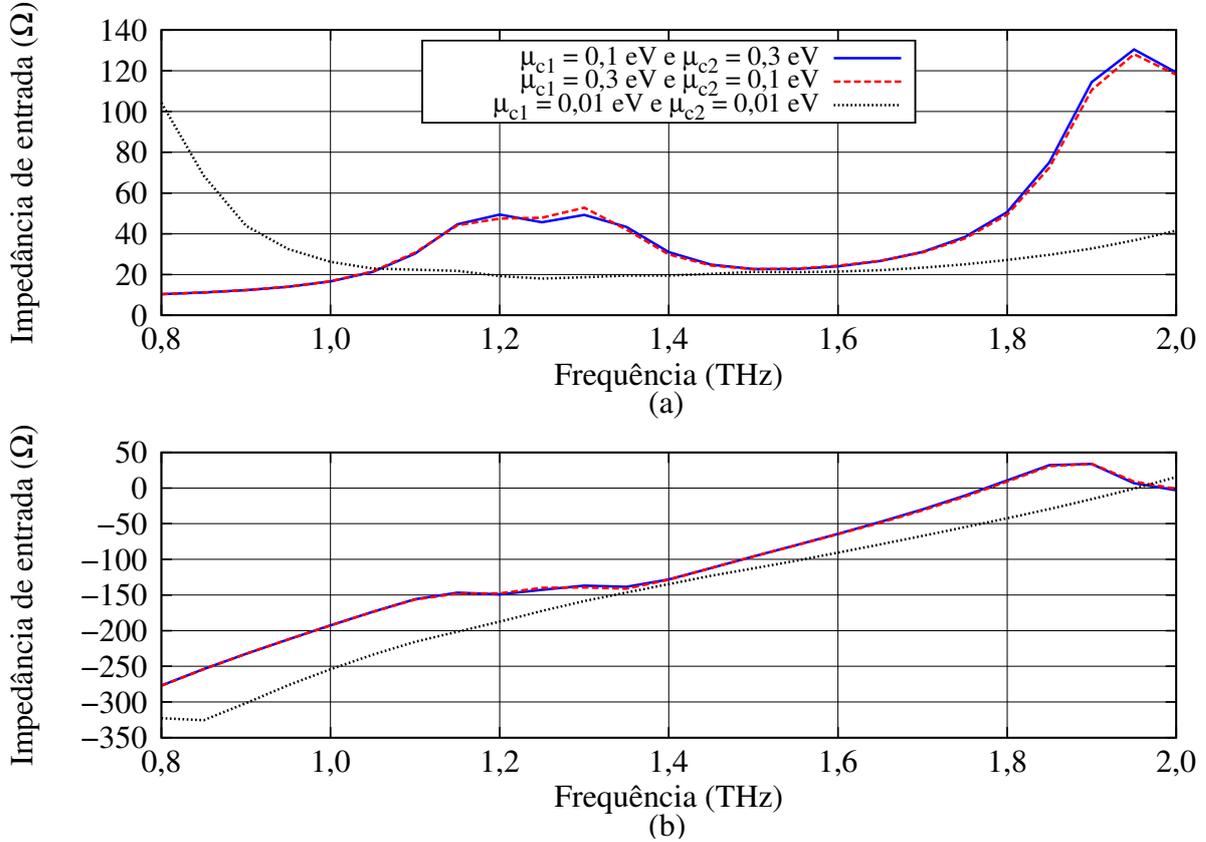
Configuração	μ_{c0}	μ_{c1}	μ_{c2}
1	0,3 eV	0,1 eV	0,3 eV
2	0,3 eV	0,3 eV	0,1 eV
3	0,3 eV	0,01 eV	0,01 eV

Com base na Fig. 4.8(b), observa-se que a primeira ressonância da antena ocorre na frequência de 1,775 THz, na configuração 1, e na frequência de 1,778 THz, na segunda configuração. Na configuração em que $\mu_{c1} = \mu_{c2} = 0,01$ eV, a primeira ressonância do dispositivo ocorre na frequência de 1,952 THz. Além disso, de acordo com a Fig. 4.8(a), na faixa em que ocorre a primeira ressonância da antena para as configurações consideradas, a sua resistência assume valores no intervalo de 20 a 130 Ω aproximadamente. Portanto, para que haja um bom casamento de impedâncias, sugere-se o uso de um fotodiodo fotomixer para excitar a antena, o qual possui a impedância de aproximadamente 25 Ω conforme descrito em [54]. Para efeito de comparação, note na Fig. 4.4 que a antena 1 tem resistência de aproximadamente 1000 ohms na ressonância utilizada em [3] e que tal antena é excitada por um fotomixer com impedância de aproximadamente 10.000 ohms.

A Fig. 4.9 apresenta as curvas de perda de retorno para as três configurações utilizadas. O cálculo da perda de retorno é dado pela equação

$$RL = -20 \log_{10} | \Gamma |, \quad (4.1)$$

Figura 4.8: Impedância de entrada da antena proposta: (a) parte real e (b) parte imaginária.



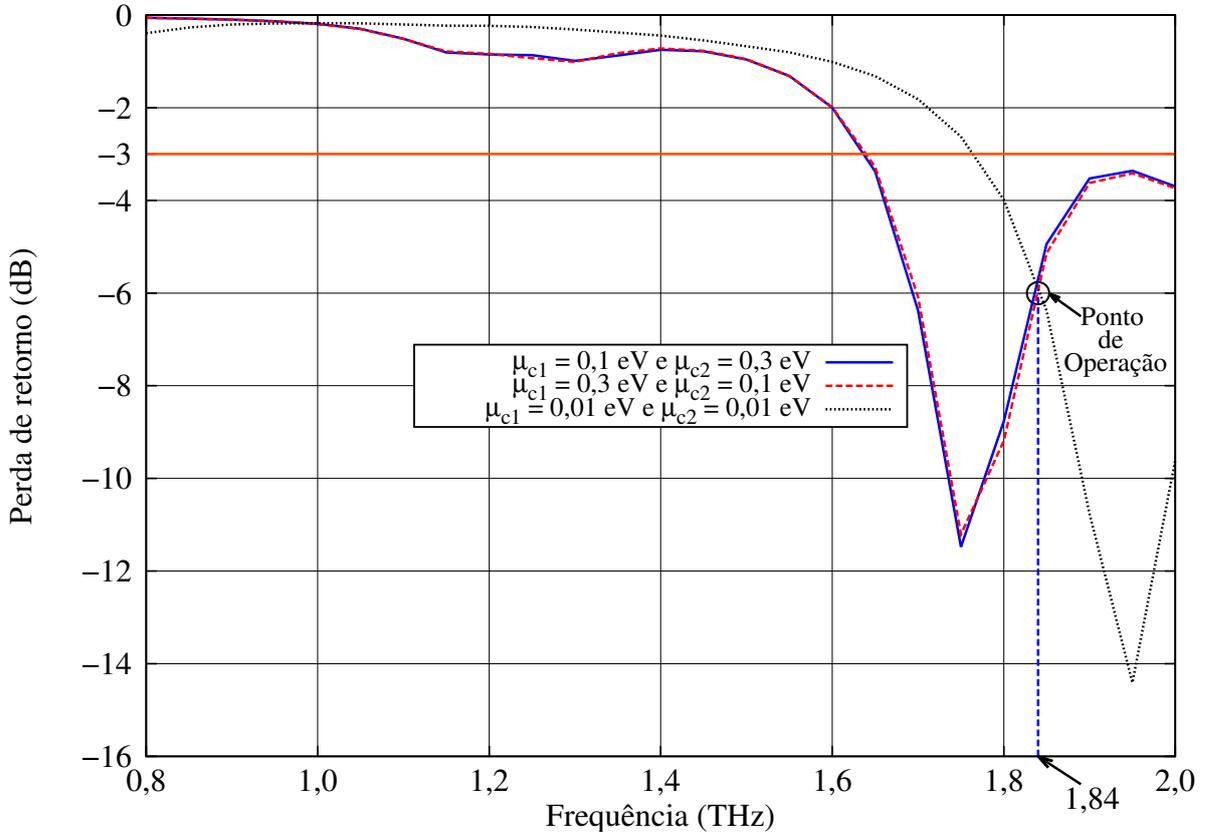
na qual o coeficiente de reflexão Γ é dado pela relação

$$\Gamma = \frac{\mathbf{Z}_{antena} - \mathbf{Z}_{fotodiodo}}{\mathbf{Z}_{antena} + \mathbf{Z}_{fotodiodo}}, \quad (4.2)$$

sendo $\mathbf{Z}_{fotodiodo} = 25 \Omega$ [54]. Devido à diferença entre as frequências de ressonância do dispositivo nas três configurações (Fig. 4.8(b)), a frequência de operação da antena foi selecionada como a frequência na qual as três curvas de perda de retorno se interceptam, de maneira que o nível de perda de retorno é admissível para os três casos. Dessa forma, o dispositivo opera na frequência de 1,84 THz e possui perda de retorno em torno de -6 dB – muito abaixo do nível de referência especificado na literatura para este tipo de antena (-3 dB) para a faixa de frequências em consideração [54].

Os diagramas de radiação que podem ser obtidos para o dispositivo na sua frequência

Figura 4.9: Perda de retorno da antena proposta, com $Z_0 = Z_{\text{fotodiodo}} = 25 \Omega$.



de operação (1,84 THz) são apresentados nas Figs. 4.10 e 4.11. Para cada configuração, o diagrama está normalizado em relação ao ganho máximo da antena formada apenas pelo dipolo com $\mu_c = 0,3 \text{ eV}$, no espaço livre, sem os parasitas. A Fig. 4.10 indica o diagrama de radiação obtido para a primeira configuração, o qual possui o lóbulo principal na direção do elemento parasita 1, considerando-se o plano xy ($\theta = 90^\circ$). Esse comportamento pode ser explicado pela distribuição de corrente ilustrada na Fig. 4.12(a), em que o fluxo de corrente no parasita 1 é desprezível em relação ao fluxo nos demais elementos da antena. Na Fig. 4.10, também, apresenta-se o diagrama de radiação calculado na configuração em que $\mu_{c1} = 0,3 \text{ eV}$ e $\mu_{c2} = 0,1 \text{ eV}$. A simetria observada entre este e o diagrama na configuração 1 é possível devido ao uso de dois elementos parasitas. Logo, nesta configuração, o lóbulo principal do diagrama está direcionado para o parasita 2, no plano xy ($\theta = 90^\circ$).

Portanto, com base nas Figs. 4.12(a) e 4.12(b), o direcionamento do diagrama de radiação do dispositivo para $\phi = 0^\circ$ ou $\phi = 180^\circ$ resulta do acoplamento entre o dipolo e o elemento parasita que possui $\mu_c = 0,3$ eV, de modo que o diagrama de radiação resultante é direcionado para o elemento em que há o menor fluxo de corrente (perdas menores).

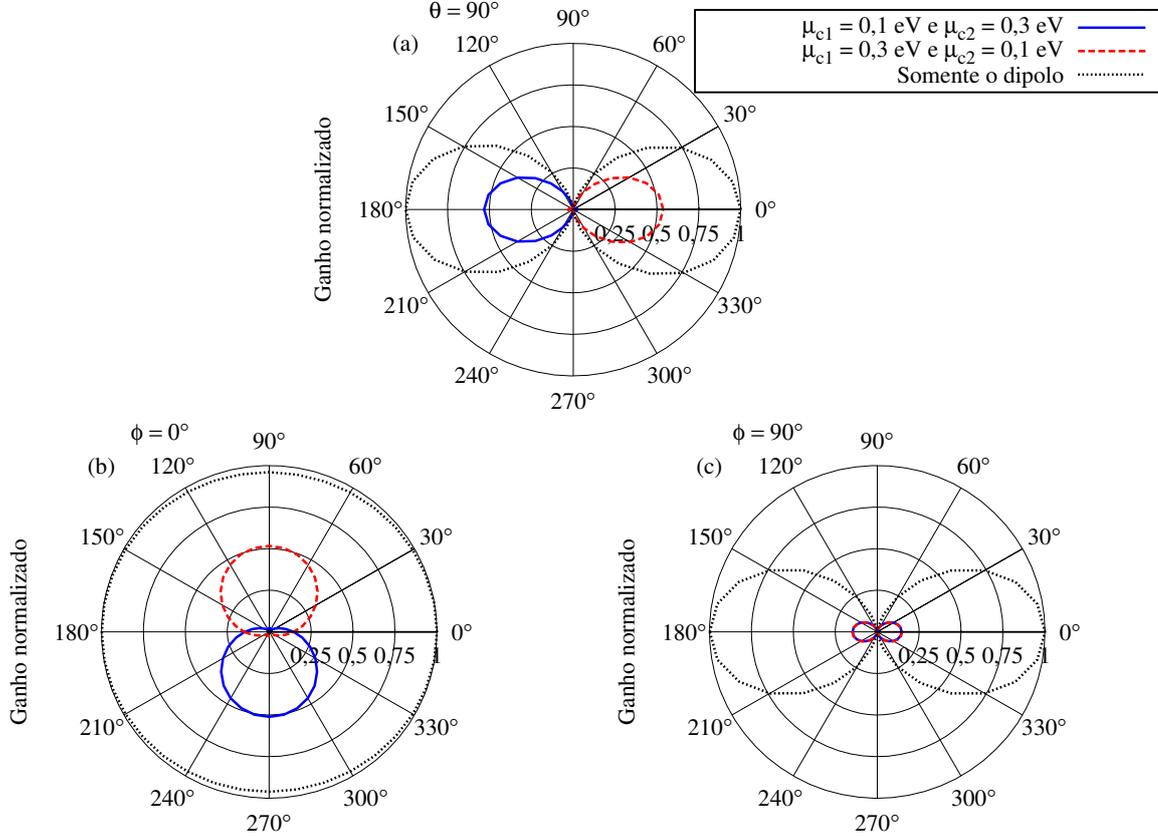
Em síntese, pode-se dizer que elementos parasitas que não apresentam correntes induzidas em níveis significativos funcionam como elementos praticamente transparentes e folhas parasitas com correntes induzidas com magnitudes significativas (comparáveis aos níveis das correntes na antena dipolo) funcionam como elementos refletores. O estado das folhas de grafeno (transparente ou refletor) pode ser controlado com a alteração de seus potenciais eletroquímicos. Confirmando esta ideia, tem-se que na configuração 3, cujo diagrama está ilustrado na Fig. 4.11, a distribuição de corrente é semelhante ao da antena sem os elementos parasitas (Fig. 4.5). Isto ocorre porque a intensidade das correntes que fluem tanto no parasita 1 quanto no parasita 2 é desprezível em relação aos níveis de corrente presentes no dipolo quando $\mu_{c1} = 0,01$ eV e $\mu_{c2} = 0,01$ eV, conforme indicado na Fig. 4.12(c). Além disso, é importante observar que o acoplamento gerado nas configurações 1 e 2 reduz fortemente, e de forma conveniente, o ganho da antena no plano yz ($\phi = 90^\circ$), como pode ser visto nos resultados mostrados pela Fig. 4.10(c).

A Tabela 4.2 apresenta características de desempenho do dispositivo proposto e da antena formada apenas pelo dipolo. A primeira informação indicada na Tabela é a eficiência total (ϵ_{total}), cujo cálculo é dado pela equação [53]

$$\epsilon_{total} = \epsilon_{rad} \times \epsilon_{casamento} = \epsilon_{rad} \times (1 - |\Gamma|^2), \quad (4.3)$$

na qual ϵ_{rad} é a eficiência de radiação. Embora a eficiência total do dispositivo nas configurações 1 e 2 seja em torno de cinco vezes menor que a da antena de referência, nestas combinações de μ_{c1} e μ_{c2} , a antena é aproximadamente três vezes mais diretiva (no plano xy) e apresenta altas relações frente-costa (*front-to-back ratio* - *FBR*). Dessa forma, o dispositivo pode ser utilizado em aplicações nas quais objetiva-se minimizar a emissão

Figura 4.10: Diagrama de radiação para as configurações 1 e 2, na frequência de 1,84 THz, nos planos: (a) $\theta = 90^\circ$, (b) $\phi = 0^\circ$ e (c) $\phi = 90^\circ$. Em todos os casos, $\mu_{c0} = 0,3$ eV.

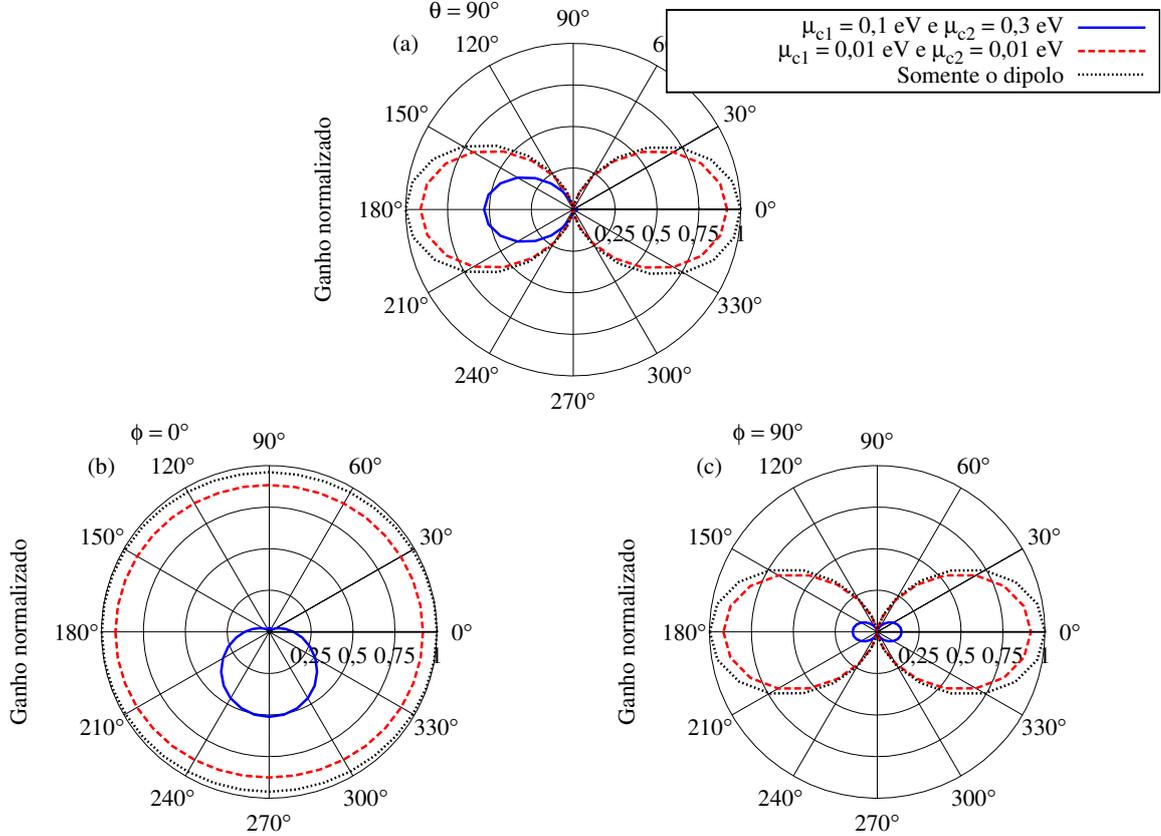


(ou recepção) de energia eletromagnética nas direções de ganho reduzido controladamente através do arranjo proposto neste trabalho. O dispositivo da Fig. 4.7, nas configurações 1 ou 2, apresenta ganho máximo maior que 50% do obtido pela antena de referência no plano xy . Matematicamente, o ganho é calculado pelo produto

$$G(\theta, \phi) = \epsilon_{rad} D(\theta, \phi), \quad (4.4)$$

no qual $D(\theta, \phi)$ é a diretividade. Na configuração 3, além de possuir um diagrama de radiação bastante semelhante ao da antena constituída apenas pelo dipolo, o dispositivo apresenta grande similaridade em suas características de radiação, sendo que a sua eficiência é apenas 5% menor que a da antena de referência e o ganho máximo obtido no plano xy é aproximadamente 7% menor.

Figura 4.11: Diagrama de radiação para as configurações 1 e 3, na frequência de 1,84 THz, nos planos: (a) $\theta = 90^\circ$, (b) $\phi = 0^\circ$ e (c) $\phi = 90^\circ$. Em todos os casos, $\mu_{c0} = 0,3$ eV.



Portanto, com o dispositivo proposto neste trabalho, é possível obter, além dos padrões diretivos controlados, o diagrama de radiação característico de uma antena dipolo, com desempenho bastante similar (configuração 3). Os padrões de radiação podem ser direcionados para $\phi = 0^\circ$ ou $\phi = 90^\circ$, com ganho máximo de 53% do calculado para a antena dipolo utilizada como referência.

4.2.2 Validação adicional da formulação proposta

Com o intuito de ratificar a consistência da formulação FDTD proposta neste trabalho, nesta seção, as comparações entre as curvas de impedância para as três configurações do dispositivo analisado, obtidas por meio do método proposto e as calculadas via HFSS, são apresentadas. A obtenção das curvas com uso do FDTD seguiu a descrição realizada na

Figura 4.12: Distribuição de corrente do dispositivo nas configurações (a) 1, (b) 2 e (c) 3.

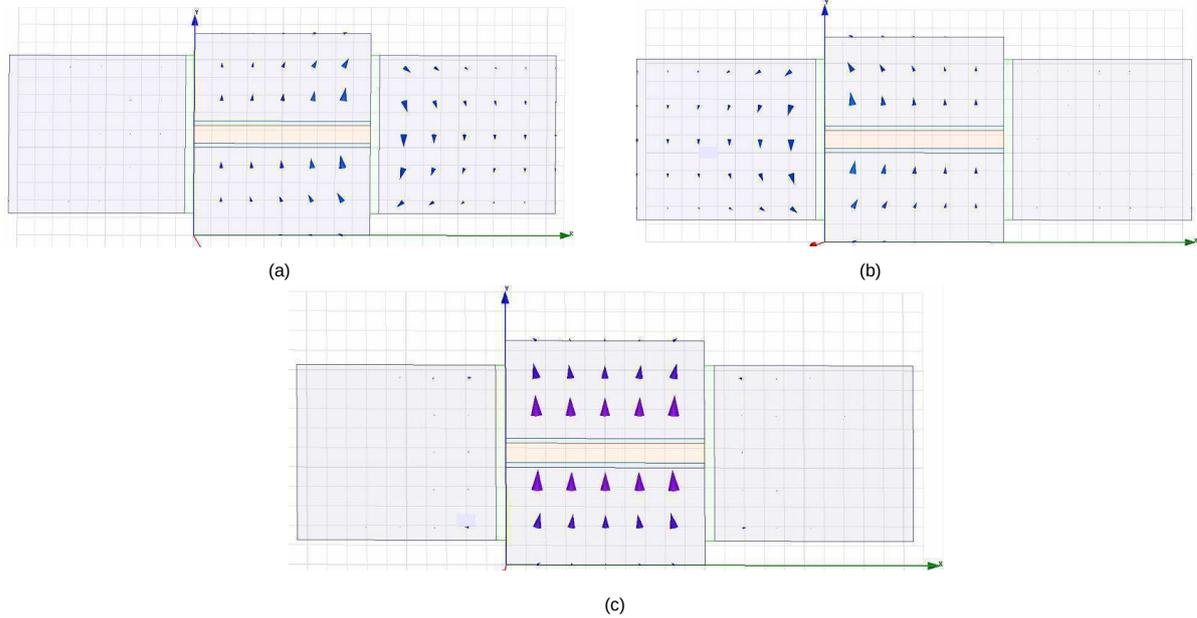


Tabela 4.2: Características do dispositivo em cada configuração: eficiência total, diretividade, relação frente-costa e ganho.

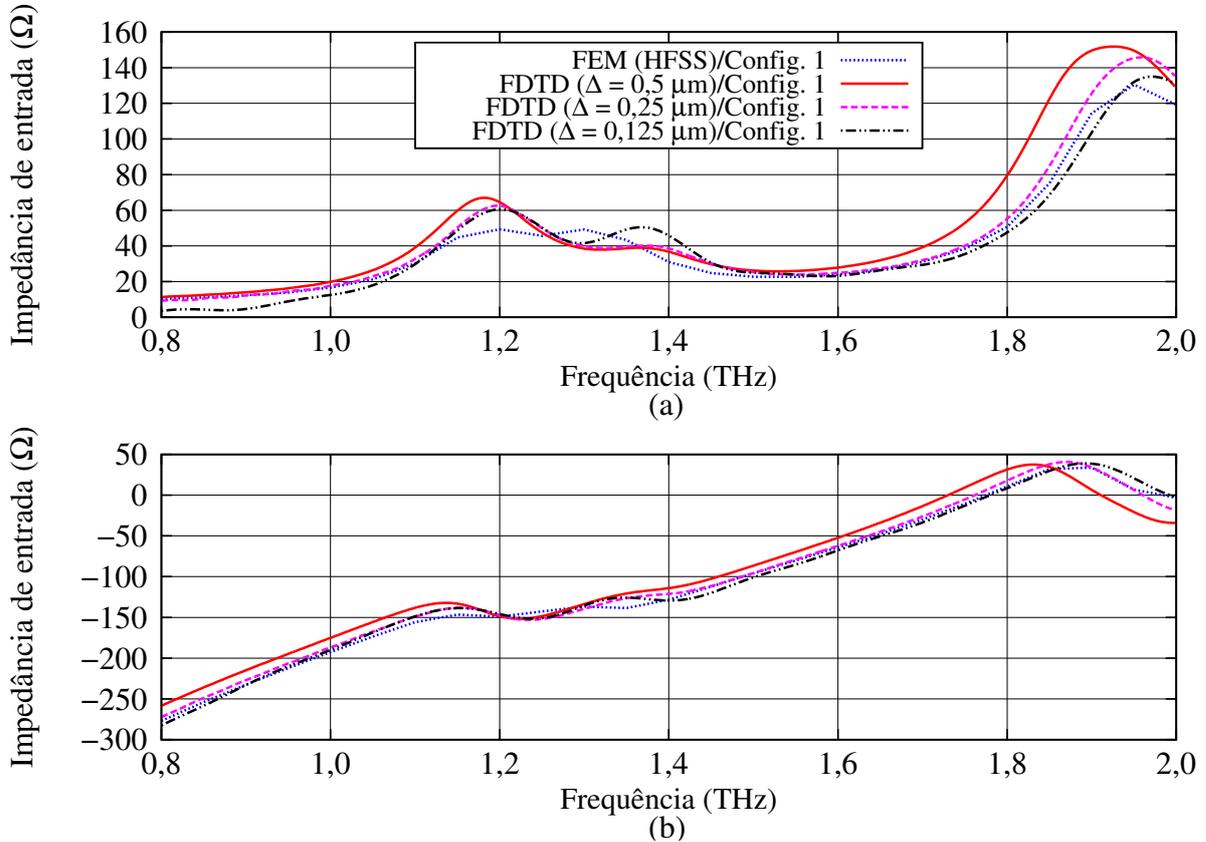
	ϵ_{total}	Diretividade máxima ($\theta = 90^\circ$)	FBR	Ganho máximo		
				$\theta = 90^\circ$ (Plano xy)	$\phi = 0^\circ$ (Plano zx)	$\phi = 90^\circ$ (Plano yz)
Somente o dipolo (referência)	26,54%	1,67	1	($\phi = 0^\circ$) 0,51	($\theta = 0^\circ$) 0,53	($\theta = 0^\circ$) 0,53
Configuração 1	4,81%	~ 4	27	($\phi = 180^\circ$) 0,27	($\theta = 90^\circ$) 0,27	($\theta = 0^\circ$) 0,08
Configuração 2	4,98%	~ 4	27	($\phi = 0^\circ$) 0,27	($\theta = 90^\circ$) 0,27	($\theta = 0^\circ$) 0,08
Configuração 3	21,68%	1,67	1	($\phi = 0^\circ$) 0,5	($\theta = 90^\circ$) 0,49	($\theta = 0^\circ$) 0,49

seção 4.1.

A Fig. 4.13 ilustra as curvas de impedância, calculadas para diferentes níveis de discretização espacial, do dispositivo na configuração 1 (Tabela 4.1). Analisando-se o valor de pico da curva relativa à parte real da impedância obtida com $\Delta = 0,5 \mu\text{m}$, tem-se que tal valor é 16,4% maior que o valor de pico calculado pelo simulador no domínio da frequência. Na curva calculada com $\Delta = 0,25 \mu\text{m}$, porém, a diferença entre os valores de pico é de 11,7%. Entretanto, utilizando-se um nível de discretização quatro vezes maior que o inicial, obtém-se a diferença de apenas 3,48% entre os valores de pico da parte real das impedâncias calculadas. As oscilações observadas em torno das frequências de 1,2 e 1,4 THz nas curvas geradas por meio do FDTD não estão notáveis da mesma maneira no gráfico levantado via HFSS, visto que nas simulações realizadas neste *software* utilizou-se 0,05 THz como incremento entre as frequências para as quais a impedância foi calculada, a fim de se reduzir o tempo total do conjunto de simulações (devido à necessidade de executar uma simulação para cada valor que compõe o espectro de interesse em métodos no domínio da frequência). Em relação aos valores de reatância (Fig. 4.13(b)), todas as curvas calculadas via FDTD apresentam pequenas diferenças no valor de frequência de ressonância, abaixo de 5%, em comparação com as ressonâncias obtidas com uso do HFSS. Porquanto foram calculadas as diferenças de 2,47%, 0,78% e 0,33% para, respectivamente, as seguintes arestas de célula utilizadas no *grid* FDTD: $\Delta = 0,5 \mu\text{m}$, $\Delta = 0,25 \mu\text{m}$ e $\Delta = 0,125 \mu\text{m}$. Portanto, nota-se que os resultados adquiridos pela formulação proposta convergem para os calculados via HFSS à medida que o nível de discretização aumenta, conforme informado na seção 4.1.

A Fig. 4.14 apresenta as curvas de impedância do dispositivo nas configurações 2 e 3, adquiridas por meio da formulação FDTD proposta, com uso de $\Delta = 0,125 \mu\text{m}$. De modo geral, há boa concordância tanto entre as curvas de resistência quanto entre as de reatância, calculadas com uso dos dois métodos em consideração, de forma que os gráficos obtidos via FDTD seguem a tendência dos gráficos correspondentes levantados

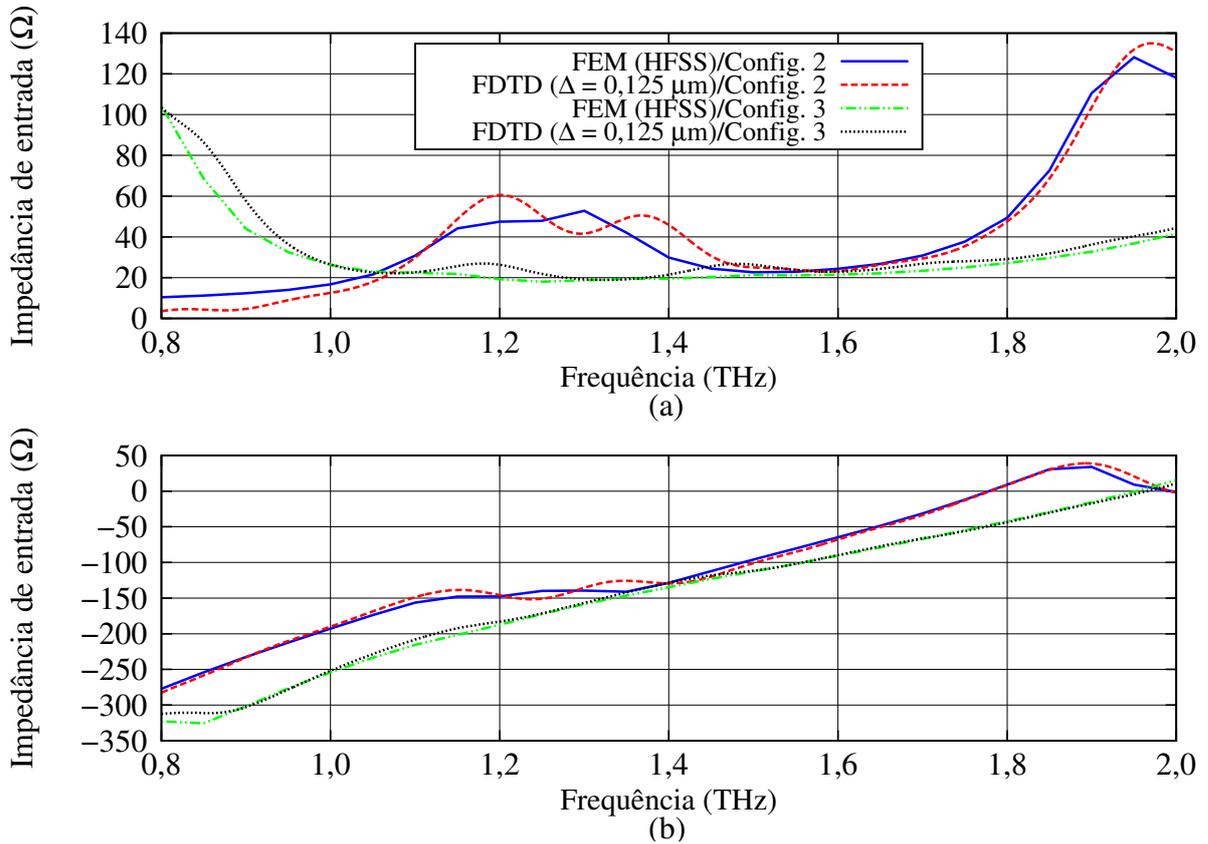
Figura 4.13: Comparação entre a impedância da configuração 1 calculada pelo método FEM e a obtida por meio do FDTD: (a) parte real e (b) parte imaginária.



pelo simulador no domínio da frequência. Na configuração 2, a diferença entre os valores de pico das curvas de resistência é de 5,3% (6,8 Ω). Além disso, semelhantemente ao gráfico de resistência na configuração 1, há um pequeno desvio entre os valores de impedância nas frequências próximas a 1,2 e 1,4 THz devido ao número de pontos utilizados para representar a curva calculada no HFSS. Com base na Fig. 4.14(b), constata-se que as curvas de reatância adquiridas pelos dois métodos se sobrepõem praticamente em toda a banda analisada, além de possuírem a diferença de 0,09% (1,65 GHz) entre as frequências adquiridas por meio de cada método nas quais ocorrem a primeira ressonância. O valor de pico da curva de resistência obtida pelo FDTD na configuração 3 é 0,89% (0,925 Ω) menor que o calculado via HFSS. Por fim, as curvas de reatância obtidas pelos dois métodos (FDTD e FEM) também estão praticamente sobrepostas, o que ratifica a consistência dos

resultados adquiridos pelo uso da formulação proposta nesta faixa de frequências.

Figura 4.14: Comparação entre as impedâncias das configurações 2 e 3 calculadas pelo método FEM e as obtidas por meio do FDTD: (a) parte real e (b) parte imaginária.



Capítulo 5

Considerações finais

5.1 Conclusão e sugestões de trabalhos futuros

Neste trabalho, foi apresentada uma formulação PLRC-FDTD para incluir a condutividade efetiva de folhas de grafeno em malhas FDTD. Com a formulação, é possível modelar folhas de grafeno em planos da malha de Yee em que as componentes do campo elétrico tangenciais a tais folhas estão presentes. Isto permite a fácil excitação de antenas por fontes de tensão ou corrente posicionadas coplanarmente às folhas. Duas antenas retangulares com folhas de grafeno posicionadas sobre um substrato foram modeladas e plena concordância com resultados publicados na literatura foram observados. Uma geometria bow-tie foi analisada e mostrou-se que esta pode ser projetada de modo a alterar as ressonâncias da antena de geometria retangular. Nota-se que a formulação apresentada pode ser usada não somente para análise e projeto de antenas de grafeno, e sim também para modelagem de outros dispositivos fotônicos.

Além disso, apresentou-se um novo dispositivo com controle dinâmico do diagrama de radiação, cujo o funcionamento baseia-se na variação do potencial químico das folhas de grafeno que o compõem. A análise desta antena no espaço livre foi realizada com auxílio do *software* HFSS. Os resultados obtidos por este também foram utilizados para validar

a formulação FDTD proposta neste trabalho.

A partir disso, as sugestões para trabalhos futuros são:

- Desenvolver uma formulação FDTD que também leve em consideração o termo relacionado à interbanda da condutividade elétrica superficial do grafeno;
- analisar o dispositivo com controle do diagrama de radiação disposto sobre um substrato;
- utilizar técnicas de otimização para a obtenção de antenas com controle fino do diagrama de radiação (*smart antenna*).

5.2 Publicação gerada

de Oliveira, R.M.S.; Rodrigues, N.R.N.M.; Dmitriev, V., “FDTD Formulation for Graphene Modeling Based on Piecewise Linear Recursive Convolution and Thin Material Sheets Techniques,” *Antennas and Wireless Propagation Letters, IEEE* , vol.14, pp.767,770, 2015 doi: 10.1109/LAWP.2014.2378174

Referências Bibliográficas

- [1] K. S. Novoselov and A. K. Geim, “The Rise of Graphene,” *Nature Materials*, vol. 6, pp. 183–191, 2007.
- [2] K. S. Novoselov, V. I. Fal’ko, L. Colombo, P. R. Gellert, M. G. Schwab, and K. Kim, “A roadmap for graphene,” *Nature*, vol. 490, no. 7419, pp. 192–200, 2012.
- [3] M. Tamagnone, J. S. Gomez-Diaz, J. R. Mosig, and J. Perruisseau-Carrier, “Analysis and design of terahertz antennas based on plasmonic resonant graphene sheets,” *Journal of Applied Physics*, vol. 112, no. 11, pp. 1–4, 2012.
- [4] M. Tamagnone and J. Perruisseau-Carrier, “Predicting Input Impedance and Efficiency of Graphene Reconfigurable Dipoles Using a Simple Circuit Model,” *Antennas and Wireless Propagation Letters, IEEE*, vol. 13, pp. 313–316, 2014.
- [5] I. Llatser, C. Kremers, A. Cabellos-Aparicio, J. M. Jornet, E. Alarco, and D. N. Chigrin, “Graphene-based nano-patch antenna for terahertz radiation,” *Photonics and Nanostructures - Fundamentals and Applications*, vol. 10, no. 4, pp. 353–358, 2012.
- [6] Z. Zhu, S. Joshi, S. Grover, and G. Moddel, “Graphene Geometric Diodes for Terahertz Rectennas,” *Journal of Physics D: Applied Physics*, vol. 46, no. 18, pp. 1–6, 2013.

- [7] J. Christensen, A. Manjavacas, S. Thongrattanasiri, F. H. L. Koppens, and F. J. G. de Abajo, “Graphene Plasmon Waveguiding and Hybridization in Individual and Paired Nanoribbons,” *ACS Nano*, vol. 6, no. 1, pp. 431–440, 2012.
- [8] G. W. Hanson, “Dyadic Green’s functions and guided surface waves for a surface conductivity model of graphene,” *J. Appl. Phys.*, vol. 103, no. 064302, 2008.
- [9] H. Lin, M. F. Pantoja, L. D. Angulo, J. Alvarez, R. G. Martin, and S. G. Garcia, “FDTD Modeling of Graphene Devices Using Complex Conjugate Dispersion Material Model,” *Microwave and Wireless Components Letters, IEEE*, vol. 22, no. 12, pp. 612–614, Dec 2012.
- [10] V. Nayyeri, M. Soleimani, and O. Ramahi, “Modeling Graphene in the Finite-Difference Time-Domain Method Using a Surface Boundary Condition,” *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, vol. 61, no. 8, pp. 4176–4182, Aug 2013.
- [11] A. Taflove and S. C. Hagness, *Computational Electrodynamics, The Finite-Difference Time-Domain Method*, 3rd ed. Artech House, 2005.
- [12] S. H. Nasiri, M. K. M.-Farshi, and R. Faez, “Time Domain Analysis of Graphene Nanoribbon Interconnects Based on Transmission Line Model,” *Iranian Journal of Electrical & Electronic Engineering*, vol. 8, no. 1, pp. 37–44, 2012.
- [13] A. Nishad and R. Sharma, “Analytical Time-Domain Models for Performance Optimization of Multilayer GNR Interconnects,” *Selected Topics in Quantum Electronics, IEEE Journal of*, vol. 20, no. 1, pp. 17–24, Jan 2014.
- [14] D. Kelley and R. Luebbers, “Piecewise linear recursive convolution for dispersive media using FDTD,” *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, vol. 44, no. 6, pp. 792–797, Jun 1996.

- [15] J. Maloney and G. Smith, "The efficient modeling of thin material sheets in the finite-difference time-domain (FDTD) method," *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, vol. 40, no. 3, pp. 323–330, Mar 1992.
- [16] T. Schneider, A. Wiatrek, S. Preussler, M. Grigat, and R.-P. Braun, "Link Budget Analysis for Terahertz Fixed Wireless Links," *Terahertz Science and Technology, IEEE Transactions on*, vol. 2, no. 2, pp. 250–256, March 2012.
- [17] J. Jornet and I. Akyildiz, "Graphene-based nano-antennas for electromagnetic nanocommunications in the terahertz band," in *Antennas and Propagation (EuCAP), 2010 Proceedings of the Fourth European Conference on*, April 2010, pp. 1–5.
- [18] Y. Hu, M. Pantouvaki, S. Brems, I. Asselberghs, C. Huyghebaert, M. Geisler, C. Alessandri, R. Baets, P. Absil, D. Van Thourhout, and J. Van Campenhout, "Broadband 10gb/s graphene electro-absorption modulator on silicon for chip-level optical interconnects," in *Electron Devices Meeting (IEDM), 2014 IEEE International*, Dec 2014, pp. 5.6.1–5.6.4.
- [19] P. R. Wallace, "The Band Theory of Graphite," *Phys. Rev.*, vol. 71, pp. 622–634, May 1947. [Online]. Available: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.71.622>
- [20] J. W. McClure, "Diamagnetism of Graphite," *Phys. Rev.*, vol. 104, pp. 666–671, Nov 1956. [Online]. Available: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.104.666>
- [21] J. C. Slonczewski and P. R. Weiss, "Band Structure of Graphite," *Phys. Rev.*, vol. 109, pp. 272–279, Jan 1958. [Online]. Available: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.109.272>
- [22] H. W. Kroto, J. R. Heath, S. C. O'Brien, R. F. Curl, and R. E. Smalley, "C60: Buckminsterfullerene," *Nature*, vol. 318, pp. 162–163, 1985. [Online]. Available: <http://dx.doi.org/10.1038/318162a0>

- [23] S. Iijima, “Helical microtubules of graphitic carbon,” *Nature*, vol. 354, pp. 56–58, 1991. [Online]. Available: <http://dx.doi.org/10.1038/354056a0>
- [24] H.-S. P. Wong and D. Akinwande, *Carbon Nanotube and Graphene Device Physics*. Cambridge University Press, 2011.
- [25] Z. Liu and X. Zhou, *Graphene: Energy Storage and Conversion Applications*. CRC Press, Taylor and Francis Group, 2015.
- [26] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, and A. A. Firsov, “Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films,” *Science*, vol. 306, no. 5696, pp. 666–669, 2004. [Online]. Available: <http://www.sciencemag.org/content/306/5696/666.abstract>
- [27] Y. Wu, D. Farmer, F. Xia, and P. Avouris, “Graphene Electronics: Materials, Devices, and Circuits,” *Proceedings of the IEEE*, vol. 101, no. 7, pp. 1620–1637, July 2013.
- [28] R. E. Peierls, *Quantum Theory of Solids*. Oxford University Press, 2001.
- [29] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, 7th ed. John Wiley, 1996.
- [30] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, “The electronic properties of graphene,” *Reviews of Modern Physics*, vol. 81, pp. 109–162, 2009.
- [31] M. T. Dove, *Structure and Dynamics: An Atomic View of Materials*, 1st ed. Oxford University Press, 2002.
- [32] D. W. Oxtoby, H. P. Gillis, and A. Champion, *Principles of Modern Chemistry*, 2nd ed. Brooks/Cole, Cengage Learning, 2012.
- [33] M. I. Katsnelson, *Graphene: Carbon in Two Dimensions*, 1st ed. Cambridge University Press, 2012.

- [34] S. Shafraniuk, *Graphene: Fundamentals, Devices, and Applications*, 1st ed. CRC Press, Taylor and Francis Group, 2015.
- [35] Avouris, Phaedon, “Graphene: Electronic and Photonic Properties and Devices,” *Nano Letters*, vol. 10, no. 11, pp. 4285–4294, 2010, pMID: 20879723. [Online]. Available: <http://dx.doi.org/10.1021/nl102824h>
- [36] D. A. Neamen, *Semiconductor Physics and Devices: Basic Principles*, 3rd ed. McGraw-Hill, 2003.
- [37] A. H. Castro Neto, “Selected Topics in Graphene Physics,” pp. 1–19, 2010.
- [38] R. Saito, G. Dresselhaus, and M. S. Dresselhaus, *Physical Properties of Carbon Nanotubes*, 1st ed. Imperial College Press, 1998.
- [39] Ignacio Llatser Martí, “On the Scability Limits of Communication Networks to the Nanoscale,” Ph.D. dissertation, Universitat Politècnica de Catalunya, October 2013.
- [40] R. Kubo, “Statistical-Mechanical Theory of Irreversible Processes. I. General Theory and Simple Applications to Magnetic and Conduction Problems,” *Journal of the Physical Society of Japan*, vol. 12, no. 6, pp. 570–586, 1957. [Online]. Available: <http://dx.doi.org/10.1143/JPSJ.12.570>
- [41] K. Li, X. Ma, Z. Zhang, J. Song, Y. Xu, and G. Song, “Sensitive refractive index sensing with tunable sensing range and good operation angle-polarization-tolerance using graphene concentric ring arrays,” *Journal of Physics D: Applied Physics*, vol. 47, no. 40, p. 405101, 2014. [Online]. Available: <http://stacks.iop.org/0022-3727/47/i=40/a=405101>
- [42] F. H. Harlow and J. E. Welch, “Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow of fluid with free surface,” *Physics of Fluids*, vol. 8, pp. 2182–2189, 1965.

- [43] K. Yee, “Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell’s equations in isotropic media,” *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, vol. 14, pp. 302–307, 1966.
- [44] A. Taflove and M. Brodwin, “Numerical Solution of Steady-State Electromagnetic Scattering Problems Using the Time-Dependent Maxwell’s Equations,” *Microwave Theory and Techniques, IEEE Transactions on*, vol. 23, no. 8, pp. 623–630, Aug 1975.
- [45] J. A. Roden and S. D. Gedney, “Convolution PML (CPML): An efficient FDTD implementation of the CFS-PML for arbitrary media,” *Microwave and Optical Tech. Letters*, vol. 27, no. 5, pp. 334–339, 2000.
- [46] R. M. S. de Oliveira, “Nova Metodologia para Análise e Síntese de Sistemas de Aterramento Complexos Utilizando o Método LN-FDTD, Computação Paralela Automática e Redes Neurais Artificiais,” Tese de Doutorado, Universidade Federal do Pará/PPGEE, Fevereiro 2008.
- [47] M. Sadiku, *Elements of Electromagnetics*, 2nd ed. Oxford University Press, 1995.
- [48] K. O. F. R. Courant and Lewy, “Über die partiellen differenz-gleichungen der mathematischen physik,” *Mathematische Annalen*, vol. 100, pp. 32–74, 1928.
- [49] Müller, G., “Absorbing boundary conditions for the Finite-Difference approximation of the Time-Domain electromagnetic field equations,” vol. 23, pp. 377–382, 1981.
- [50] R. Higdon, “Numerical absorbing boundary conditions for the wave equation,” *Mathematics of computation*, vol. 49, pp. 65–90, 1987.
- [51] Z. Liao, H. Wong, B.P.Yang, and Y.F.Yuan, “A transmitting boundary for transient wave analysis,” *Scientia Sinica*, vol. XXVII (series A), pp. 1063–1076, 1984.

- [52] R.J. Luebbers and F. Hunsberger, “FDTD for Nth-order dispersive media,” *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, vol. 40, pp. 1297–1301, Nov 1992.
- [53] T. Nguyen, H. Han, and I. Park, “Full-Wavelength Dipole Antenna on a Hybrid GaAs Membrane and Si Lens for a Terahertz Photomixer,” *Journal of Infrared, Millimeter, and Terahertz Waves*, vol. 33, no. 3, pp. 333–347, 2012. [Online]. Available: <http://dx.doi.org/10.1007/s10762-012-9876-z>
- [54] I. Henning, M. Adams, Y. Sun, D. Moodie, D. Rogers, P. Cannard, S. Dosanjh, M. Skuse, and R. Firth, “Broadband Antenna-Integrated, Edge-Coupled Photomixers for Tuneable Terahertz Sources,” *Quantum Electronics, IEEE Journal of*, vol. 46, no. 10, pp. 1498–1505, Oct 2010.