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

SUPERFÍCIE SELETIVA DE FREQUÊNCIAS INTELIGENTE BASEADA EM GRAFENO

RODRIGO RODRIGUES PAIVA

DM 23 / 2019

UFPA / ITEC / PPGEE
Campus Universitário do Guamá
Belém-Pará-Brasil
2019

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

RODRIGO RODRIGUES PAIVA

SUPERFÍCIE SELETIVA DE FREQUÊNCIAS INTELIGENTE BASEADA EM GRAFENO

DM 23 / 2019

UFPA / ITEC / PPGEE
Campus Universitário do Guamá
Belém-Pará-Brasil
2019

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

RODRIGO RODRIGUES PAIVA

SUPERFÍCIE SELETIVA DE FREQUÊNCIAS INTELIGENTE BASEADA EM GRAFENO

Dissertação submetida à Banca Examinadora do Programa de Pós-Graduação em Engenharia 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
2019

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP) de acordo com ISBD
Sistema de Bibliotecas da Universidade Federal do Pará
Gerada automaticamente pelo módulo Ficat, mediante os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

P142s Paiva, Rodrigo Rodrigues
Superfície seletiva de frequências inteligente baseada em grafeno / Rodrigo Rodrigues Paiva. — 2019.
XXI, 73 f. : il.

Orientador(a): Prof. Dr. Rodrigo Melo E Silva de Oliveira
Dissertação (Mestrado) - Programa de Pós-Graduação em Engenharia Elétrica, Instituto de Tecnologia, Universidade Federal do Pará, Belém, 2019.

1. FSS inteligente, Grafeno, Método FDTD, Método Exponencial Matriz. I. Título.

CDD 621.3

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

"SUPERFÍCIE SELETIVA DE FREQUÊNCIAS INTELIGENTE BASEADA EM GRAFENO"

AUTOR: RODRIGO RODRIGUES PAIVA

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: 02/09/2019

BANCA EXAMINADORA:

Prof. Dr. Rodrigo Melo e Silva de Oliveira
(Orientador – PPGEE/UFPA)

Prof. Dr. Victor Alexandrovich Dmitriev
(Avaliador Interno – PPGEE/UFPA)

Prof. Dr. Fabrício José Brito Barros
(Avaliador Interno – PPGEE/UFPA)

Prof. Dr. Josivaldo de Souza Araújo
(Avaliador Externo ao Programa – FC/ICEN/UFPA)

VISTO:

Prof.ª Dr.ª Maria Emília de Lima Tostes
(Coordenadora do PPGEE/ITEC/UFPA)

A Deus e aos meus pais, Paulo e Fátima.

Agradecimentos

Agradeço primeiramente a Deus pelo seu infinito amor e misericórdia e por ter sido o meu suporte espiritual nesses dois anos de mestrado. Reconheço que sem ele jamais chegaria aonde estou.

Agradeço especialmente a minha mãe, Fátima. Seu amor, carinho e conselhos motivacionais são inefáveis. Obrigado pelo seu esforço e dedicação na busca pelo meu sucesso. Obrigado por sempre ter acreditado em mim. Minhas eternas gratidões a você, mãe. Agradeço ao meu pai, Paulo, pelo amor e educação a mim oferecidos, e irmãos: Paulo Roberto, Edjany e Elane.

Agradeço ao Professor Rodrigo pela sua paciência, esforço e dedicação. Suas orientações e conselhos estão sempre contribuindo para o meu processo de aprendizagem e meu amadurecimento enquanto profissional. Suas orientações foram de fundamental importância para o andamento e, posteriormente, conclusão desse trabalho. Muito obrigado.

Agradeço aos meus amigos do LEMag (Laboratório de Eletromagnetismo): Daiyuki, Ramon, Reinaldo, Marcos, Bianca, Lukas, Filipe e o Nilton. Em especial, agradeço aos amigos, Nilton e Reinaldo. A ajuda de vocês nos *softwares* de simulação foram de grande importância para esse trabalho. Obrigado também pelas inúmeras trocas de aprendizagens que tivemos durante esses anos.

Por fim, e não menos importante, agradeço por tudo ao meu amor, Dária. Obrigado por eu ter conhecido você, por ser essa pessoa companheira, sempre bastante compreensiva e tão especial. Tenho certeza que, juntos, conquistaremos todos os nossos objetivos. Te amo.

“Não podemos confiar em nós mesmo
nem em nossos melhores momentos.
Por outro lado, não devemos
nos desesperar nem mesmo nos piores,
pois nossos fracassos são perdoados.
A única atitude fatal é se dar por satisfeito
com qualquer coisa que não a perfeição.“
(C. S. Lewis)

Resumo

Neste trabalho, uma formulação baseada no método das diferenças finitas no domínio do tempo (FDTD) e na técnica exponencial matriz é desenvolvida para modelar folhas de grafeno de espessura infinitesimal. Esta formulação é validada através da reprodução numérica de problemas envolvendo superfícies seletivas de frequência (FSS) baseadas em grafeno, conhecidas na literatura. Dessa forma, propõe-se neste trabalho um dispositivo FSS de grafeno inteligente. Essa característica é obtida por meio de uma célula unitária formada por um anel de grafeno com uma folha de grafeno colocada em sua abertura. Através da regulação apropriada dos potenciais químicos dos elementos de grafeno, são obtidos dois modos de operação sintonizáveis em frequência: modos de rejeição *single*- ou *dual-band*. Quando o dispositivo opera em seu modo de rejeição *dual-band*, qualquer uma das bandas de rejeição pode ser deslocada individualmente no espectro de frequências. Além disso, ambas as bandas de rejeição também podem ser reconfiguradas simultaneamente. Com o dispositivo operando no modo de rejeição *single-band*, é possível, também, deslocar sua banda de rejeição no espectro de frequências.

Palavras-chave: Método FDTD, Grafeno, Método Exponencial Matriz, FSS Inteligente.

Abstract

In this work, a formulation based on the finite-difference time-domain (FDTD) and on the exponential matrix methods is developed for modeling thin graphene sheets. This formulation is validated by reproducing problems involving graphene frequency selective surfaces (FSS) known from literature. Then, we propose in this work a smart graphene FSS device. Smartness is obtained by means of a unity cell formed by a graphene ring with a graphene sheet placed in its aperture. By properly regulating the chemical potentials of the graphene elements, two frequency-tunable *modus operandi* are obtained: single- or dual-band rejection modes. When the device operates in its dual-band rejection mode, either of the rejection bands can be shifted individually in the frequency spectrum. Additionally, both rejection bands can also be reconfigured simultaneously. With the device operating in single-band rejection mode, it is also possible to shift its rejection band in the frequency spectrum.

Keywords: FDTD Method, Graphene, Matrix Exponential Method, Smart FSS.

Lista de ilustrações

Figura 1 – Modelo do dispositivo apresentado em [21], atuando como modulador óptico ultrarrápido. 21
Figura 2 – Tipos de filtro de sinais eletromagnéticos produzidos por FSS, de período D, sobre um substrato de espessura h, permissividade relativa ε_r e aresta a do elemento. Em (a) é ilustrado um filtro rejeita-faixa e (b) passa-faixa. 25
Figura 3 – Forno de micro-ondas, ilustrando um anteparo (FSS) colocado na porta do forno. 26
Figura 4 – Esquemático que ilustra uma FSS operando na recepção de um sinal via satélite. Isso permite que duas antenas, operando em bandas de frequências diferentes, recebam o sinal em suas respectivas bandas de operação. 27
Figura 5 – Em (a), uma antena corneta é envolto por um *radome*, criado a partir de uma FSS. Em (b) é ilustrado parte da FSS que compõe o *radome*. 27
Figura 6 – Exemplos de elementos pertencentes ao grupo 1. 28
Figura 7 – Exemplos de elementos pertencentes ao grupo 2. 28
Figura 8 – Exemplos de elementos pertencentes ao grupo 3. 29
Figura 9 – Exemplo de um elemento (espira circunscrita a um *patch* quadrado) pertencente ao grupo 4. 29
Figura 10 – Alótropos do carbono: (a) grafeno, (b) fulereno, (c) grafite e (d) nanotubo de carbono. As esferas apresentadas nas figuras representam os átomos de carbono, e o segmento que as une representa as ligações covalentes. 32
Figura 11 – Esquemático representando a distribuição elétrônica e seus *spins* correspondentes em: (a) átomo de carbono e (b) grafeno. Em (c), é representado a disposição dos orbitais no grafeno, de modo que em verde são ilustradas as ligações do tipo π produzidas pelos elétrons no orbital $2p_z$, e em azul, as ligações do tipo σ, devido aos elétrons nos orbitais sp^2 33
Figura 12 – Parte da rede cristalina em forma de favo de mel, com a célula unitária sendo o paralelogramo equilátero, representado em linha tracejada. A base da rede de Bravais é definida pelos dois átomos A e B. 34
Figura 13 – Rede recíproca do grafeno. Em cinza, está ilustrado a primeira zona de Brillouin. 36

Figura 14 – Diagrama de banda no grafeno: (a) em duas dimensões (adaptada de [88]), (b) em três dimensões, ilustrando a intersecção das bandas de condução e valência nos 6 pontos K da zona de Brillouin e (c) em baixas energias, com o ponto de Dirac apresentado. 38
Figura 15 – Exemplo dos tipos de condutividade formadas, a partir das interações intra e interbanda. Abaixo do ponto de Dirac é ilustrada a banda de valência e acima, a banda de condução. 39
Figura 16 – Condutividade superficial intrabanda em função da frequência, para um aumento gradual do potencial químico μ_c, utilizando-se os parâmetros $T = 300$ K e $\tau = 0{,}5$ ps. Em (a) é a parte real da condutividade e (b) a parte imaginária. 40
Figura 17 – λ_{SPP} em função da frequência para vários valores de potenciais químicos. . 40
Figura 18 – $\Re\{k_{SPP}\}/k_0$ em função da frequência, para várias geometrias de folhas de grafeno. Para a folha com área infinita, (3.12) foi considerado para o cálculo de k_{SPP}. 41
Figura 19 – Condutividade superficial interbanda em função da frequência, para um aumento gradual do potencial químico μ_c, utilizando-se os parâmetros $T = 300$ K e $\tau = 0{,}5$ ps. Em (a) é a parte real da condutividade e (b) a parte imaginária. 42
Figura 20 – Célula de Yee representada no espaço tridimensional 45
Figura 21 – Distribuição das parâmetros σ_l e κ_l, onde l é x ou y, em um domínio numérico contendo região de análise e CPML 50
Figura 22 – Modelagem FDTD do grafeno na célula de Yee (i, j, k) com base em equações de atualizações específicas para as componentes tangenciais de $\vec{E}$ e $\vec{J}$, sob influência de $B = B_0\hat{a}_z$. 52
Figura 23 – Geometria da FSS de [1] (vista em perspectiva de parte da estrutura periódica). 58
Figura 24 – Validação da metodologia desenvolvida pelo FDTD: coeficiente de transmissão de co-polarização. 59
Figura 25 – A célula unitária da FSS proposta neste trabalho para alteração dinâmica do estado de operação e sintonização inteligente de banda(s) de rejeição. 60
Figura 26 – Comparação entre os resultados do FDTD e HFSS: Coeficiente de transmissão de co-polarização da FSS para o anel de grafeno, com abertura retangular de dimensões $d = 0{,}25$ μm e $l = 2{,}25$ μm, sem a folha interna de grafeno. Para o anel de grafeno, μ_{ce} é definido como 1 eV. 61

Figura 27 – $\vec{J}_s$ (A/m^2) para as seguintes FSSs: (a) anel quadrado apenas, $\mu_{ce} = 1$ eV e $d = l = 2{,}25\mu$m em $f = 3{,}29$ THz e (b) anel quadrado com a folha de grafeno em sua abertura, $\mu_{ce} = 0{,}75$ eV, $\mu_{ce} = 1$ meV e $a = 100$ nm, para $f = 2{,}65$ THz (primeira ressonância). 62
Figura 28 – $\vec{J}_s$ (A/m^2) para as FSSs configuradas com $\mu_{ce} = 1$ eV e com os seguintes parâmetros: (a) $d = 0{,}25$ μm e $l = 2{,}25$ μm para $f = 3{,}39$ THz (primeira ressonância, sem folha de grafeno na abertura do anel), (b) $d = 0{,}25$ μm e $l = 2{,}25$ μm para $f = 6{,}93$ THz (segunda ressonância, sem folha de grafeno na abertura do anel), (c) $\mu_{ci} = 1$ eV e $a = 100$ nm, para $f = 2{,}78$ THz (primeira ressonância da FSS proposta), (d) $\mu_{ci} = 1$ eV e $a = 100$ nm, para $f = 6{,}21$ THz (segunda ressonância da FSS proposta). 64
Figura 29 – Malha gerada no HFSS para modelagem da FSS com $a = 100$ nm. Os Detalhes de malha estão destacados. 65
Figura 30 – Coeficiente de transmissão de co-polarização para $a = 100$ nm, para as duas configurações de operação da FSS proposta. 66
Figura 31 – Coeficiente de transmissão para as configurações analisadas. 67
Figura 32 – Distribuição da densidade de corrente superficial $\vec{J}_s$ (A/m^2) para a configuração $\mu_{ce} = \mu_{ci} = 1$ eV: (a) na primeira ressonância (2,78 THz) e (b) na segunda ressonância (6,21 THz). 69
Figura 33 – Distribuição de $\vec{J}_s$ (A/m^2) para a configuração $\mu_{ce} = 1$ eV / $\mu_{ci} = 0{,}6$ eV: (a) 2,73 THz e (b) 5,09 THz. 69
Figura 34 – Coeficientes de transmissão ilustrando o deslocamento de ambas as bandas de rejeição do modo *on*, devido ao ajuste de μ_{ce}. 72
Figura 35 – Coeficientes de transmissão para as duas configurações iniciais ilustrativas, exibindo o deslocamento de ambas as bandas. 73
Figura 36 – Coeficiente de transmissão para as configurações analisadas, ilustrando o deslocamento controlado da banda inferior de rejeição. 74
Figura 37 – Distribuição da densidade de corrente superficial $\vec{J}_s$ (A/m^2) para a configuração $\mu_{ce} = 1$ eV / $\mu_{ci} = 0{,}55$ eV: (a) na primeira ressonância (2,71 THz) e (b) na segunda ressonância (4,91 THz). 75
Figura 38 – Distribuição da densidade de corrente superficial $\vec{J}_s$ (A/m^2) para a configuração $\mu_{ce} = 0{,}55$ eV / $\mu_{ci} = 0{,}65$ eV: (a) na primeira ressonância (2,07 THz) e (b) na segunda ressonância (4,88 THz). 76
Figura 39 – Coeficiente de transmissão ilustrando o deslocamento da banda de rejeição do modo *off* a partir do ajuste de μ_{ce}. 77

Lista de tabelas

Tabela 1 – Bandas de rejeição das FSSs 66
Tabela 2 – λ_0 (comprimento de onda no vácuo) e λ_{SPP} (comprimento de onda no grafeno) para várias condições de interesse. 71
Tabela 3 – Largura de banda relativa para as bandas de rejeição produzidas pela FSS operando no modo *on*, para cada configuração de potenciais químicos. . . . 78
Tabela 4 – Largura de banda relativa para as bandas de rejeição produzidas pela FSS operando no modo *off*, para cada configuração de potenciais químicos. . . . 78

Lista de abreviaturas e siglas

FDTD	*Finite-Difference Time-Domain*
CPML	*Convolutional Perfectly Matched Layers*
HFSS	*High Frequency Structure Simulator*
FSS	*Frequency Selective Surfaces*
SPP	*Surface Plasmons Polaritons*
TM	*Transverse Magnetic*
ABCs	*Absorbing Boundary Conditions*

Lista de símbolos

$\vec{E}$	Vetor Intensidade de Campo Elétrico
$\vec{H}$	Vetor Intensidade de Campo Magnético
$\vec{D}$	Vetor Densidade de Fluxo Elétrico
$\vec{B}$	Vetor Densidade de Fluxo Magnético
$\vec{J}$	Vetor Densidade de Corrente Elétrica
$\dfrac{\partial f}{\partial a}$	Derivada Parcial de f em relação a a
$\nabla \times \vec{H}$	Operador Rotacional de $\vec{H}$
ε_0	Permissividade Elétrica do Vácuo
ε	Permissividade Elétrica
ε_r	Permissividade Elétrica Relativa
μ	Permeabilidade Magnética do Meio
σ	Condutividade Elétrica
ω	Frequência Angular
Δ_x, Δ_y e Δ_z	Incrementos Espaciais
Δ_t	Incremento Temporal
(i, j, k)	Endereçamento no Espaço Discretizado
n	Número de Iterações no Tempo
$\tilde{E}_z$	Transformada de Fourier da componente z do Campo Elétrico
$\tilde{\boldsymbol{E}}$	Transformada de Fourier do vetor campo elétrico
$A * B$	Convolução entre as grandezas A e B
j	Unidade Imaginária

E_F	Nível de Fermi
f	Frequência
λ	Comprimento de Onda
v_f	Velocidade de Fermi
Γ	Taxa de Espalhamento
τ_0	Tempo de Relaxação
μ_c	Potencial Químico
q_e	Carga do Elétron
T	Temperatura
λ_{SPP}	Comprimento de Onda Plasmônico

Sumário

1 INTRODUÇÃO . . . 19
1.1 Estado da arte . . . 19
1.2 Objetivos . . . 22
1.3 Organização do trabalho . . . 23

2 FSS (*FREQUENCY SELECTIVE SURFACE*) . . . 24
2.1 Contexto histórico e algumas aplicações . . . 24
2.2 Principais geometrias para a célula unitária . . . 26
2.3 Métodos de análise . . . 29

3 GRAFENO . . . 31
3.1 Propriedades eletrônicas e estrutura cristalina . . . 31
3.1.1 A rede direta . . . 32
3.1.2 Rede recíproca . . . 35
3.2 Condutividade superficial . . . 37

4 O MÉTODO FDTD E MODELAGEM NUMÉRICA DO GRAFENO . . . 44
4.1 Precisão e estabilidade . . . 47
4.2 Condição de fronteira absorvente - CPML . . . 48
4.3 Modelagem numérica de folhas de grafeno via método FDTD . . . 52

5 PROJETO DA FSS INTELIGENTE E RESULTADOS OBTIDOS . . . 57
5.1 Validação da formulação FDTD para folhas de grafeno . . . 57
5.2 Projeto de uma FSS inteligente de grafeno operando como filtro *dual-band* ou *single-band* . . . 59
5.3 Controle inteligente da(s) banda(s) de rejeição . . . 66
5.3.1 Ajuste somente da banda superior de rejeição (modo *on*) . . . 67
5.3.2 Ajuste simultaneamente das duas bandas de rejeição (modo *on*) . . . 71
5.3.3 Ajuste somente da banda inferior de rejeição (modo *on*) . . . 72
5.3.4 Ajuste da banda de rejeição de modo *off* . . . 77

6 CONCLUSÃO . . . 79
6.1 Propostas para trabalhos futuros . . . 79

6.2 Publicações geradas 80

REFERÊNCIAS 81

1 Introdução

Nos últimos anos, o interesse por dispositivos operando na faixa de terahertz ($0{,}1 - 10$ THz) tem crescido por parte da comunidade científica [1–3]. Dispositivos, por exemplo, que usam comunicação sem fio (*wireless*), ao operarem nessa faixa, podem ter elevadas taxas de transmissão de dados, em torno de 100 Gbit/s [4, 5]. A atenção dada à faixa de terahertz surgiu em decorrência da descoberta experimental do grafeno e suas ótimas características físicas e elétricas [6]. Tais características são exploradas no projeto de inúmeros dispositivos, permitindo-os operar na faixa de terahertz, tais como antenas e outras estruturas reconfiguráveis [7, 8]. Desde então, a comunidade científica tem seus esforços voltados para o grafeno, através do estudo e desenvolvimento de dispositivos que utilizem tal material. Nesse contexto, FSSs são ótimas candidatas a terem suas células unitárias constituintes de grafeno [1].

FSSs são estruturas periódicas que atuam como filtros de sinais eletromagnéticos, podendo ser do tipo passa-faixa ou rejeita-faixa, dependendo dos seus parâmetros físicos e elétricos constituintes [9, 10]. É comum a estrutura ter sua célula unitária constituída por metal e possuindo certa geometria, cuja resposta em frequência do dispositivo seja na região de micro-ondas [11]. No entanto, FSSs tradicionais (metálicas) não possuem ajuste dinâmico de bandas de rejeição. Para possibilitar esta funcionalidade, o grafeno tem sido incorporado em projetos de FSS [12]. Isso é possível graças ao controle dinâmico da condutividade superficial do grafeno, através do ajuste do potencial químico. Dessa forma, é possível modificar o nível de reflexão ou transmissão para onda incidente na FSS. Além disso, a mudança do potencial químico altera o comprimento de onda plasmônico no grafeno, deslocando a frequência de ressonância do dispositivo [13]. Consequentemente, as bandas de rejeição podem ser ajustadas dinamicamente.

1.1 Estado da arte

Em 2004, foi publicado o primeiro trabalho acerca da obtenção experimental do grafeno [14]. Nesse experimento, com o intuito de extrair camadas de um cristal de grafite, foi realizada uma esfoliação mecânica com o uso de uma fita adesiva no cristal. Em seguida, essas camadas que foram extraídas, presentes na fita adesiva, eram transferidas para um subtrato, cuja composição era baseada em silício e dióxido de silício. Dessa forma, através da microscopia óptica, pôde-se confirmar que havia sido isolada uma única camada de átomos de carbono. Assim, as propriedades constituintes do grafeno puderam ser caracterizadas, sendo objeto de estudo desde então [6, 14].

Considerando FSSs formadas de grafeno, em 2015, Lin *et al.* [1] investigaram uma FSS com células unitárias formadas de *patches* quadrados de grafeno, sujeitas a uma densidade de fluxo magnético $\vec{B}$ externa, normal ao plano da FSS. Em [1], a folha de grafeno possui aresta de $4{,}5$ μm e o período da FSS é de 5 μm. Além disso, é desenvolvida uma expressão para a impedância superficial de folhas de grafeno magnetizadas. A partir dessa impedância, é utilizado o modelo de circuito equivalente para o cálculo dos coeficientes de transmissão e reflexão da FSS. Ao fim, esse modelo proposto é validado com o *software* comercial HFSS, avaliando-se os efeitos da magnetização das folhas de grafeno. Também, foram analisados os efeitos da rotação de Faraday [15].

No ano seguinte, Khoozani *et al.* [16] analisaram três FSSs constituídas de grafeno. A primeira, continha uma célula unitária formada por um *patch* retangular de grafeno. A segunda possuía uma célula unitária formada por um anel de grafeno de abertura retangular. Em seguida, foi analisada uma FSS de duas camadas, resultado da união das duas FSSs anteriores, ou seja, acima estava posicionada a FSS formada pelo *patch* retangular de grafeno e, abaixo, a FSS formada pelo anel retangular. Em todas as FSSs analisadas, foi levada em consideração a influência da densidade de fluxo magnético externa e do ângulo de incidência para onda plana (excitação das estruturas). Para avaliar as respostas em frequência das FSSs em questão, os autores de [16] propuseram uma formulação baseada em linhas de transmissão para folhas de grafeno magnetizadas. Além disso, um algoritmo recursivo foi proposto a fim de obter a magnitude e fase das componentes de campo na estrutura.

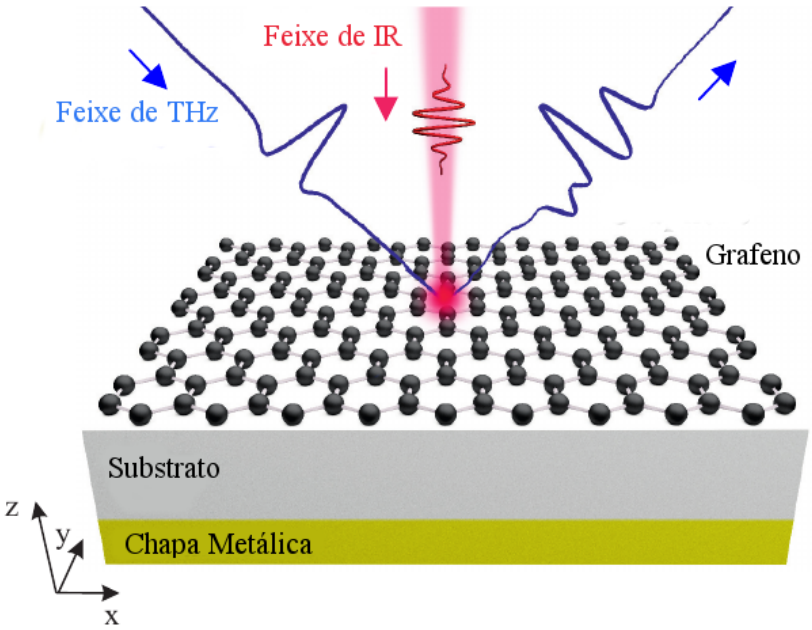
Em 2017, Chen *et al.* [8] utilizaram o método *Alternating-Direction-Implicit Finite-Difference Time-Domain* (ADI-FDTD) [17] para analisar a resposta em frequência de uma FSS baseada em grafeno. Através do uso do método ADI-FDTD, foi possível diminuir o tempo de simulação computacional, devido ao aumento do passo de tempo Δ_t ter sido superior ao dado pelo limite de Courant [18]. Além disso, diferentemente dos trabalhos apresentados em [1, 16], citados anteriormente, foi levada em consideração a contribuição interbanda no cálculo da condutividade superficial do grafeno. Isso foi possível graças a aproximação da condutividade interbanda feita através do aproximador de Padé [19]. Por fim, os resultados gerados foram validados, comparando-se com os obtidos pelo *software* CST [20].

Em 2018, Qu *et al.* [12] apresentaram uma FSS e uma antena dipolo, ambos reconfiguráveis. Isso foi possível a partir do ajuste do potencial químico nos elementos de grafeno contidos nas células unitárias, presentes na FSS. O deslocamento da banda de rejeição foi alcançado à medida em que o potencial químico foi incrementado. Seu valor foi variado de 0 a 1 eV. Dessa forma, a banda de rejeição pôde ser deslocada de $1{,}65$ a $2{,}19$ THz. Após a conclusão do projeto

da FSS, esta funcionou como um refletor para uma antena dipolo. Dessa forma, foram verificadas alterações no diagrama de radiação da antena, a partir da mudança do potencial químico dos elementos de grafeno na FSS. Por exemplo, para potencial químico nulo, a FSS tornou-se praticamente transparente, tornando o diagrama de radiação da antena omnidirecional, tal qual uma antena dipolo tradicional. O *layout* do diagrama é alterado através do ajuste do potencial químico da FSS e do dipolo. Com isso, é caracterizada a reconfigurabilidade da estrutura.

Em 2019, Tasolamprou *et al.* [21] apresentaram um modulador óptico ajustável ultrarrápido, operando no regime de THz, baseado nas características de absorção presentes no grafeno. O dispositivo proposto por [21] foi modelado numericamente através de simulações realizadas no *software* COMSOL e validado por meio de demonstração experimental. Sua construção consistiu em uma folha de grafeno obtida a partir da deposição de vapor químico (CVD-*grown*). Abaixo da folha, um substrato de espessura $20\ \mu$m e permissividade relativa $\varepsilon_r = 3{,}9$, foi adicionado. Além disso, abaixo do substrato, uma chapa metálica serviu como plano de terra. O esquemático do dispositivo proposto está sendo ilustrado na Fig.

Figura 1 – Modelo do dispositivo apresentado em [21], atuando como modulador óptico ultrarrápido.



Fonte: Adaptada de [21].

Na estrutura proposta, foram observados altos níveis de absorção presentes no grafeno (em torno da frequência de 2 THz), decorrentes de interferências constrututivas entre as ondas

refletidas e transmistidas. Em seguida, o sinal proveniente de absorção, foi modulado por meio da incidência de um feixe no regime óptico na folha de grafeno. Tal feixe, foi responsável pela modificação (diminuição) na condutividade da folha de grafeno, de um incremento $\Delta\sigma(\omega)$. Este incremento, por sua vez, foi proposto segundo um modelo de Drude-Lorentz. A modulação do sinal de absorção foi ultrarrápida, da ordem de $2{,}79$ ps, correspondendo cerca de 40 % do sinal de absorção, sem a modificação da condutividade do grafeno.

Em 2019, Dmitriev e Nascimento [22] apresentaram uma FSS, cuja célula unitária é formada por dois aneis concêntricos de grafeno, sobre um substrato dielétrico com permissividade relativa $\varepsilon_r = 3{,}75$. Tal geometria, aliada aos diferentes diâmetros para os aneis, produz um filtro passa faixa para a FSS, de modo que sua ressonância possui fraca dependência com a polarização e o ângulo de onda incidente. Além disso, através de modificações adequadas na célula unitária, a FSS resultante pode operar como um filtro eletromagnético ou como um *switch* de sinais eletromagnéticos.

1.2 Objetivos

Neste trabalho, uma FSS inteligente composta apenas de elementos de grafeno e por um substrato de vidro é projetada. A reconfigurabilidade é obtida otimizando uma célula unitária contendo um anel de grafeno e uma folha de grafeno colocada em sua abertura. Ao ajustar os potenciais químicos de dois elementos de grafeno da célula unitária, a FSS pode operar como: a) filtro *single-band* reconfigurável ou b) filtro *dual-band* reconfigurável. Quando a FSS projetada opera no modo *single-band*, ela fornece reconfiguração dinâmica de frequência da banda de rejeição. Por outro lado, quando a FSS opera no modo *dual-band*, ela produz as seguintes características: b.1) reconfiguração dinâmica de frequência de qualquer uma das bandas de rejeição individualmente, isto é, mantendo a outra fixa, b.2) deslocamento dinâmico de frequência de ambas as bandas de rejeição simultaneamente.

Além disso, uma formulação FDTD, baseada na técnica exponencial matriz [23], é implementada para o cálculo dos vetores de campo elétrico e densidade de corrente elétrica em folhas de grafeno. Tal formulação apresenta correções numéricas para caracterizar adequadamente a interdependência física entre as componentes x e y do vetor densidade superficial de corrente $\vec{J}$, representada pela natureza tensorial da condutividade elétrica do grafeno. A formulação proposta e a FSS inteligente são validadas através de comparações de soluções FDTD com resultados produzidos pelo *software* comercial HFSS [24].

1.3 Organização do trabalho

O atual capítulo apresenta uma contextualização na qual esse trabalho está inserido, juntamente com uma breve revisão literária acerca dos trabalhos publicados relacionados às FSSs constituídas de grafeno. Em seguida, são apresentados os objetivos do dispositivo projetado neste trabalho. Os demais capítulos são descritos a seguir:

O Capítulo 2 apresenta os conceitos relativo às FSSs, suas principais características e os tipos de geometrias possíveis para a célula unitária. Além disso, são apresentadas algumas aplicações utilizando FSSs metálicas.

O Capítulo 3 apresenta a base teórica para o grafeno. São estudadas sua estrutura cristalina, suas propriedades físicas e elétricas. Por fim, são analisadas a condutividade superficial do grafeno e o efeito da densidade de fluxo magnético em folhas de grafeno. Ainda, é analisado o efeito do comprimento de onda plasmônico em folhas de grafeno com áreas finitas e infinitas, regulado através do potencial químico.

O Capítulo 4 apresenta o método FDTD. São discutidas a precisão e estabilidade do método, além do tipo de técnica responsável pela truncagem do domínio de análise. Ao fim, é proposta uma formulação para o tratamento correto dos campos elétrico e densidade de corrente em folhas de grafeno de áreas finitas.

No Capítulo 5, é apresentado o projeto da FSS proposta. Inicialmente, a formulação apresentada no capítulo anterior é validada através da comparação com o *software* comercial HFSS. Em seguida, os passos obtidos para o projeto da FSS, bem como os resultados que mostram a reconfigurabilidade do dispositivo final, são apresentados.

Finalmente, no Capítulo 6 são apresentadas a conclusão e as propostas para trabalhos futuros.

2 FSS (*Frequency Selective Surface*)

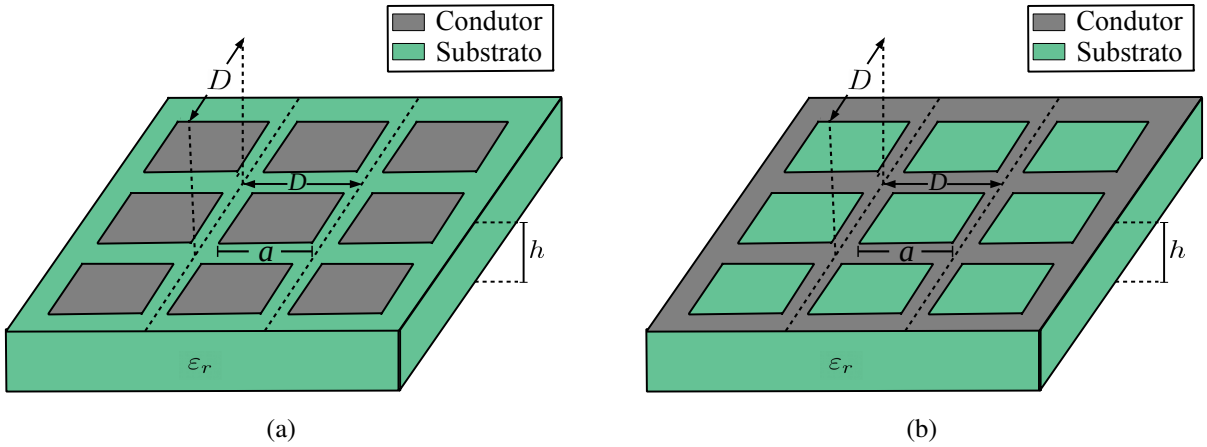
Superfícies seletivas de frequência (FSS) são estruturas periódicas que atuam como filtros de sinais eletromagnéticos [9,10,25,26]. Formadas por células dispostas em um arranjo periódico bidimensional, com período D (ver Fig. 2), a FSS pode se comportar como filtro rejeita-faixa ou passa-faixa. O projeto desses filtros está intimamente relacionado com os parâmetros construtivos da FSS. Nesse sentido, pode-se destacar: as dimensões da célula unitária, geometria e tipo de material dos elementos condutores, a espessura e parâmetros eletromagnéticos do substrato, bem como ao ângulo de incidência de onda plana [10, 25].

Na Fig. 2 estão ilustradas FSSs com células unitárias dispostas periodicamente (período igual a D) sobre um substrato de espessura h, permissividade relativa ε_r e aresta a do elemento (condutor ou abertura). A configuração ilustrada na Fig. 2(a) apresenta elementos condutores compondo as células unitárias. Conhecida como FSS capacitiva [9], esta produz um filtro rejeita-faixa, ou seja, há uma faixa de frequências em que os elementos condutores, ao entrar em ressonância, produzem um mínimo no nível de transmissão para a onda incidente. Por outro lado, a Fig. 2(b) ilustra uma FSS indutiva [9], que é formada por elementos do tipo abertura. Diferentemente da configuração ilustrada na Fig. 2(a), ao entrar em ressonância, a estrutura torna-se transparente à onda incidente, produzindo uma banda de frequências em que um máximo no nível de transmissão é observado, conferindo à estrutura a funcionalidade de um filtro passa-faixa.

2.1 Contexto histórico e algumas aplicações

Os princípios físicos que regem a FSS podem ser entendidos, historicamente, com base em investigações de grades de difração em óptica, que produzem a decomposição de feixes de luz policromáticos em suas respectivas ordens espectrais. A descoberta desse processo de filtragem foi publicada em 1789 pelo físico americano David Rittenhouse. Rittenhouse observou que, ao posicionar um dispositivo construído com fios de cabelo, igualmente espaçados, em direção à luz, ocorria a filtragem da luz branca em faixas de comprimentos de onda distintos. Estes, por sua vez, eram igualmente espaçados da linha central da luz branca (não filtrada). Além disso, esse espaçamento dependia diretamente do espaçamento dos fios de cabelo [25, 27, 28]. Esses e outros experimentos contribuíram para a construção de FSSs, que teve significativos avanços no estudo de sua teoria a partir da década de 1960 [25], embora também exista registro de patente em 1919 [29].

Figura 2 – Tipos de filtro de sinais eletromagnéticos produzidos por FSS, de período D, sobre um substrato de espessura h, permissividade relativa ε_r e aresta a do elemento. Em (a) é ilustrado um filtro rejeita-faixa e (b) passa-faixa.



Fonte: O autor.

Este fenômeno descrito por Rittenhouse mostra a dependência das dimensões físicas (espaçamento entre os fios de cabelo) com a resposta em frequência do dispositivo. De maneira análoga, as dimensões das células unitárias constituintes da FSS (arranjo periódico bidimensional), bem como o espaçamento entre elas, contribui também para a forma como os campos são espalhados, transmitidos ou refletidos. Além disso, é observado que para FSSs, cujos elementos constituintes são metálicos, a ressonância ocorre quando o tamanho do elemento (período da FSS) é fração de meio comprimento de onda [25]. Para comprimentos de onda específicos, compatíveis com as dimensões das partes constituintes da célula unitária, a FSS metálica poderá produzir reflexão ou transmissão total para onda incidente [25].

A FSS possui aplicações em várias regiões do espectro eletromagnético. Sua principal aplicação é a filtragem de ondas eletromagnéticas em frequências específicas, servindo para um determinado fim. A aplicação mais comum é o anteparo da porta do forno de micro-ondas, tal como está ilustrado na Fig. 3. Este anteparo funciona como um filtro rejeita-faixa, transmitindo frequências presentes no espectro de luz visível para o observador, rejeitando a faixa de micro-ondas [27, 30].

Figura 3 – Forno de micro-ondas, ilustrando um anteparo (FSS) colocado na porta do forno.

Fonte: Adaptada de [31].

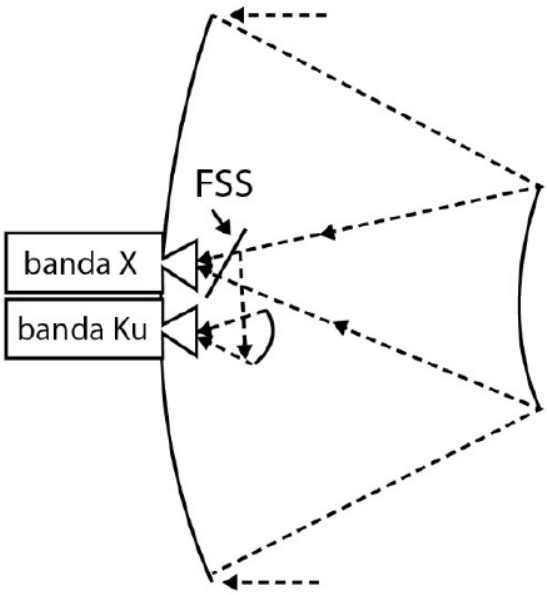
Em aplicações na região de micro-ondas, FSSs podem atuar na recepção de sinais via satélite. Na Fig. 4, está ilustrado um sistema, cujo o funcionamento permite que uma FSS transmita um sinal recebido via satélite para duas antenas receptoras, que operam em faixas de frequências diferentes. Quando o sinal enviado pelo satélite incide na FSS, a banda X ($8 - 12$ GHz), contida nesse sinal, é transmitida para uma antena receptora. Consequentemente, a parte desse mesmo sinal contendo a banda Ku ($12 - 18$ GHz) é refletida (direcionada) para uma segunda antena receptora que opera nessa faixa de frequências [32, 33].

FSSs também podem atuar como *radomes*. Nesse caso, a FSS consiste de elementos do tipo abertura, atuando como filtro passa-faixa. Dessa forma, pode-se acoplar *radomes* em automóveis e aeronaves a fim de garantir um espalhamento controlado de sinais eletromagnéticos [11, 35, 36]. A Fig. 5 ilustra um *radome* criado a partir de uma FSS, para avaliação do diagrama de radiação de uma antena corneta.

2.2 Principais geometrias para a célula unitária

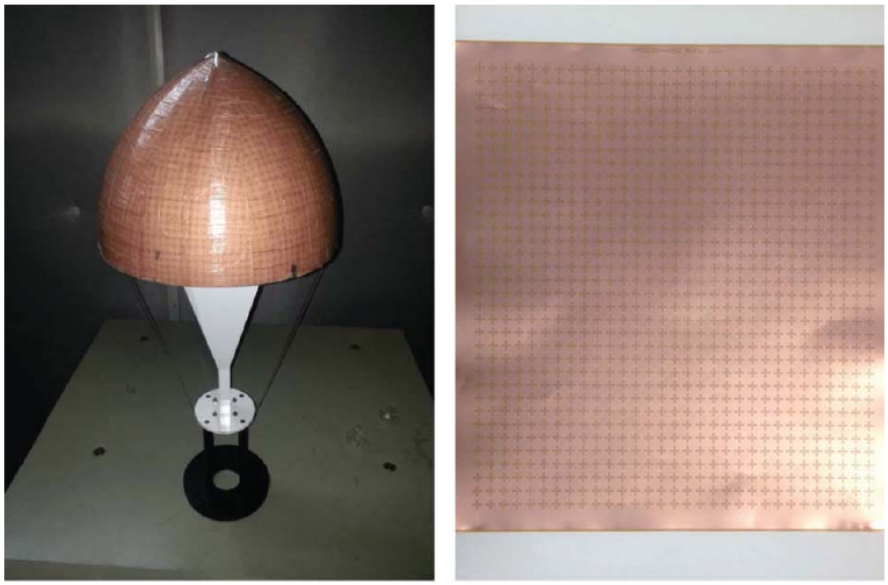
Existem inúmeras pesquisas na literatura referindo-se às variedades de formas geométricas dos elementos que compõem as FSSs. Em [10], elas são divididas em 4 grupos: o grupo 1 (geometrias cujos pólos são conectados pelo centro), o grupo 2 (espiras), o grupo 3 (elementos de interior sólido) e o grupo 4 (combinações entre os grupos anteriores). A Fig. 6 ilustra alguns elementos pertencentes ao grupo 1, tais como: dipolo retangular [10, 37, 38], dipolo cruzado [39–41], cruz de Jerusalém [39, 42, 43] e tripolo [44, 45].

Figura 4 – Esquemático que ilustra uma FSS operando na recepção de um sinal via satélite. Isso permite que duas antenas, operando em bandas de frequências diferentes, recebam o sinal em suas respectivas bandas de operação.



Fonte: Adaptada de [34].

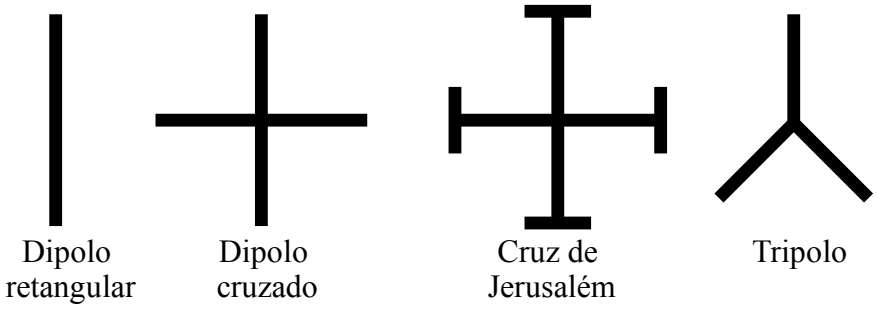
Figura 5 – Em (a), uma antena corneta é envolto por um *radome*, criado a partir de uma FSS. Em (b) é ilustrado parte da FSS que compõe o *radome*.



(a) (b)

Fonte: adaptada de [35].

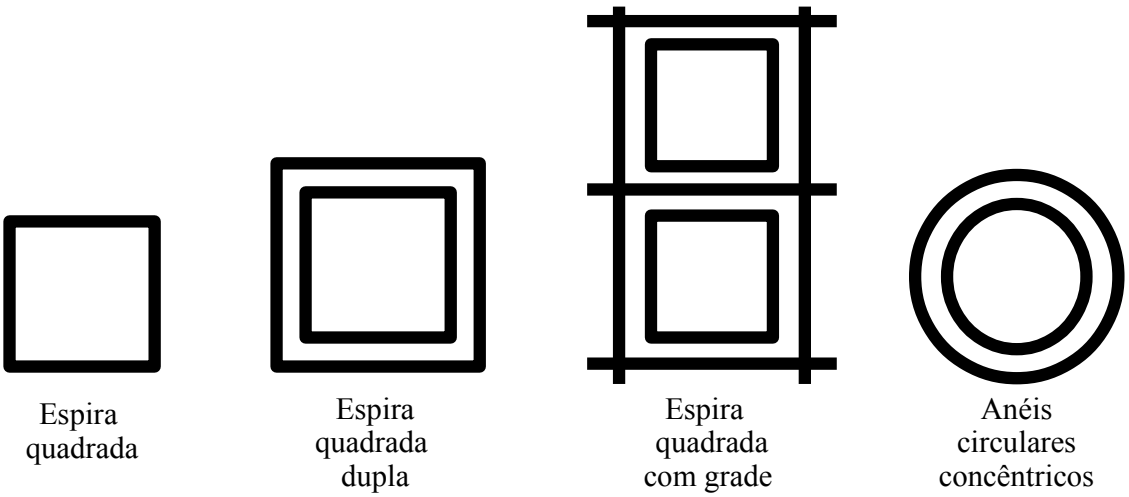
Figura 6 – Exemplos de elementos pertencentes ao grupo 1.



Fonte: Adaptada de [10, 26].

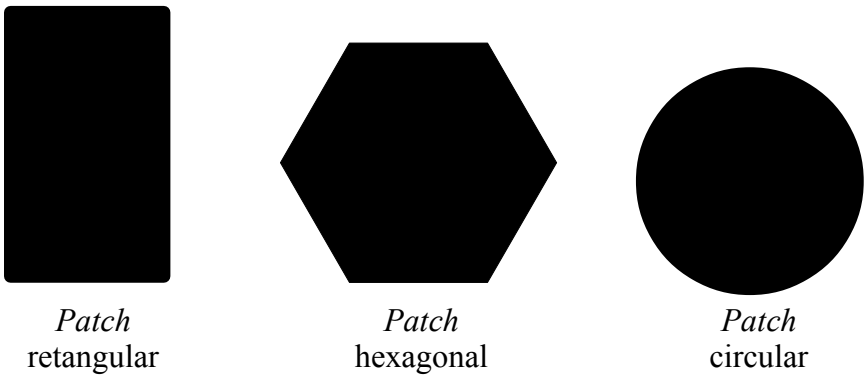
Exemplos de elementos pertencentes ao grupo 2 estão ilustrados na Fig. 7, tais como: espira quadrada [46–48], espira quadrada dupla [49], espira quadrada com grade [50] e anéis circulares concêntricos [51, 52]. A Fig. 8 ilustra exemplos de elementos que pertencem ao grupo 3. São eles: *patch* retangular [25, 27, 53], *patch* hexagonal [10, 54, 55]. Além disso, na Fig. 9 está ilustrado um elemento que corresponde ao grupo 4. Ele é uma combinação entre os elementos do grupo 2 (espira quadrada) e do grupo 3 (*patch* quadrado).

Figura 7 – Exemplos de elementos pertencentes ao grupo 2.



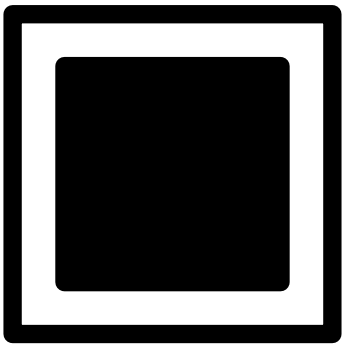
Fonte: Adaptada de [10, 26].

Figura 8 – Exemplos de elementos pertencentes ao grupo 3.



Fonte: Adaptada de [10, 26].

Figura 9 – Exemplo de um elemento (espira circunscrita a um *patch* quadrado) pertencente ao grupo 4.



Fonte: O autor.

2.3 Métodos de análise

Na literatura, existem algumas expressões aproximadas para análise de transmissão e reflexão de FSSs, considerando *patches* condutores e aberturas retangulares como células unitárias [56, 57]. No entanto, devido suas limitações, em determinados tipos de aplicações estas expressões podem produzir resultados imprecisos. A fim de contornar tal problema, um método simples bastante utilizado é o modelo do circuito equivalente [58]. Ele consiste em modelar as partes constituintes das FSSs utilizando elementos concentrados de circuitos (indutores e capacitores), como em uma linha de transmissão. Assim, a solução do circuito resultante fornece as características de transmissão e reflexão para a FSS. Este método é limitado em precisão, pois

utiliza uma análise quase-estática no cálculo das respostas via solução de circuitos concentrados. Porém, tal modelo é computacionalmente eficiente para FSSs metálicas [58–60].

Outro método utilizado é o da expansão modal, que permite uma análise em termos da resposta em frequência, bem como da polarização da onda incidente [61]. Além disso, métodos híbridos são utilizados, tais como: o método dos momentos em conjunto com elementos finitos [62]; interpolação racional de Krylov [63]; método dos momentos com o método BI-RME [64], dentre outros. Técnicas de inteligência artificial também têm sido empregadas em projetos de FSSs, tais como algoritmos genéticos [65, 66], redes neurais [67], etc. Por fim, um método que é bastante difundido para a análise de FSSs, é o método das diferenças finitas no domínio do tempo (FDTD) [68]. Devido sua praticidade no estudo e análise das características físicas e elétricas de FSSs, com geometrias retangulares, esta técnica é usada para projetar diversos dispositivos que fazem uso de FSSs, ou ainda, modelar numericamente protótipos de dispositivos, produzindo soluções completas de onda.

3 Grafeno

O grafeno é um material bidimensional formado por átomos de carbono dispostos em uma rede cristalina hexagonal, semelhantemente a um favo de mel, o que caracteriza-o como um alótropo do carbono [6, 13, 69, 70], tal como ilustra a Fig. 10(a). Dessa forma, ele possui a espessura de um átomo de carbono ($0{,}345$ nm) e, devido à sua geometria, o grafeno é a estrutura-base para os outros alótropos do carbono [71, 72].

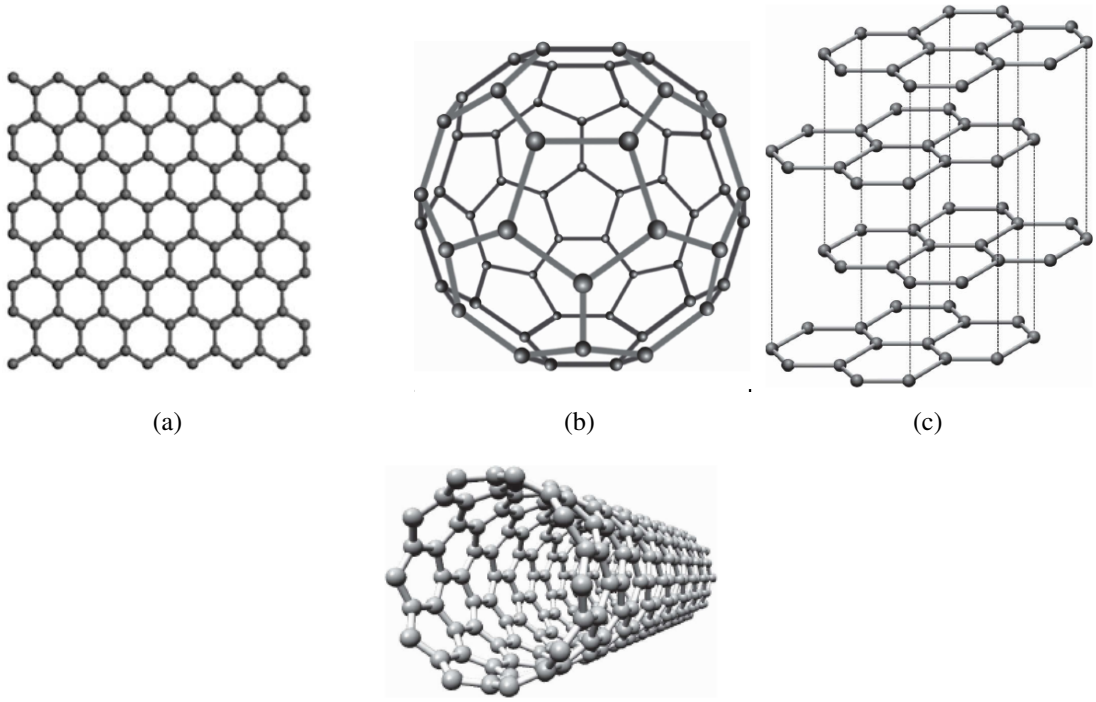
Dentre os alótropos do carbono, cita-se o *buckball* C_{60} (fulereno), que possui uma estrutura esférica comportando-se como um semicondutor, onde sua casca esférica é formada por grafeno, com aplicações em nanotecnologia, eletrônica e biomédica [73, 74] (Fig. 10(b)). A partir da disposição de folhas de grafeno empilhadas, forma-se o grafite. Este apresenta características similares às de um metal, com boa condutividade, atuando principalmente em componentes eletrônicos, tais como eletrodos, baterias e painéis solares [75–77] (Fig. 10 (c)). O grafeno ainda é elemento-base para a formação de nanotubo de carbono de geometria cilíndrica, com características metálicas ou de semicondutores, sendo também objeto de estudo nos campos da eletrônica, óptica e nanotecnologia [69, 74, 78] (Fig. 10(d)).

3.1 Propriedades eletrônicas e estrutura cristalina

As ótimas propriedades físicas e eletrônicas do grafeno são devidas à natureza das ligações covalentes entre os seus átomos de carbono [80, 81]. Para compreender esse fenômeno, parte-se da distribuição eletrônica do carbono. Este apresenta 4 elétrons na sua camada de valência, tendo eles a liberdade para interagir entre si, a fim de formar os vários tipos de alótropos, tais como o grafeno [69]. De acordo com o diagrama de Linus Pauling [82], no seu estado elementar (não excitado), o carbono apresenta os 4 elétrons nos orbitais $2s$ e $2p$, de acordo com a Fig. 11(a). Dessa forma, quando os átomos de carbono se ligam para a formação de algum sólido cristalino (alótropo), um dos elétrons do orbital $2s$ é excitado para o orbital $2p_z$ de maior energia, tal como ilustra a Fig. 11(b). Assim, ligações e interações ocorrem entre os elétrons presentes nos orbitais $2s$ e $2p$ de átomos de carbono vizinhos. Essas interações são chamadas de hibridização, e os diferentes tipos de orbitais híbridos formados, produzem os vários tipos de alótropos do carbono [69, 82, 83].

No grafeno, além de um dos elétrons do orbital $2s$, presente na camada de valência, ser excitado para o orbital $2p_z$, os orbitais $2s$ e $2p$ ($2p_x$ e $2p_y$) interagem formando três novos

Figura 10 – Alótropos do carbono: (a) grafeno, (b) fulereno, (c) grafite e (d) nanotubo de carbono. As esferas apresentadas nas figuras representam os átomos de carbono, e o segmento que as une representa as ligações covalentes.



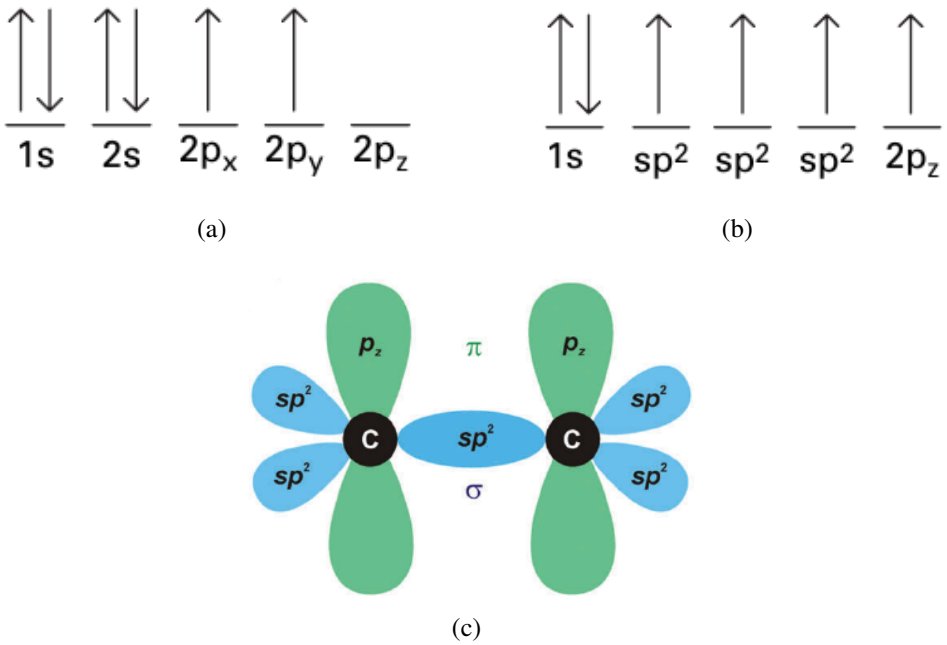
Fonte: Adaptada de [79, 80].

orbitais hibridizados sp^2 (Fig. 11(b)). Os novos orbitais sp^2 formam uma geometria trigonal plana ($120°$entre si), e seus elétrons são responsáveis pela ligação covalente do tipo σ entre os átomos de carbono (Fig. 11(c)). Esse tipo de ligação confere ao grafeno uma alta rigidez mecânica, devido à força da ligação σ. Além disso, o orbital $2p_z$ é perpendicular ao plano que contém os orbitais sp^2, e seus elétrons formam ligações covalentes do tipo π entre os átomos de carbono vizinhos (Fig. 11(c)). Essas ligações são fracas, porque os elétrons presentes no orbital $2p_z$ são fracamente ligados ao núcleo, sendo deslocalizados. Além disso, as altas mobilidades desses elétrons estão relacionadas diretamente com a condutividade elétrica do grafeno [80, 83, 84].

3.1.1 A rede direta

A estrutura física do grafeno depende da disposição dos átomos de carbono para formação do cristal, sendo de fundamental importância o estudo de sua estrutura cristalina [85, 86]. Nesse sentido, o grafeno apresenta um arranjo periódico de átomos de carbono. Estes podem ser

Figura 11 – Esquemático representando a distribuição elétrônica e seus *spins* correspondentes em: (a) átomo de carbono e (b) grafeno. Em (c), é representado a disposição dos orbitais no grafeno, de modo que em verde são ilustradas as ligações do tipo π produzidas pelos elétrons no orbital $2p_z$, e em azul, as ligações do tipo σ, devido aos elétrons nos orbitais sp^2



Fonte: Adaptada de [69, 84].

descritos por meio de uma célula unitária, a qual é definida por meio de pontos (átomos) e por uma rede. Assim, a rede cristalina pode ser construída por meio da repetição, sem sobreposição dos pontos, da célula unitária. Se, para qualquer átomo pertencente a esta rede, a disposição dos outros átomos vista em qualquer direção for a mesma, então ela é uma rede de Bravais [85]. Dessa forma, qualquer átomo pertencente à rede pode ser escrito em função dos vetores de rede primitiva, que são vetores de translação. Estes por sua vez, são combinações lineares dos vetores-base primitivos, definidos a partir da célula unitária da rede cristalina [69, 85, 86].

Assim, a rede direta para a estrutura cristalina do grafeno é uma rede de Bravais com base de dois átomos A e B (pontos que conectam anéis uns aos outros na rede cristalina), tal como ilustra a Fig. 12. Nesta figura, a célula unitária da rede de Bravais está representada pelo paralelogramo equilátero (linha tracejada), cuja aresta mede $a = \sqrt{3}a_{C-C} = 2{,}46$ Å, onde $a_{C-C} = 1{,}42$ Å é a distância entre dois átomos de carbono vizinhos. Portanto, os vetores-base

primitivos podem ser escritos por [69]

$$\vec{a}_1 = \left(\frac{\sqrt{3}a}{2}, \frac{a}{2}\right), \tag{3.1}$$

$$\vec{a}_2 = \left(\frac{\sqrt{3}a}{2}, -\frac{a}{2}\right), \tag{3.2}$$

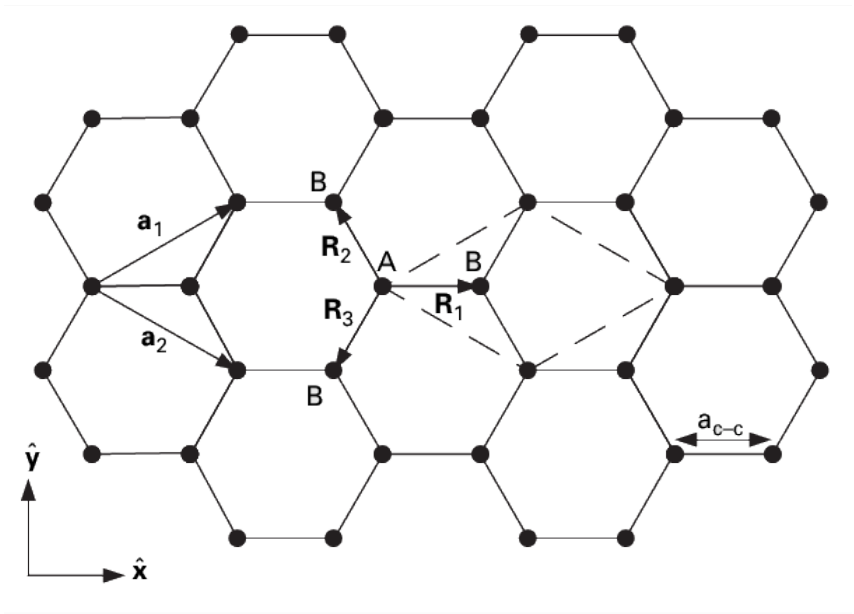
em que $|\vec{a}_1|= |\vec{a}_2|= a$. A partir da Fig. 12, observa-se que cada átomo de carbono pertencente à rede está ligado a três átomos vizinhos, de modo que a distância entre A e B, bem como a posição relativa aos outros átomos vizinhos, podem ser descritas em função dos vetores-base primitivos através de [69]

$$\vec{R}_1 = \left(\frac{a}{\sqrt{3}}, 0\right), \ \vec{R}_2 = -\vec{a}_2 + \vec{R}_1 = \left(-\frac{a}{2\sqrt{3}}, -\frac{a}{2}\right), \tag{3.3}$$

$$\vec{R}_3 = -\vec{a}_1 + \vec{R}_1 = \left(-\frac{a}{2\sqrt{3}}, \frac{a}{2}\right), \tag{3.4}$$

onde $|\vec{R}_1|= |\vec{R}_2|= |\vec{R}_3|= a_{C-C}$

Figura 12 – Parte da rede cristalina em forma de favo de mel, com a célula unitária sendo o paralelogramo equilátero, representado em linha tracejada. A base da rede de Bravais é definida pelos dois átomos A e B.



Fonte: Adaptada de [69].

3.1.2 Rede recíproca

A rede recíproca é fundamental para o estudo dos diagramas de bandas de energia no grafeno. Em outros materiais, através de suas redes recíprocas, analisam-se os dados obtidos a partir da difração de ondas eletromagnéticas ao incidir nesses materiais, bem como o comportamentos dessas ondas propagando-se no interior desses cristais [69, 80, 85].

Devido à periodicidade da rede cristalina, a rede recíproca pode ser obtida por meio do uso da transformada de Fourier. No grafeno, ela também pode ser obtida a partir da rotação de 90°em relação à rede direta [69, 85]. Os vetores da rede recíproca são dadas pela relação [69]

$$\tilde{\boldsymbol{b}}_1 = \left(\frac{2\pi}{\sqrt{3}a}, \frac{2\pi}{a}\right), \tag{3.5}$$

$$\tilde{\boldsymbol{b}}_2 = \left(\frac{2\pi}{\sqrt{3}a}, -\frac{2\pi}{a}\right), \tag{3.6}$$

com $|\tilde{\boldsymbol{b}}_1|= |\tilde{\boldsymbol{b}}_2|= \dfrac{4\pi}{\sqrt{3}a}$, conforme ilustra a Fig. 13. O cálculo das bandas de energias do grafeno se dá na região definida pela primeira zona de Brillouin, tal qual ilustra a Fig. 13. Essa região, por sua vez, é definida pela célula unitária de Wigner-Seitz [80, 85]. De acordo com a Fig. 13, a primeira zona de Brillouin é um hexágono regular com lado igual a $b_{ZB} = \dfrac{|\tilde{\boldsymbol{b}}_1|}{\sqrt{3}} = \dfrac{4\pi}{3a}$ e área igual a $\dfrac{8\pi^2}{\sqrt{3}a^2}$.

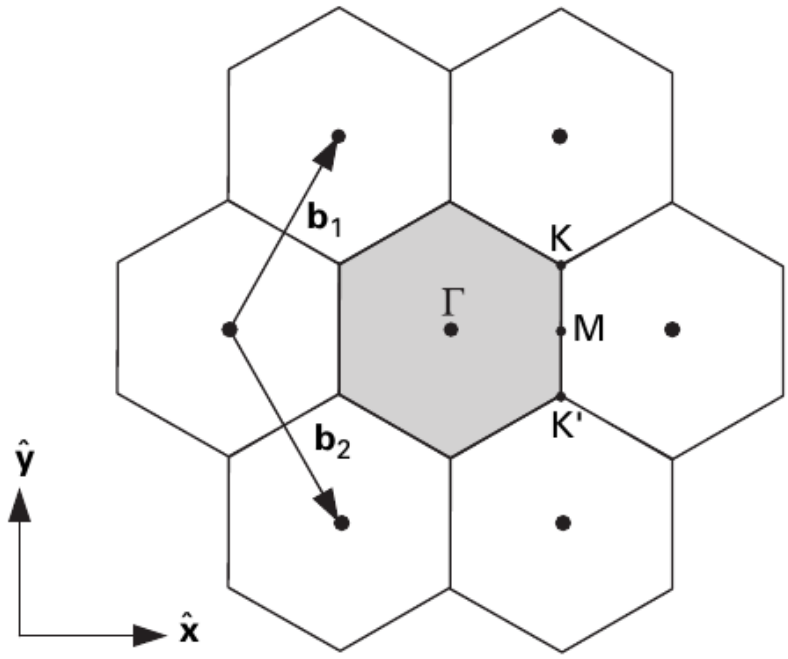
Na primeira zona de Brillouin existem três pontos de alta simetria que são importantes para o cálculo das relações de dispersão. São eles: Γ (no centro), M (no ponto médio de suas arestas) e K (nos vértices). Em relação ao centro (Γ), os vetores que descrevem a localização dos outros pontos podem ser escritos por

$$\widetilde{\boldsymbol{\Gamma M}} = \left(\frac{2\pi}{\sqrt{3}a}, 0\right), \tag{3.7}$$

$$\widetilde{\boldsymbol{\Gamma K}} = \left(\frac{2\pi}{\sqrt{3}a}, \frac{2\pi}{3a}\right), \tag{3.8}$$

onde $|\widetilde{\boldsymbol{\Gamma M}}|= \dfrac{2\pi}{\sqrt{3}a}$, $|\widetilde{\boldsymbol{\Gamma K}}|= \dfrac{4\pi}{3a}$ e $|\widetilde{\boldsymbol{MK}}|= \dfrac{2\pi}{3a}$

Figura 13 – Rede recíproca do grafeno. Em cinza, está ilustrado a primeira zona de Brillouin.



Fonte: Adaptada de [69].

No diagrama de banda do grafeno, as bandas de condução e valência interceptam-se nos seis pontos K da zona de Brillouin, conforme ilustrado na Fig. 14(b). Esse ponto é denominado ponto de Dirac, ou nível de Fermi (Fig. 14(c)) [69]. O grafeno é classificado como um semicondutor de *gap* nulo, visto que em outros materiais isolantes ou semicondutores, existe um *bandgap* entre as bandas de condução e valência. Além disso, o grafeno pode ser considerado um material semimetálico, devido à intersecção dos pontos de Dirac. Isso é devido à sobreposição das bandas de condução e valência nos metais para certos níveis de energia. [80, 85, 87].

Conforme ilustrado na Fig. 14(c), o diagrama de banda do grafeno é definido pelos dois cones de Dirac, interceptando-se no nível de Fermi. Esse ponto representa o nível energético associado ao maior estado ocupado pelo elétron em um sólido em repouso, à temperatura de 0 K. Em valores próximos a esse nível energético, a dispersão do grafeno comporta-se de forma linear. Esse comportamento garante aos elétrons π no grafeno, comportarem-se como férmions de Dirac (sem massa), devido estarem deslocalizados. Dessa forma, a condução dos elétrons no grafeno pode ser dada na velocidade de Fermi, a qual é aproximadamente $c/300$, sendo c a velocidade da luz no vácuo, conferindo ao grafeno uma importante característica na utilização de dispositivos nos campos da eletrônica e telecomunicações, bem como na miniaturização de tais

dispositivos. [69, 87, 88].

Outra característica importante do grafeno é a capacidade de mudança em seu transporte eletrônico. Para isso, é aplicada uma tensão de porta (V_g), a fim de mudar sua condutividade superficial [6, 14, 89]. Essa mudança é devido à alteração do potencial químico μ_c, que desloca o nível de Fermi, criando uma pequena sobreposição entre as bandas de condução e valência. Se, por exemplo $V_g > 0$, há um pequeno aumento no nível de Fermi, deslocando-se para a banda de condução, o que provoca o transporte por elétrons no grafeno. Por outro lado, se $V_g < 0$, o nível de Fermi caminha para a banda de valência, conferindo um transporte por meio de buracos no grafeno.

3.2 Condutividade superficial

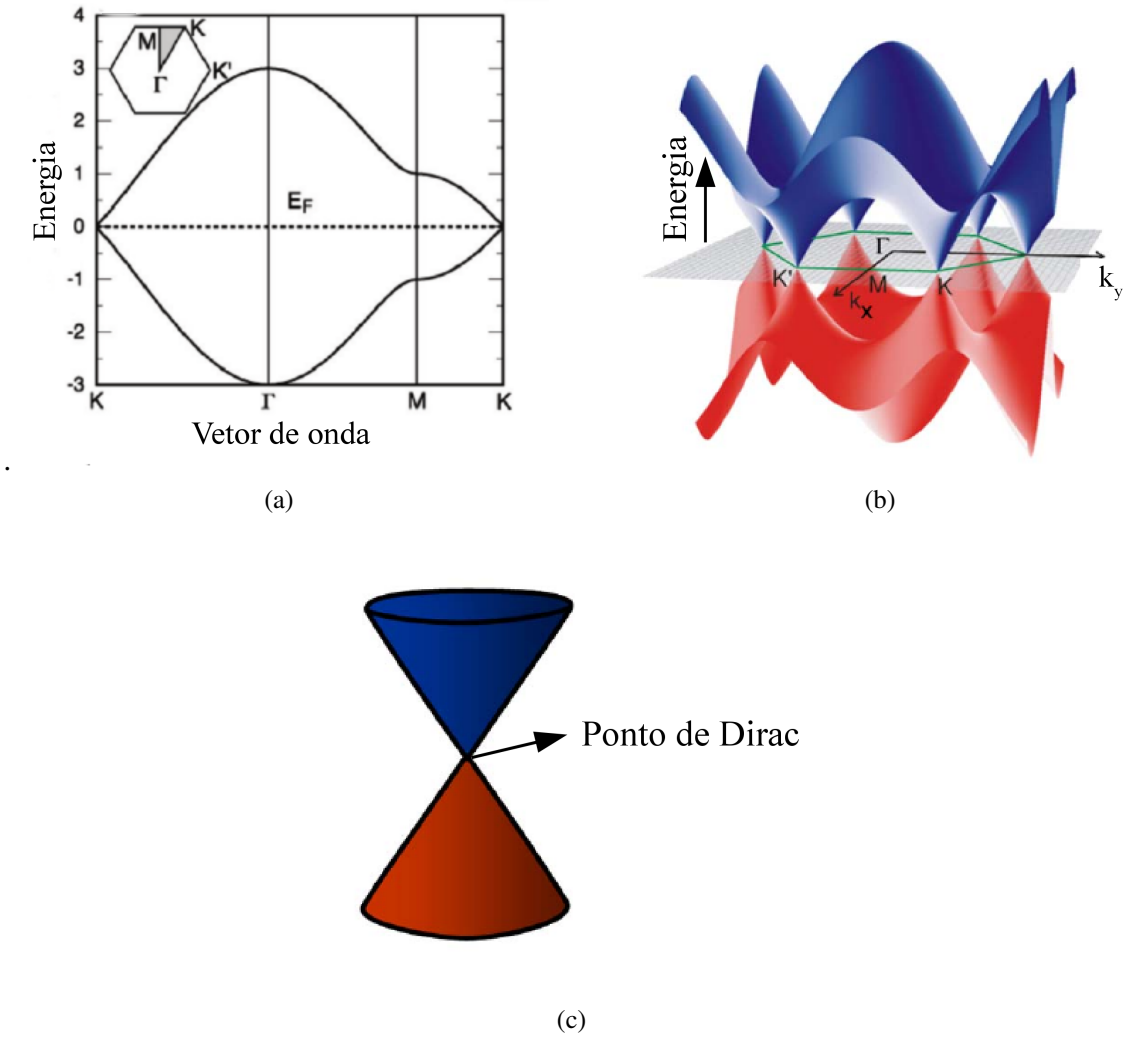
Um modelo matemático para a condutividade do grafeno é de suma importância para o seu correto tratamento na análise de problemas envolvendo o eletromagnetismo, bem como na modelagem de dispositivos. Além disso, a correta implementação da condutividade do grafeno em tais dispositivos, principalmente em análises computacionais, faz-se necessária.

A condutividade superficial do grafeno é assumida considerando uma folha de espessura infinitesimal, de modo que $\sigma = \sigma(\omega, \mu_c, \Gamma, T)$, onde ω é a frequência angular, μ_c é o potencial químico e $\Gamma = 1/(2\tau)$ é a taxa de espalhamento, e τ é o tempo de relaxação. Assim, considerando o formalismo de Kubo, a condutividade superficial é dada por [13, 70],

$$\tilde{\sigma}(\omega, \mu_c, \Gamma, T) = \frac{\mathbf{j}{q_e}^2 (\omega - \mathbf{j}2\Gamma)}{\pi\hbar^2} \left[\frac{1}{(\omega - \mathbf{j}2\Gamma)^2} \int_0^\infty \varepsilon \left(\frac{\partial f_d(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} - \frac{\partial f_d(-\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \right) \mathrm{d}\varepsilon \right.$$
$$\left. - \int_0^\infty \frac{f_d(-\varepsilon) - f_d(\varepsilon)}{(\omega - \mathbf{j}2\Gamma)^2 - 4\,(\varepsilon/\hbar)^2} \mathrm{d}\varepsilon \right]. \tag{3.9}$$

Em (3.9), q_e é a carga do elétron, $\mathbf{j} = \sqrt{-1}$, $\hbar = h/(2\pi)$ é a constante reduzida de Plank, ε a energia e $f_d(\varepsilon) = \left(e^{(\varepsilon-\mu_c)/k_B T} + 1\right)^{-1}$ é a distribuição de Fermi-Dirac, em que k_B é a constante de Boltzmann. O primeiro termo na Eq. (3.9) é devido a contribuição da condutividade intrabanda (transições dentro da banda de condução ou valência) e o segundo termo, da condutividade interbanda (transição da banda de valência para a banda de condução). A Fig. 15 ilustra as interações entre as bandas de condução e valência.

Figura 14 – Diagrama de banda no grafeno: (a) em duas dimensões (adaptada de [88]), (b) em três dimensões, ilustrando a intersecção das bandas de condução e valência nos 6 pontos K da zona de Brillouin e (c) em baixas energias, com o ponto de Dirac apresentado.



(a) (b)

(c)

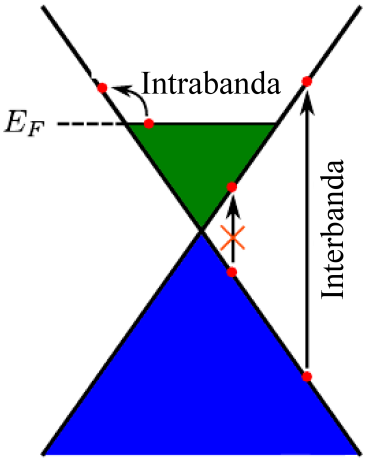
Fonte: Adaptada de [87].

A partir de (3.9), a condutividade intrabanda pode ser definida por [13]

$$\tilde{\sigma}_{intra}(\omega, \mu_c, \Gamma, T) = -\mathbf{j}\frac{{q_e}^2 k_B T}{\pi\hbar^2\left(\omega - \mathbf{j}2\Gamma\right)}\left(\frac{\mu_c}{k_B T} + 2\ln\left(1 + e^{-\mu_c/k_B T}\right)\right). \tag{3.10}$$

De (3.10), com $\tilde{\sigma}_{intra} = \sigma'_{intra} + \mathbf{j}\sigma''_{intra}$, observa-se que $\sigma'_{intra} > 0$ e $\sigma''_{intra} < 0$. Essas condições são ilustradas nas Fig. 16(a) e 16(b). Além de $\sigma'_{intra} > 0$, seu valor aumenta com o aumento

Figura 15 – Exemplo dos tipos de condutividade formadas, a partir das interações intra e inter-banda. Abaixo do ponto de Dirac é ilustrada a banda de valência e acima, a banda de condução.



Fonte: Adaptada de [70].

gradual do potencial químico μ_c (Fig. 16(a)), ocorrendo o inverso com a parte imaginária (σ''_{intra}), tal como ilustra a Fig. 16(b). Além disso, o aumento gradual de $|\tilde{\sigma}_{intra}(\omega)|$, está relacionado com um nível maior de reflexão de onda eletromagnética incidente em superfícies compostas de grafeno. Portanto, a variação da condutividade intrabanda, em função do potencial químico μ_c e da frequência, é de fundamental importância para análise de propagação de ondas eletromagnéticas em dispositivos tais como FSS (*Frequency Selective Surface*) e no controle de diagramas de radiações em antenas [3, 8].

A partir da condutividade intrabanda, faz-se necessário o cálculo do comprimento de onda plasmônico λ_{SPP} [13, 90], que é necessário, por exemplo, na análise de frequências de ressonâncias em dispositivos espalhadores de ondas eletromagnéticas. Matematicamente, para folhas de grafeno com área infinita e considerando o espaço livre como o meio de análise, pode-se escrever λ_{SPP} como

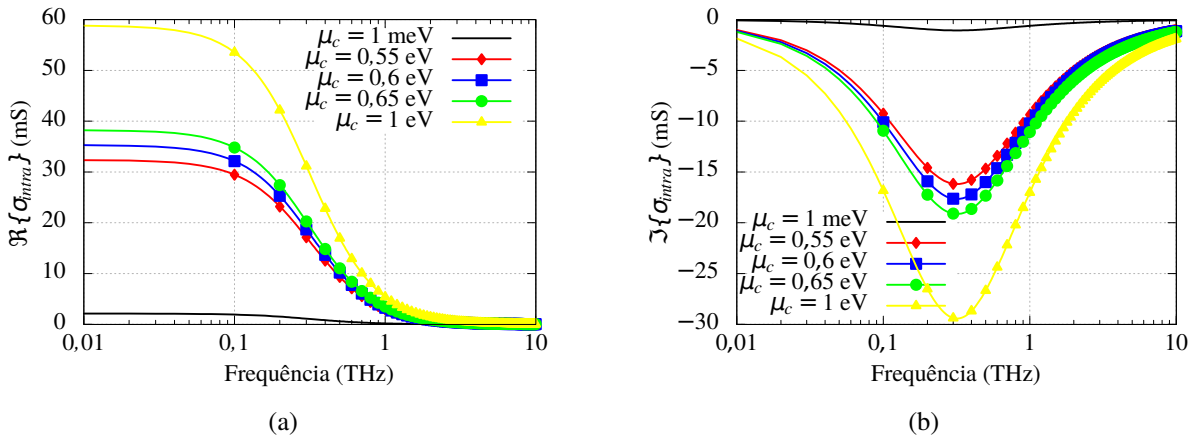
$$\lambda_{SPP} = \frac{2\pi}{\Re\{k_{SPP}\}} = \frac{v_g}{f}, \tag{3.11}$$

em que

$$k_{SPP} = k_0\sqrt{1 - \left(\frac{2}{\tilde{\sigma}\eta_0^2}\right)^2} \tag{3.12}$$

é o número de onda plasmônico, $\tilde{\sigma}$ é a condutividade intrabanda (ver (3.10)), v_g é a velocidade de onda plasmônica, $\eta_0 = 120\pi$ é a impedância do espaço livre e $k_0 = 2\pi/\lambda$ é o número de onda

Figura 16 – Condutividade superficial intrabanda em função da frequência, para um aumento gradual do potencial químico μ_c, utilizando-se os parâmetros $T = 300$ K e $\tau = 0{,}5$ ps. Em (a) é a parte real da condutividade e (b) a parte imaginária.

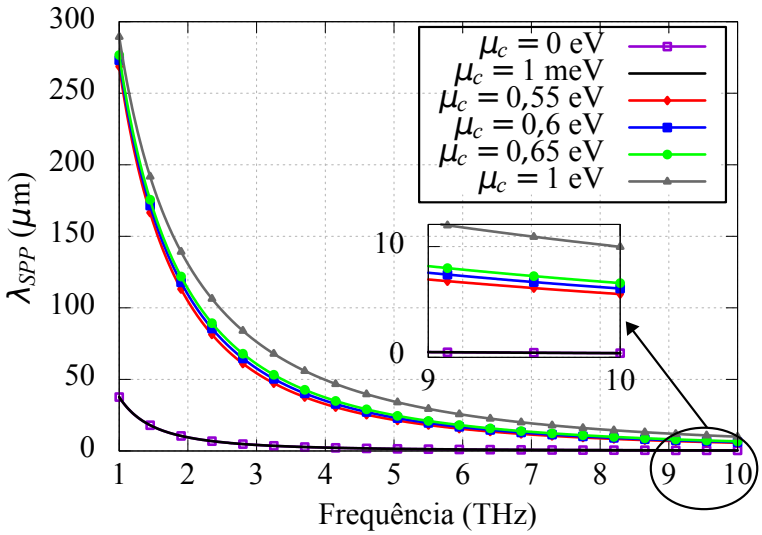


(a) (b)

Fonte: O autor.

no espaço livre. [13, 70]. Tal como acontece com $|\tilde{\sigma}_{intra}(\omega)|$, o incremento gradual do potencial químico produz aumento de λ_{SPP} em folhas de grafeno com área infinita, tal como ilustra a Fig. 17. Este aumento está relacionado diretamente com o aumento da velocidade plasmônica no grafeno, conforme (3.11). Além disso, $\Re\{k_{SPP}\}$ passa a assumir valores maiores que k_0, próximo a faixa de terahertz ($0{,}1 - 10$ THz) [13]. Isso pode ser checado resolvendo (3.12).

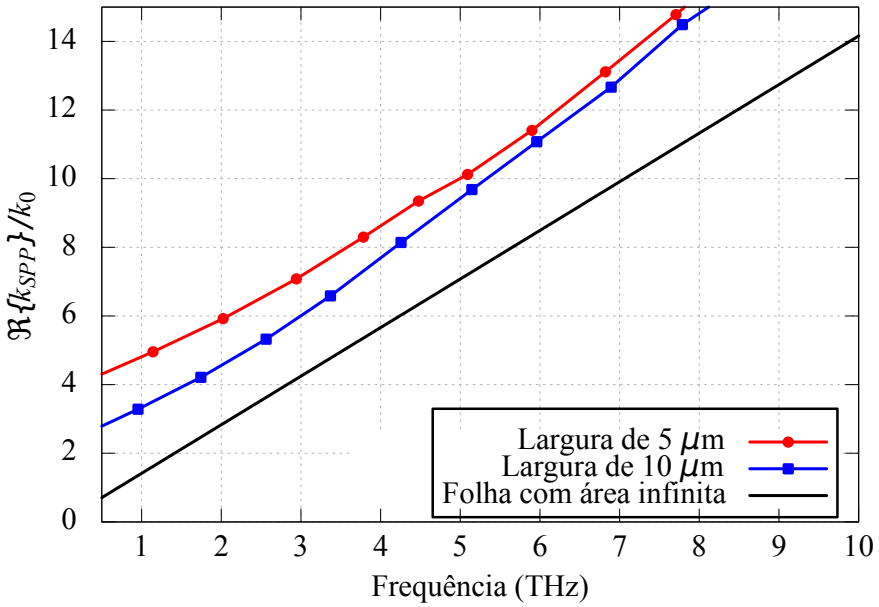
Figura 17 – λ_{SPP} em função da frequência para vários valores de potenciais químicos.



Fonte: O autor.

Em folhas finitas de grafeno, não existem expressões analíticas para o cálculo de λ_{SPP}, sendo muitas vezes necessário recorrer às simulações obtidas através de *softwares* de simulação numérica, baseados nas equações de Maxwell, para excitação de onda plasmônica no grafeno. Dessa forma, como mostrado em [91], a relação $\Re\{k_{SPP}\}/k_0$ aumenta à medida que a largura da folha de grafeno vai diminuindo, tal como ilustra a Fig. 18. Dessa forma, devido ao efeito das bordas na folha de grafeno, λ_{SPP} diminui juntamente com a diminuição da largura da folha. Isso pode ser verificado pela Fig. 18, que ilustra $\Re\{k_{SPP}\}/k_0$ em função da frequência, considerando as seguintes folhas de grafeno: largura de 5 μm, 10 μm e folha infinita. Para essas curvas, $T = 300$ K, $\mu_c = 0{,}2$ eV e $\Gamma = 0{,}1$ meV foram considerados como parâmetros no grafeno.

Figura 18 – $\Re\{k_{SPP}\}/k_0$ em função da frequência, para várias geometrias de folhas de grafeno. Para a folha com área infinita, (3.12) foi considerado para o cálculo de k_{SPP}.



Fonte: Os dados referentes às larguras de 5 μm e 10 μm foram extraídos de [91].

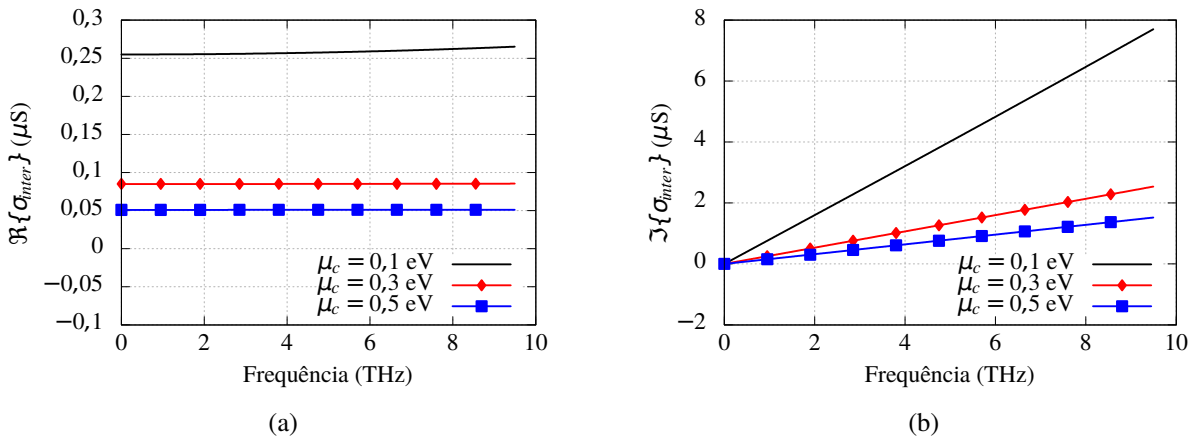
A condutividade interbanda pode ser dada por (3.9). No entanto, devido a complexidade em extrair a parte interbanda, por vezes aplica-se a condição $k_B T \ll |\mu_c|$ [13, 70]. Dessa forma, a condutividade interbanda, pode ser escrita como

$$\sigma_{inter}(\omega, \mu_c, \Gamma, 0) \approx \frac{-\mathbf{j}{q_e}^2}{4\pi\hbar} \ln\left(\frac{2|\mu_c| - (\omega - \mathbf{j}2\Gamma)\,\hbar}{2|\mu_c| + (\omega - \mathbf{j}2\Gamma)\,\hbar}\right). \tag{3.13}$$

De (3.13), observa-se que para a taxa de espalhamento nulo ($\Gamma = 0$), a condutividade interbanda

é puramente imaginária. Para a condição $2|\mu_c| < \hbar\omega$, essa condutividade possui tanto parte real quanto imaginária, tal como ilustra a Fig. 19 [13]. Diferentemente da condutividade intrabanda, o aumento gradual do potencial químico μ_c, diminui as partes real e imaginária da condutividade interbanda.

Figura 19 – Condutividade superficial interbanda em função da frequência, para um aumento gradual do potencial químico μ_c, utilizando-se os parâmetros $T = 300$ K e $\tau = 0{,}5$ ps. Em (a) é a parte real da condutividade e (b) a parte imaginária.



Fonte: O autor.

Se uma densidade de fluxo magnético externo $\vec{B}$ for aplicada a uma folha de grafeno, seus portadores de cargas estarão sujeitos à força de Lorentz [92], influenciando na propagação de onda plasmônica no grafeno [93]. Dessa forma, a condutividade passa a ser anisotrópica, estando sujeita ao efeito Hall [13, 15, 93–95]. Esse efeito é importante para otimização e modelagem de sensores, ressonadores e circuladores [2, 96–98].

Dessa forma, analisa-se a condutividade intrabanda sob a forma de um tensor dado por

$$\tilde{\boldsymbol{\sigma}}(\omega) = \begin{bmatrix} \tilde{\sigma}_{xx}(\omega) & \tilde{\sigma}_{xy}(\omega) \\ \tilde{\sigma}_{yx}(\omega) & \tilde{\sigma}_{yy}(\omega) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \tilde{\sigma}_d(\omega) & -\tilde{\sigma}_p(\omega) \\ \tilde{\sigma}_p(\omega) & \tilde{\sigma}_d(\omega) \end{bmatrix}, \tag{3.14}$$

em que

$$\tilde{\sigma}_d(\omega) = \sigma_0 \frac{1 + \mathbf{j}\omega\tau}{(\omega_c\tau)^2 + (1 + \mathbf{j}\omega\tau)^2}, \tag{3.15}$$

$$\tilde{\sigma}_p(\omega) = \sigma_0 \frac{\omega_c\tau}{(\omega_c\tau)^2 + (1 + \mathbf{j}\omega\tau)^2} \tag{3.16}$$

e

$$\sigma_0 = \frac{{q_e}^2 k_B T}{\pi\hbar^2} \left(\frac{\mu_c}{k_B T} + 2\ln\left(1 + e^{-\mu_c/k_B T}\right) \right) \tag{3.17}$$

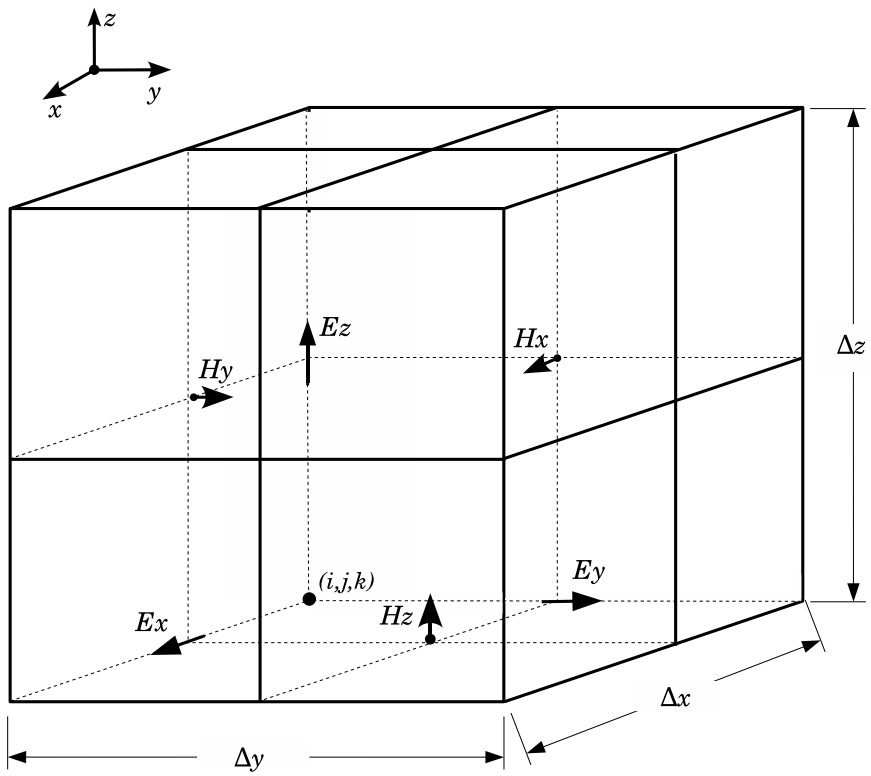
Em (3.15) e (3.16), $\omega_c = q_e B_0 v_F^2/\mu_c$ é a frequência cíclotron, B_0 é a densidade de fluxo magnético (externo) e v_F é a velocidade de Fermi. Portanto, uma vez que as características físicas e elétricas do grafeno são conhecidas, é possível, através do uso das equações de Maxwell, solucionar os vários tipos de problemas de engenharia envolvendo esse material. No entanto, devido à complexidade das equações obtidas e a impossibilidade de extrair soluções analíticas em problemas reais, a modelagem numérica de folhas de grafeno se faz necessária através de métodos numéricos, tais como o *Finite-Difference Time-Domain* (FDTD) [18].

4 O método FDTD e modelagem numérica do grafeno

Desenvolvido por Yee em 1966 [99], o método FDTD (*Finite-Difference Time-Domain*) utiliza aproximações por diferenças finitas, especialmente diferenças centradas, para o cálculo numérico das derivadas parciais, em relação ao espaço e ao tempo, presentes nas equações de Maxwell. Essas aproximações geram erros de segunda ordem para as derivadas em relação ao tempo e espaço [18]. Dessa forma, as leis de Faraday e Ampère tornam-se mais simples de serem tratadas computacionalmente devido à facilidade de realizar a expansão em equações de diferenças algébricas, utilizando a aproximação de diferenças centradas. Vale ressaltar que, como o sistema de coordenadas empregado, neste trabalho, é o retangular, as leis de Gauss não são impostas nas aproximações por derivadas centradas. Além disso, as equações rotacionais de Faraday e Ampère são suficientes para caracterizar a propagação da onda eletromagnética, pois satisfazem as leis de Gauss [92].

Para representar o domínio de análise, é definida uma malha computacional com unidade básica chamada célula de Yee. Esta célula possui arestas iguais a Δ_x, Δ_y e Δ_z, cuja posição no domínio computacional é dada por índices inteiros i, j e k. A posição física do canto de referência espacial de uma dada célula, é dada por $x = i\Delta_x$, $y = j\Delta_y$ e $z = k\Delta_z$ (ponto indicado por (i, j, k) na Fig. 20). O instante de tempo t, no qual é calculado o campo elétrico, é obtido pelo produto de n (contador temporal) por Δ_t (passo de tempo). Por fim, o instante físico-computacional no qual é avaliado o campo elétrico é n, e o campo magnético, $\left(n + \frac{1}{2}\right)$. As componentes do campo elétrico estão posicionadas nas arestas de uma dada célula de Yee, e as componentes de campo magnético, em suas faces, tal como ilustra a Fig. 20.

Figura 20 – Célula de Yee representada no espaço tridimensional



Fonte: [100].

Dessa forma, no espaço tridimensional, as equações de Maxwell, na sua forma diferencial, são escritas da seguinte forma:

$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \tag{4.1a}$$

e

$$\nabla \times \vec{H} = \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} + \vec{J}, \tag{4.1b}$$

onde $\vec{B}$ é o vetor densidade de fluxo magnético (Wb/m^2), $\vec{D}$ é o vetor densidade de fluxo elétrico (C/m^2) e $\vec{J}$ é a densidade superficial de corrente (A/m^2). Além disso, $\vec{B}$, $\vec{D}$ e $\vec{J}$ podem ser definidos pelas relações constitutivas

$$\vec{B} = \mu * \vec{H}, \tag{4.2a}$$

$$\vec{D} = \varepsilon * \vec{E}, \tag{4.2b}$$

$$\vec{J} = \sigma * \vec{E}, \tag{4.2c}$$

onde μ, ε, σ são as permeabilidade magnética, permissividade elétrica e condutividade elétrica respectivamente. Ainda, $\vec{E}$ é o vetor campo elétrico, $\vec{H}$ é o vetor campo magnético e $*$ indica a operação de convolução, indicando a possibilidade do tratamento com materiais dispersivos e/ou anisotrópicos.

Considerando o meio isotrópico e não dispersivo, (4.1) pode ser escrito por

$$\nabla \times \vec{E} = -\mu \frac{\partial \vec{H}}{\partial t} \tag{4.3a}$$

e

$$\nabla \times \vec{H} = \varepsilon \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} + \vec{J}, \tag{4.3b}$$

Escrevendo explicitamente o rotacional dos campos elétrico e magnético, é obtido um conjunto de seis equações, onde cada equação diferencial pode ser usada para calcular uma componente escalar de campo. Assim, das equações (4.3), verifica-se que:

$$\frac{\partial H_x}{\partial t} = \frac{1}{\mu}\left(\frac{\partial E_y}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial y}\right), \tag{4.4a}$$

$$\frac{\partial H_y}{\partial t} = \frac{1}{\mu}\left(\frac{\partial E_z}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial z}\right), \tag{4.4b}$$

$$\frac{\partial H_z}{\partial t} = \frac{1}{\mu}\left(\frac{\partial E_x}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial x}\right), \tag{4.4c}$$

$$\frac{\partial E_x}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon}\left(\frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z} - \sigma E_x\right), \tag{4.4d}$$

$$\frac{\partial E_y}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon}\left(\frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial x} - \sigma E_y\right) \tag{4.4e}$$

e

$$\frac{\partial E_z}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon}\left(\frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} - \sigma E_z\right). \tag{4.4f}$$

Assim, aplicando a definição de derivada centrada [18, 99] nas equações (4.4), obtêm-se as equações de Maxwell na sua forma discretizada para os campos magnético e elétrico. Por exemplo, as componentes H_x e E_x podem ser aproximadas por

$$H_x\big|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} = H_x\big|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}} + \frac{\Delta_t}{\mu}\left[\frac{E_y\big|_{i,j+\frac{1}{2},k+1}^{n} - E_y\big|_{i,j+\frac{1}{2},k}^{n}}{\Delta_z} - \frac{E_z\big|_{i,j+1,k+\frac{1}{2}}^{n} - E_z\big|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{n}}{\Delta_y}\right] \tag{4.5}$$

e

$$E_x\big|_{i+\frac{1}{2},j,k}^{n+1} = E_x\big|_{i+\frac{1}{2},j,k}^{n} + \frac{\Delta_t}{\varepsilon}\left[\frac{H_z\big|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^{n+\frac{1}{2}} - H_z\big|_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta_y} - \frac{H_y\big|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} - H_y\big|_{(i+\frac{1}{2},j,k-\frac{1}{2})}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta_z}\right] - \sigma\Delta_t\left[\frac{E_x\big|_{i+\frac{1}{2},j,k}^{n+1} + E_x\big|_{i+\frac{1}{2},j,k}^{n}}{2}\right]. \tag{4.6}$$

4.1 Precisão e estabilidade

A precisão do método está relacionada à proximidade entre a solução numérica e a solução analítica, ou ainda, à representação correta do comportamento físico do problema, caso não haja solução analítica. A estabilidade garante a convergência para uma solução com amplitude limitada para todo o tempo, ou seja, o erro encontrado para uma dada iteração deve ser menor do que o erro da iteração anterior [18]. Ambas as características para o método FDTD devem ser respeitadas a fim de assegurar a confiabilidade do método.

Os incrementos espacias (Δ_x, Δ_y e Δ_z) e temporal (Δ_t) estão intimamente relacionados à precisão e estabilidade do método, de tal maneira que a escolha aleatória dos incrementos podem gerar instabilidade e/ou dispersão numérica, além de imprecisões no resultado obtido. A fim de minimizar o erro por dispersão, promovendo precisão ao método, deve-se escolher

$$\Delta_{x,y,z} \leq \frac{\lambda_{min}}{10}, \tag{4.7}$$

onde λ_{min} é o mínimo comprimento de onda associado à frequência máxima do sinal de excitação e à menor velocidade de propagação de onda no ambiente modelado. A condição de estabilidade é atendida quando o passo de tempo Δ_t é determinado pela condição de Courant [18, 101], que é dada por

$$\Delta_t \leq \frac{1}{v_{max}}\left(\frac{1}{\Delta_x^2} + \frac{1}{\Delta_y^2} + \frac{1}{\Delta_z^2}\right)^{-\frac{1}{2}}, \tag{4.8}$$

onde v_{max} é a máxima velocidade de propagação da onda no domínio de análise. Se o meio for o vácuo, v_{max} é igual a c, em que c é a velocidade da luz.

4.2 Condição de fronteira absorvente - CPML

Em simulações usando o método FDTD, há a necessidade de impor limites no domínio numérico de análise. Tais limites, em problemas fechados, são normalmente impostos através de paredes elétricas que terminam o domínio, levando a reflexões da onda eletromagnética. Em problemas abertos, é necessário truncar o domínio numérico de análise por condições de fronteira absorvente (ABCs) [18], caso contrário, programas baseados no método FDTD requerem uma quantidade infinita de memória e de processamento computacionais, tornando o método impraticável.

As ABCs são impostas numericamente nos términos do domínio computacional de análise, a fim de que a onda eletromagnética seja absorvida em tais regiões, sofrendo atenuação. Assim, faz-se parecer que a onda continua propagando-se para fora do domínio de análise, indo para o infinito. Isso assegura uma boa exatidão nos resultados obtidos dentro da região de análise efetiva, pois evita a contaminação por sinais refletidos, não físicos, oriundos dos términos do domínio. Embora existam vários tipos de ABCs [102–104], neste trabalho será utilizado o método CPML (*Convolutional Perfectly Matched Layers*) [105], em cuja formulação estão presentes meios dispersivos artificiais, com níveis de atenuação graduais da onda ao longo de camadas providas com casamento perfeito de impedância com a região de análise, tal como em [103, 104]. Além disso, esta técnica apresenta uma formulação para meios gerais, podendo ser utilizada tanto para meios homogêneos, quanto para meios não homogêneos, dispersivos, com perdas ou meios anisotrópicos, tornando-se mais eficiente computacionalmente do que as demais ABCs, além de apresentar equações mais simples para atualizações dos campos.

Na formulação CPML, é realizado um mapeamento complexo das coordenadas espacias por meio de funções dependentes da frequência, sob a forma

$$s_l = \kappa_l + \frac{\sigma_l}{\alpha_l + j\omega\varepsilon_0} \quad (l = x, y \text{ ou } z). \tag{4.9}$$

Dessa forma, considerando a transformada de Fourier de (4.4f), por exemplo, e o vácuo, a lei de Faraday no domínio da frequência pode ser escrita para a componente E_z como

$$j\omega\varepsilon_0 \boldsymbol{E_z} = \frac{1}{s_x}\frac{\partial \boldsymbol{H_y}}{\partial x} - \frac{1}{s_y}\frac{\partial \boldsymbol{H_x}}{\partial y}. \tag{4.10}$$

Transformando-se para o domínio do tempo (4.10), tem-se

$$\varepsilon_0 \frac{\partial E_z}{\partial t} = s_x(t) * \frac{\partial H_y}{\partial x} - s_y(t) * \frac{\partial H_x}{\partial y}, \tag{4.11}$$

onde $s_x(t)$ e $s_y(t)$ representam as transformadas inversas de Fourier para s_x e s_y, respectivamente. Ainda, $*$ denota a operação de convolução.

Pode-se mostrar que a transformada inversa de Fourier de (4.9) é dada por

$$s_l(t) = \frac{\delta(t)}{\kappa_l} - \frac{\sigma_l}{\varepsilon_0 \kappa_l^2} \exp\left[-\left(\frac{\sigma_l}{\varepsilon_0 \kappa_l} + \frac{\alpha_l}{\varepsilon_0}\right) t\right] u(t) = \frac{\delta(t)}{\kappa_l} + \zeta_l(t), \tag{4.12}$$

onde $\delta(t)$ é a função impulso e $u(t)$ é a função degrau. Dessa forma, substituindo (4.12) em (4.11), temos

$$\varepsilon_0 \frac{\partial E_z}{\partial t} = \frac{1}{\kappa_x}\frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{1}{\kappa_y}\frac{\partial H_x}{\partial y} + \zeta_x(t) * \frac{\partial H_y}{\partial x} - \zeta_y(t) * \frac{\partial H_x}{\partial y}. \tag{4.13}$$

Para representar de forma mais eficiente as convoluções definidas em (4.13), usa-se a resposta discreta ao impulso para $\zeta_l(t)$, de modo que

$$\begin{aligned} Z_{0_l} = \int_{m\Delta_t}^{(m+1)\Delta_t} \zeta_l(\tau)\mathrm{d}\tau &= -\frac{\sigma_l}{\varepsilon_0 \kappa_l^2} \int_{m\Delta_t}^{(m+1)\Delta_t} \exp\left[-\left(\frac{\sigma_l}{\varepsilon_0 \kappa_l} + \frac{\alpha_l}{\varepsilon_0}\right)\tau\right] \mathrm{d}\tau \\ &= a_l \exp\left[-\left(\frac{\sigma_l}{\kappa_l} + \alpha_l\right)\right] \frac{m\Delta_t}{\varepsilon_0}, \end{aligned} \tag{4.14}$$

onde,

$$a_l = \frac{\sigma_l}{\sigma_l \kappa_l + \kappa_l^2 \sigma_l} \left[\exp\left[-\left(\frac{\sigma_l}{\kappa_l} + \alpha_l\right)\right] \frac{\Delta_t}{\varepsilon_0} - 1\right]. \tag{4.15}$$

Dessa forma, ao discretizar (4.13), surgem convoluções entre as derivadas parciais das componentes de $\vec{H}$ e Z_{0_l}. Porém, isto torna-se, a princípio, computacionalmente inviável, pois seria aplicada a todas as componentes de campo e dependeria de todos os instantes de tempo passados. Felizmente, devido a natureza exponencial de Z_{0_l}, é possível aplicar a técnica de convolução recursiva [106]. Portanto são introduzidas equações auxiliares Ψ_l, de forma que as equações de atualização para a CPML são dadas por

$$\begin{aligned} E_z\big|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{n+1} = E_z\big|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{n} + \\ \frac{\Delta_t}{\varepsilon}\left[\frac{H_y\big|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} - H_y\big|_{i-\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}}{k_x \Delta_x} - \frac{H_x\big|_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} - H_x\big|_{i,j-\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}}{k_y \Delta_y} + \right. \\ \left. \Psi_{ezx}\big|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} - \Psi_{ezy}\big|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}\right]. \end{aligned}$$

onde

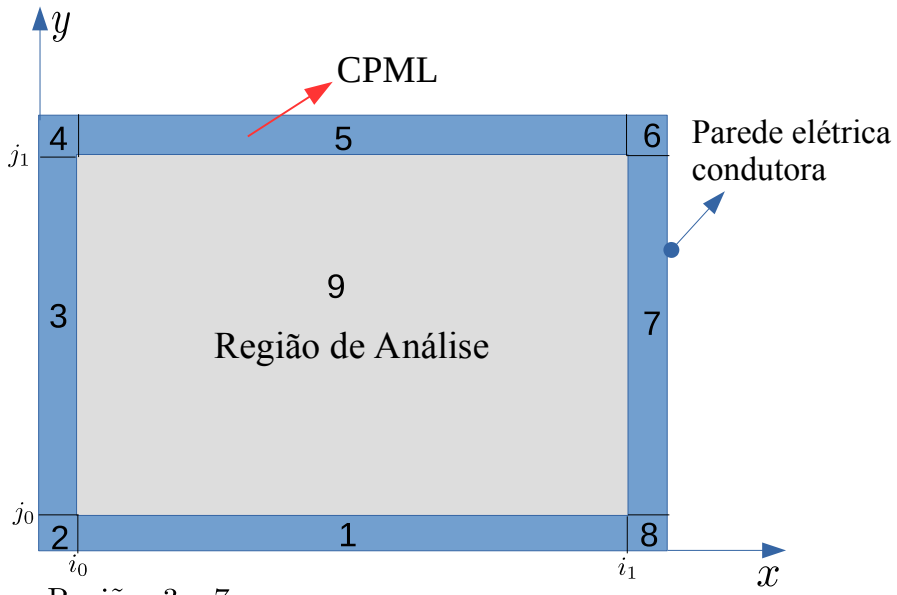
$$\Psi_{ezx}\big|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} = b_x \Psi_{ezx}\big|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}} + a_x \left[\frac{H_{y\,(i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2})}^{n+\frac{1}{2}} - H_{y\,(i-\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2})}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta_x}\right], \tag{4.16}$$

$$\Psi_{ezy}\Big|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} = b_y \Psi_{ezy}\Big|_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}} + a_y \left[\frac{H_{x\ (i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2})}^{n+\frac{1}{2}} - H_{x\ (i,j-\frac{1}{2},k+\frac{1}{2})}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta_y} \right], \tag{4.17}$$

$$b_l = \exp\left[-\left(\frac{\sigma_l}{\kappa_l} + \alpha_l \right) \frac{\Delta_t}{\varepsilon_0} \right] \ (l = x, y \text{ ou } z) \tag{4.18}$$

e a_l é dado por (4.15). Expressões similares podem ser obtidas para as outras componentes de campos elétrico e magnético. A fim de calcular σ_l e κ_l, a Fig. 21 ilustra a disposição e o comportamento dos valores desses parâmetros em um domínio de análise bidimensional, bem como na região da CPML. O modo de propagação considerado nesse exemplo é o TM_z.

Figura 21 – Distribuição das parâmetros σ_l e κ_l, onde l é x ou y, em um domínio numérico contendo região de análise e CPML



- Regiões 3 e 7
  $\sigma_y = 0,\ \sigma_x \neq 0, \kappa_y = 1, \kappa_x \neq 0$
- Regiões 1 e 5
  $\sigma_y \neq 0,\ \sigma_x = 0, \kappa_y \neq 0, \kappa_x = 1$
- Regiões 2, 4, 6 e 8
  $\sigma_y \neq 0,\ \sigma_x \neq 0, \kappa_y \neq 0, \kappa_x \neq 0$
- Região 9
  $\sigma_y = 0,\ \sigma_x = 0, \kappa_y = 1, \kappa_x = 1$

Fonte: O autor.

Dessa forma, os parâmetros avaliados são calculados para cada componente de campo, presente no modo de propagação, da seguinte forma:
para H_x,

$$\sigma_x(i) = \frac{\sigma_{x\ max}|i - i_\beta|^m}{n_c^m}, \tag{4.19a}$$

$$\kappa_x(i) = 1 + \frac{(\kappa_{x\ max} - 1)|i - i_\beta|^m}{n_c^m}, \tag{4.19b}$$

$$\sigma_y\left(j + \frac{1}{2}\right) = \frac{\sigma_{y\ max}\left|j - j_\beta + \frac{1}{2}\right|^m}{n_c^m}, \tag{4.19c}$$

$$\kappa_y\left(j + \frac{1}{2}\right) = 1 + \frac{(\kappa_{y\ max} - 1)\left|j - j_\beta + \frac{1}{2}\right|^m}{n_c^m}. \tag{4.19d}$$

Para H_y,

$$\sigma_x\left(i + \frac{1}{2}\right) = \frac{\sigma_{x\ max}\left|i - i_\beta + \frac{1}{2}\right|^m}{n_c^m}, \tag{4.20a}$$

$$\kappa_x\left(i + \frac{1}{2}\right) = 1 + \frac{(\kappa_{x\ max} - 1)\left|i - i_\beta + \frac{1}{2}\right|^m}{n_c^m}, \tag{4.20b}$$

$$\sigma_y(j) = \frac{\sigma_{y\ max}|j - j_\beta|^m}{n_c^m}, \tag{4.20c}$$

$$\kappa_y(j) = 1 + \frac{(\kappa_{y\ max} - 1)|j - j_\beta|^m}{n_c^m}. \tag{4.20d}$$

Por fim, para E_z:

$$\sigma_x\left(i\right) = \frac{\sigma_{x\ max}\left|i - i_\beta\right|^m}{n_c^m}, \tag{4.21a}$$

$$\kappa_x\left(i\right) = 1 + \frac{(\kappa_{x\ max} - 1)\left|i - i_\beta\right|^m}{n_c^m}, \tag{4.21b}$$

$$\sigma_y(j) = \frac{\sigma_{y\ max}|j - j_\beta|^m}{n_c^m}, \tag{4.21c}$$

$$\kappa_y(j) = 1 + \frac{(\kappa_{y\ max} - 1)|j - j_\beta|^m}{n_c^m}. \tag{4.21d}$$

A variável n_c é o número de camadas da CPML. Na literatura seu valor, geralmente, é adotado como 10 [18], $\beta = 0$ ou 1, de modo que:

$$1 \leq k \leq k_0, \tag{4.22a}$$

$$k_1 \leq k \leq k_{max}, \tag{4.22b}$$

em que k pode ser i ou j (ver Fig. 21). Ainda,

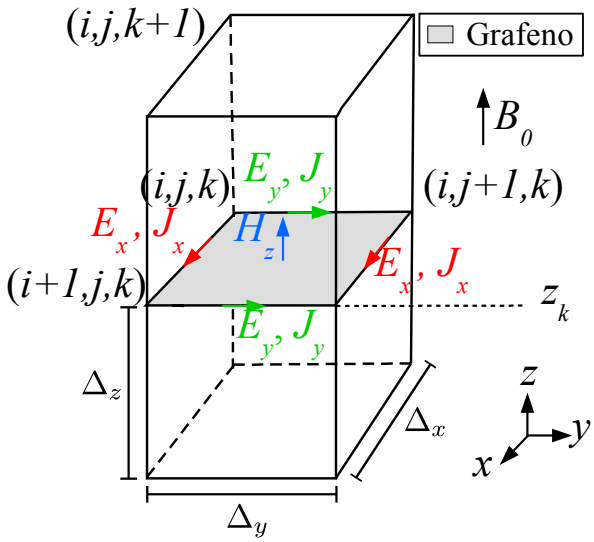
$$\sigma_{l\ max} = \frac{1+m}{15 n_c \pi \Delta l}, \tag{4.23}$$

κ_{max} tem seu valor escolhido, na literatura, entre 7 e 15 [18, 105] Já o valor de m é a ordem do polinômio interpolador, no qual adota-se 4 [18].

4.3 Modelagem numérica de folhas de grafeno via método FDTD

Na malha FDTD, as folhas de grafeno podem ser modeladas em planos contendo componentes de campo elétrico, definindo modos TE em células de Yee 3-D, tal como ilustrado pela Fig. 22 para o modo TE$_z$ [7, 23]. A representação numérica do grafeno é baseada em equações específicas de atualização usadas para calcular os componentes de campo elétrico $\vec{E}$ e densidade de corrente $\vec{J}$ tangenciais à folha [23]. Além disso, a influência da componente normal da densidade de fluxo magnético externo $\vec{B}$ pode ser considerada.

Figura 22 – Modelagem FDTD do grafeno na célula de Yee (i, j, k) com base em equações de atualizações específicas para as componentes tangenciais de $\vec{E}$ e $\vec{J}$, sob influência de $B = B_0 \hat{a}_z$.



Fonte: O autor.

De acordo com o modelo de Drude, desconsiderando as contribuições da interbanda, a condutividade do grafeno pode ser representada pelo tensor dado em (3.14) [23, 95]. Na região

onde a folha de grafeno está posicionada, a lei de Ampère, no domínio da frequência, pode ser escrita como

$$j\omega\varepsilon\widetilde{\boldsymbol{E}}(\omega) = \nabla \times \widetilde{\boldsymbol{H}}(\omega) - \widetilde{\boldsymbol{J_v}}(\omega), \tag{4.24}$$

em que $\widetilde{\boldsymbol{E}}(\omega)$, $\widetilde{\boldsymbol{H}}(\omega)$ e $\widetilde{\boldsymbol{J_v}}(\omega)$ são as transformadas de Fourier dos campos elétrico, magnético e densidade volumétrica de corrente elétrica. Considerando que a folha fina de grafeno de interesse esteja posicionada em $z = z_k$, tal como ilustrado pela Fig. 22, sua condutividade superficial pode ser descrita em termos da função impulso de Dirac [107]. Logo,

$$\widetilde{\boldsymbol{J_v}}(\omega) = \widetilde{\boldsymbol{\sigma}}(\omega)\delta(z - z_k) \cdot \widetilde{\boldsymbol{E}}(\omega). \tag{4.25}$$

Integrando (4.24) no intervalo $[z_k - \Delta_z/2, z_k + \Delta_z/2]$, onde Δ_z é o comprimento da aresta da célula de Yee paralela a z, e aplicando a propriedade de amostragem da função impulso, obtém-se

$$\widetilde{\boldsymbol{J_v}}(\omega)\Delta z = \widetilde{\boldsymbol{\sigma}}(\omega) \cdot \widetilde{\boldsymbol{E}}(\omega)|_{z=z_k}, \tag{4.26}$$

na qual $\widetilde{\boldsymbol{J}}(\omega) = \widetilde{\boldsymbol{J_v}}(\omega)\Delta z$ é a densidade superficial de corrente. Usando (3.14) e (4.26), tem-se que

$$\widetilde{\boldsymbol{J}}(\omega) = \widetilde{\boldsymbol{\sigma}}(\omega) \cdot \widetilde{\boldsymbol{E}}(\omega) = \begin{bmatrix} \tilde{\sigma}_d(\omega)\tilde{E}_x(\omega) - \tilde{\sigma}_p(\omega)\tilde{E}_y(\omega) \\ \tilde{\sigma}_p(\omega)\tilde{E}_x(\omega) + \tilde{\sigma}_d(\omega)\tilde{E}_y(\omega) \\ 0 \end{bmatrix}. \tag{4.27}$$

Dessa forma,

$$\tilde{J}_x(\omega) = \tilde{\sigma}_d(\omega)\tilde{E}_x(\omega) - \tilde{\sigma}_o(\omega)\tilde{E}_y(\omega) \tag{4.28}$$

e

$$\tilde{J}_y(\omega) = \tilde{\sigma}_o(\omega)\tilde{E}_x(\omega) + \tilde{\sigma}_d(\omega)\tilde{E}_y(\omega). \tag{4.29}$$

A Substituição de (3.15) e (3.16) em (4.28), usando (4.29) e transformando (4.28) para o domínio do tempo, produz

$$\tau\frac{dJ_x(t)}{dt} + J_x(t) = \sigma_0 E_x(t) - \omega_c\tau J_y(t). \tag{4.30}$$

Procedimento matemático similar é executado, substituindo (3.15) e (3.16) em (4.29), usando (4.28) e transformando (4.29) para o domínio do tempo, produzindo

$$\tau\frac{dJ_y(t)}{dt} + J_y(t) = \sigma_0 E_y(t) + \omega_c\tau J_x(t). \tag{4.31}$$

As expressões (4.30) e (4.31) podem ser reescritas, usando uma notação matricial compacta, da seguinte forma:

$$\frac{d\boldsymbol{J}(t)}{dt} = \boldsymbol{M} \cdot \boldsymbol{J}(t) + \frac{\sigma_0}{\tau}\boldsymbol{E}(t), \tag{4.32}$$

em que

$$\boldsymbol{M} = \begin{bmatrix} -2\Gamma & -\omega_c \\ \omega_c & -2\Gamma \end{bmatrix}. \tag{4.33}$$

Em (4.33), $\Gamma = 1/(2\tau)$ é a taxa de espalhamento.

A fim de resolver a equação diferencial matricial dada em (4.32), é aplicado o método da exponencial matriz [23, 108]. Inicialmente, (4.32) é transformada para o domínio de Laplace. Posteriormente, após realizar as manipulações matemáticas adequadas, vê-se que

$$\boldsymbol{J}(s) = (s\boldsymbol{I} - \boldsymbol{M})^{-1} \cdot \boldsymbol{J}(t_0) + 2\sigma_0\Gamma(s\boldsymbol{I} - \boldsymbol{M})^{-1} \cdot \boldsymbol{E}(s). \tag{4.34}$$

Então, aplicando a transformada inversa de Laplace em (4.34), tem-se

$$\boldsymbol{J}(t) = e^{\boldsymbol{M}(t-t_0)} \cdot \boldsymbol{J}(t_0) + 2\sigma_0\Gamma \int_{t_0}^{t} e^{\boldsymbol{M}(t-\xi)} \cdot \boldsymbol{E}(\xi)d\xi. \tag{4.35}$$

No método FDTD, $\vec{J}(t)$ e $\vec{E}(t)$ são calculados, na malha de tempo discreto, nos instantes $(n + \frac{1}{2})\Delta_t$ e $n\Delta_t$, respectivamente [18]. Consequentemente,

$$\boldsymbol{J}^{n+\frac{1}{2}} = \boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{J}^{n-\frac{1}{2}} + 2\sigma_0\Gamma\boldsymbol{B} \cdot \boldsymbol{E}^n, \tag{4.36}$$

em que

$$\boldsymbol{A} = e^{\boldsymbol{M}\Delta_t} \tag{4.37}$$

e

$$\boldsymbol{B} = \int_0^{\Delta_t} e^{\boldsymbol{M}\Delta_t} dt. \tag{4.38}$$

As expressões (4.37) e (4.38) podem ser simplificadas usando o método da exponencial matriz. Portanto, ambas as equações são escritas em termos dos autovalores da matriz $\boldsymbol{M}$, ou seja,

$$\boldsymbol{A} = e^{\boldsymbol{M}\Delta_t} = e^{-2\Gamma\Delta_t} \begin{bmatrix} \cos(\omega_c\Delta_t) & -\sin(\omega_c\Delta_t) \\ \sin(\omega_c\Delta_t) & \cos(\omega_c\Delta_t) \end{bmatrix} \tag{4.39}$$

e

$$\boldsymbol{B} = \int_0^{\Delta_t} e^{\boldsymbol{M}\Delta_t} dt = \boldsymbol{M}^{-1}\left(e^{\boldsymbol{M}\Delta t} - \boldsymbol{I}\right) = \frac{e^{-2\Gamma\Delta t}}{\omega_c^2 + (2\Gamma)^2} \begin{bmatrix} C_d & -C_o \\ C_o & C_d \end{bmatrix}, \tag{4.40}$$

em que

$$C_d = 2\Gamma[e^{2\Gamma\Delta_t} - \cos(\omega_c\Delta_t)] + \omega_c \sin(\omega_c\Delta_t) \tag{4.41}$$

e

$$C_o = \omega_c[e^{2\Gamma\Delta_t} - \cos(\omega_c\Delta_t)] - 2\Gamma\sin(\omega_c\Delta_t). \tag{4.42}$$

Portanto, as equações na sua forma discretizada para as componentes J_x e J_y são dadas por

$$J_x|_{i+\frac{1}{2},j,k}^{n+\frac{1}{2}} = \boldsymbol{A}\cdot\begin{bmatrix} J_x|_{i+\frac{1}{2},j,k}^{n-\frac{1}{2}} \\ J_y|_{i+\frac{1}{2},j,k}^{n-\frac{1}{2}} \end{bmatrix} + 2\sigma_0\Gamma\boldsymbol{B}\cdot\begin{bmatrix} E_x|_{i+\frac{1}{2},j,k}^{n} \\ E_y|_{i+\frac{1}{2},j,k}^{n} \end{bmatrix} \tag{4.43}$$

e

$$J_y|_{i,j+\frac{1}{2},k}^{n+\frac{1}{2}} = \boldsymbol{A}\cdot\begin{bmatrix} J_x|_{i,j+\frac{1}{2},k}^{n-\frac{1}{2}} \\ J_y|_{i,j+\frac{1}{2},k}^{n-\frac{1}{2}} \end{bmatrix} + 2\sigma_0\Gamma\boldsymbol{B}\cdot\begin{bmatrix} E_x|_{i,j+\frac{1}{2},k}^{n} \\ E_y|_{i,j+\frac{1}{2},k}^{n} \end{bmatrix}. \tag{4.44}$$

Diferentemente do que é proposto em [23], neste trabalho as componentes da densidade superficial de corrente, tangenciais às folhas de grafeno, são calculadas nas mesmas posições espaciais definidas por Yee, para o cálculo das componentes correspondentes de campo elétrico, tal como ilustra a Fig. 22 para uma folha de grafeno colocada paralelamente ao plano $x - y$. Isso é necessário para o cálculo fisicamente adequado das componentes de $\vec{J}$ e $\vec{E}$ em folhas de grafeno, mas de forma a garantir a correta representação da interdependência entre J_x e J_y, especificada por (4.30) e (4.31), que decorre da natureza tensorial da condutividade elétrica (3.14). Dessa forma, médias espaciais das componentes de campo devem ser consideradas nos cálculos de (4.43) e (4.44). Portanto, têm-se

$$J_x|_{i,j+\frac{1}{2},k}^{n-\frac{1}{2}} = \frac{1}{4}\left(J_x|_{i+\frac{1}{2},j,k}^{n-\frac{1}{2}} + J_x|_{i+\frac{1}{2},j+1,k}^{n-\frac{1}{2}} + J_x|_{i-\frac{1}{2},j,k}^{n-\frac{1}{2}} + J_x|_{i-\frac{1}{2},j+1,k}^{n-\frac{1}{2}}\right) \tag{4.45}$$

e

$$J_y|_{i+\frac{1}{2},j,k}^{n-\frac{1}{2}} = \frac{1}{4}\left(J_y|_{i,j+\frac{1}{2},k}^{n-\frac{1}{2}} + J_y|_{i+1,j+\frac{1}{2},k}^{n-\frac{1}{2}} + J_y|_{i,j-\frac{1}{2},k}^{n-\frac{1}{2}} + J_y|_{i+1,j-\frac{1}{2},k}^{n-\frac{1}{2}}\right). \tag{4.46}$$

Procedimento similar é realizado para as componentes de campo $E_x|_{i,j+\frac{1}{2},k}^{n}$ e $E_y|_{i+\frac{1}{2},j,k}^{n}$.

Tendo em vista que as componentes de $\vec{J}$ já foram calculadas na folha de grafeno, a lei de Ampère deve ser usada para o cálculo das componentes de $\vec{E}$. Assim, a equação FDTD para a atualização de E_x é

$$\begin{aligned} E_x|_{i+\frac{1}{2},j,k}^{n+1} = E_x|_{i+\frac{1}{2},j,k}^{n} \quad &+ \quad \frac{\Delta_t}{\varepsilon}\left(\frac{H_z|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^{n+\frac{1}{2}} - H_z|_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta_y}\right. \\ &- \quad \left.\frac{H_y|_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} - H_y|_{i+\frac{1}{2},j,k-\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta_z} - \frac{J_x|_{i+\frac{1}{2},j,k}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta_z}\right). \end{aligned} \tag{4.47}$$

De maneira análoga, é possível obter uma expressão para $E_y|_{i,j+\frac{1}{2},k}^{n+1}$. Finalmente, E_z e todas as componentes escalares de campo magnético são calculadas exatamente como no método FDTD original [18]. Neste trabalho, a linguagem de programação C foi empregada para implementação do método proposto neste capítulo. O computador com as configurações: Intel® Core™ i5-3330, 3 GHz e 8 GB de mémoria RAM, foi utilizado para realização das simulações.

A escolha por uma linguagem de nível intermediário foi motivada pelo baixo tempo de simulação computacional alcançado, utilizando-se a linguagem C, quando comparado com os principais *softwares* comerciais. Por exemplo, para a resposta em frequência de uma FSS contendo unicamente uma folha de grafeno quadrada em sua célula unitária, o cálculo de uma única frequência utilizando-se, por exemplo, o programa comercial HFSS dura em torno de 20 minutos. No entanto, utilizando-se a formulação FDTD implementada, escrita em linguagem C, a simulação no domínio do tempo dura em torno de 8 horas, com a possibilidade do cálculo de 1000 ou mais frequências, através da transformada de Fourier do sinal temporal obtido. Dessa forma, para otimização e consequentemente projeto da FSS desenvolvida neste trabalho, é preferível o uso da formulação FDTD que foi implementada utilizando-se a linguagem de programação C.

5 Projeto da FSS inteligente e resultados obtidos

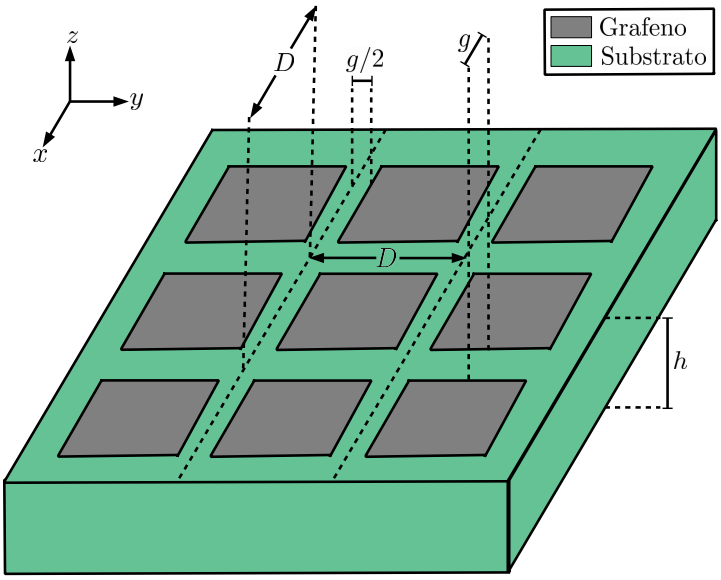
Neste capítulo, é projetada uma FSS inteligente que possui modos de operação controlados através do potencial químico em elementos de grafeno, pertencentes à FSS. O dispositivo pode operar em modos *single-* ou *dual-band*, com possibilidade de reconfiguração espectral de banda(s). Todos os passos necessários para obtenção do dispositivo são apresentados, bem como os resultados obtidos.

5.1 Validação da formulação FDTD para folhas de grafeno

A fim de validar a formulação FDTD desenvolvida no Tópico 4.3, a resposta em frequência da FSS de grafeno descrita em [1] é reproduzida. As soluções numéricas obtidas utilizando-se a rotina FDTD desenvolvida neste trabalho são comparadas com os resultados calculados empregando o *software* HFSS [24].

A FSS modelada para fins de validação é ilustrada pela Fig. 23. As células unitárias quadradas possuem período $D = 5$ μm. O comprimento da aresta de cada elemento quadrado de grafeno da estrutura periódica é $D - g$, onde $g = 0{,}5$ μm. Os parâmetros das folhas de grafeno da FSS são $\mu_c = 0{,}5$ eV, $\tau = 0{,}5$ ps e $T = 300$ K. Para uma comparação adequada dos resultados aqui calculados com os obtidos em [1], a estrutura de grafeno é simulada no espaço livre (ou seja, a permissividade relativa do substrato é $\varepsilon_r = 1$ e , consequentemente, h é irrelevante para este caso). A estrutura está sob influência de um campo magnetostático externo $B = B_0\,\hat{a}_z$, na qual $B_0 = 1$ T.

Figura 23 – Geometria da FSS de [1] (vista em perspectiva de parte da estrutura periódica).



Fonte: Adaptada de [1].

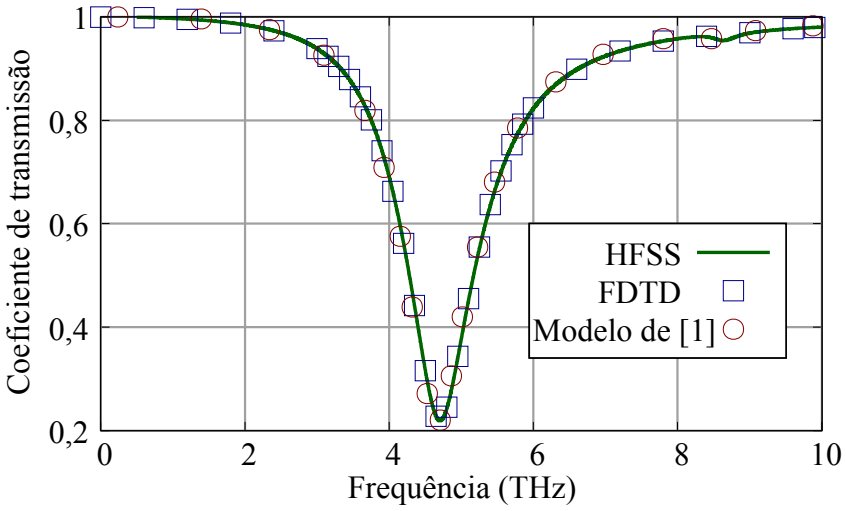
O domínio computacional utilizado no método FDTD para representar a célula unitária da FSS sob análise é de $20 \times 20 \times 400$. Nesta malha, as células de Yee são cúbicas, com arestas medindo $\Delta = 0{,}25$ μm. Abaixo e acima da estrutura periódica, usa-se a formulação *convolutional perfectly matched layer* (CPML) [105], apresentada no Tópico 4.2, absorvendo ondas eletromagnéticas nestes limites do domínio computacional FDTD. A periodicidade é alcançada pela aplicação da técnica PBC (*Periodic Boundary Condition*) definida em [109] nas extremidades laterais de um único período da FSS. A FSS é excitada por uma onda plana polarizada em x, gerada através do uso da técnica TF / SF (*Total-Field / Scattered-Field*) [18], cujo perfil temporal é governado por um pulso Gaussiano com uma amplitude espectral mínima significativa em $f = 20$ THz.

No programa comercial HFSS, as folhas de grafeno são modeladas como impedâncias de superfícies anisotrópicas (designação da condição de contorno no *software*). As partes real e imaginária de cada elemento de $\tilde{\boldsymbol{\sigma}}^{-1}(\omega)$ (denotado por $\tilde{\boldsymbol{Z}}_{\boldsymbol{s}}(\omega)$ no HFSS) ao longo de toda a faixa de frequência sob análise são importadas usando um arquivo auxiliar. A matriz $\tilde{\boldsymbol{\sigma}}^{-1}(\omega)$ é a inversa de (3.14). O elemento de excitação denominado *Floquet port* e as condições de contorno *Master* e *Slave* são utilizados para aplicar a periodicidade do problema.

A Fig. 24 ilustra o coeficiente de transmissão de co-polarização obtido neste trabalho, usando a modelagem FDTD proposta para o grafeno, e a curva gerada pelo *software* HFSS. Em

toda a faixa de interesse ($0{,}5 - 10$ THz), as respostas em frequência obtidas usando FDTD e HFSS mostram boa concordância com os resultados apresentados em [1], em que o coeficiente de transmissão mínimo de co-polarização é de $0{,}22$ para a estrutura da Fig. 23, ocorrendo aproximadamente em $4{,}70$ THz.

Figura 24 – Validação da metodologia desenvolvida pelo FDTD: coeficiente de transmissão de co-polarização.

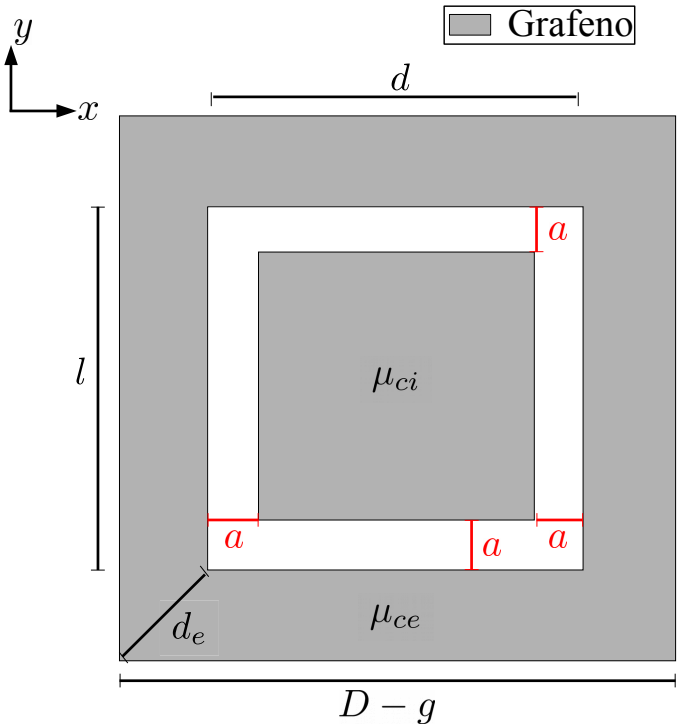


Fonte: O autor.

5.2 Projeto de uma FSS inteligente de grafeno operando como filtro *dual-band* ou *single-band*

Nesta seção, uma FSS inteligente de grafeno é proposta. A célula unitária da estrutura da Fig. 23 é substituída pela célula unitária ilustrada pela Fig. 25. Ela é composta de dois elementos de grafeno: um anel quadrado com potencial químico μ_{ce} e uma folha de grafeno colocada de forma coplanar ao anel, em sua abertura, com potencial químico μ_{ci}. A FSS proposta possui os seguintes parâmetros fixos: $D = 5$ μm, $g = 0{,}5$ μm e $a = 100$ nm. Além disso, o campo magnetostático não é aplicado à estrutura ($B_0 = 0$). Observa-se que esses parâmetros fixos são baseados na FSS proposta em [16], cuja célula unitária tem apenas o anel quadrado de grafeno, com as arestas da abertura medindo $d = l = 2,25$ μm (sem a folha interna de grafeno proposta neste trabalho). Cada elemento de grafeno da célula unitária é configurado com $\tau = 0{,}25$ ps e $T = 300$ K. O substrato é caracterizado pelos parâmetros $\varepsilon_r = 3{,}9$ e $h = 1$ μm.

Figura 25 – A célula unitária da FSS proposta neste trabalho para alteração dinâmica do estado de operação e sintonização inteligente de banda(s) de rejeição.



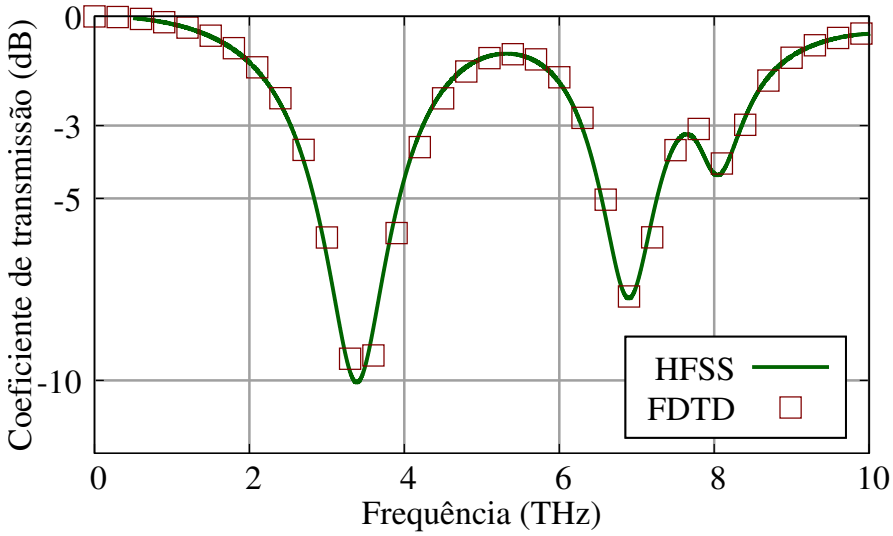
Fonte: O autor.

Como um procedimento preliminar para obter a FSS multibanda inteligente, analisa-se a resposta espectral de uma FSS, cuja célula unitária é formada por um anel de grafeno configurado com $\mu_{ce} = 1$ eV e uma abertura retangular com os parâmetros geométricos $d = 0{,}25$ μm, $l = 2{,}25$ μm e $d_e = 1{,}59$ μm, como indicado na Fig. 25. Para esta análise inicial, a folha de grafeno na abertura do anel não está incluída na célula unitária. Esta configuração é investigada via FDTD e HFSS para demonstrar que uma abertura retangular no anel de grafeno, usada como célula unitária da FSS, produz mais de uma banda de rejeição. Esta análise é o primeiro passo para o projeto do dispositivo (FSS inteligente) proposto. Nas simulações do FDTD, a malha computacional uniforme tem $160 \times 160 \times 400$ células cúbicas de Yee, cujas arestas medem $31{,}25$ nm.

Como pode ser visto nos resultados da Fig. 26, esta estrutura periódica tem duas bandas de rejeição (FSS *dual-band*). Considerando o nível de rejeição de -4 dB como referência, a janela de banda inferior de rejeição tem uma largura de banda relativa de 40 %, variando de $2{,}70$ THz a $4{,}05$ THz. Nesta faixa de frequência, o mínimo de transmissão de $-10{,}05$ dB é visto na

frequência de $3{,}39$ THz. A largura de banda da faixa de rejeição de maior frequência ($6{,}43 - 7{,}38$ THz) é de $13{,}76$ %. O mínimo de transmissão é de $-7{,}71$ dB em $6{,}93$ THz.

Figura 26 – Comparação entre os resultados do FDTD e HFSS: Coeficiente de transmissão de co-polarização da FSS para o anel de grafeno, com abertura retangular de dimensões $d = 0{,}25$ μm e $l = 2{,}25$ μm, sem a folha interna de grafeno. Para o anel de grafeno, μ_{ce} é definido como 1 eV.



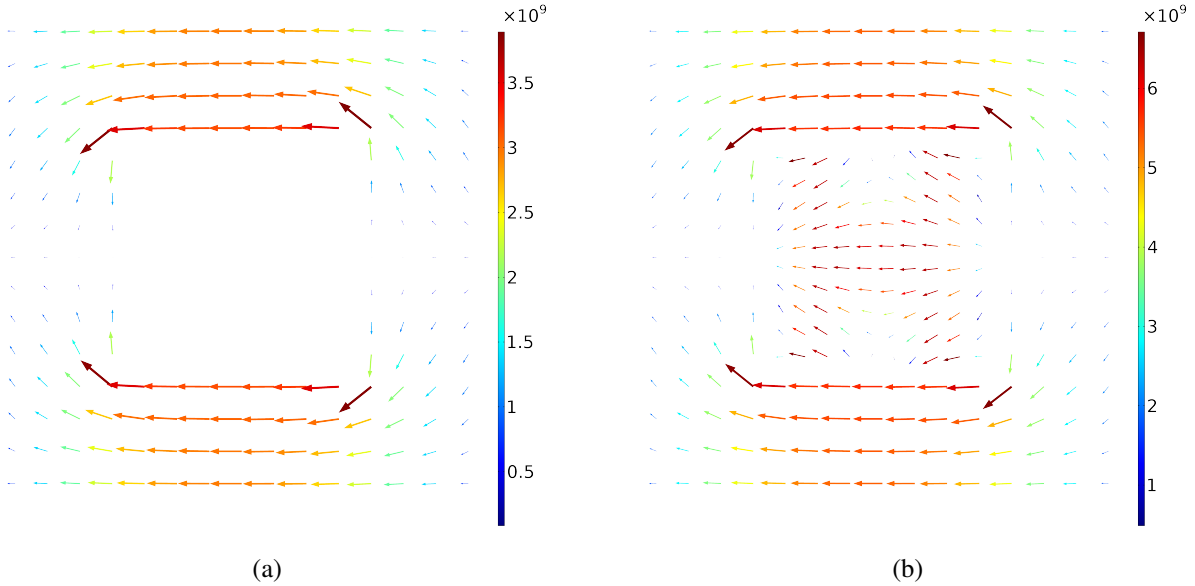
Fonte: O autor.

A Fig. 27(a) ilustra a distribuição espacial da densidade de corrente superficial $\vec{J}_s$ para uma FSS com célula unitária formada pelo anel quadrado de grafeno (sem a folha de grafeno na sua abertura), na sua frequência de ressonância de $3{,}29$ THz. Por outro lado, a Fig. 27(b) ilustra a distribuição de $\vec{J}_s$ obtida quando uma folha de grafeno é colocada na sua abertura. Para o caso da Fig. 27(b), o potencial químico μ_{ci} é ajustado para o valor insignificante de 1 meV, tornando a folha de grafeno mais transparente do que o anel, que é configurado com $\mu_{ce} = 0{,}75$ eV. Devido ao pequeno nível de condutividade na folha de grafeno (ver Fig. 16(a)), seu nível de densidade de corrente é consideravelmente menor do que o observado no anel. Como pode ser visto comparando as Fig. 27(a) e Fig. 27(b), as distribuições de corrente obtidas nos anéis são extremamente semelhantes, caracterizando o mesmo tipo de ressonância.

As Figs. 28(a) e 28(b) ilustram as distribuições de $\vec{J}_s$ obtidas para a FSS baseada no anel de grafeno de abertura retangular (cujo coeficiente de transmissão está ilustrado na Fig. 26) nas frequências de mínima transmissão em cada faixa de rejeição ($3{,}39$ THz e $6{,}93$ THz). Na Fig. 28(a), obtida na primeira ressonância do dispositivo, é ilustrado um modo dipolo, similarmente ao observado na Fig. 27(a) para o caso do anel de abertura quadrada. Em contraste, a Fig. 28(b)

mostra um modo quadrupolo para a segunda ressonância da estrutura, que é uma consequência clara do fato de que $d \neq l$. Para os casos da Fig. 27, a única frequência de ressonância observada, na faixa espectral analisada para o anel quadrado, é causada principalmente pelas intensas correntes que fluem de uma das extremidades externas do anel, paralela a y, até a extremidade no lado oposto, separadas pela distância $D - g$ (ver Fig. 25). Isto também é observado na Fig. 28(a) para a primeira ressonância do anel de abertura retangular. No entanto, a segunda ressonância da FSS, baseada no anel de abertura retangular, é devido principalmente às intensas correntes que fluem entre as arestas do anel e as arestas da abertura retangular (que são separadas pela distância $(D - g - d)/2$, como é perceptível pela inspeção da Fig. 28(b)). Isso justifica o fato de que a segunda frequência de ressonância (6,93 THz) é maior que o dobro da primeira frequência de ressonância (3,39 THz).

Figura 27 – $\vec{J}_s$ (A/m^2) para as seguintes FSSs: (a) anel quadrado apenas, $\mu_{ce} = 1$ eV e $d = l = 2{,}25\mu$m em $f = 3{,}29$ THz e (b) anel quadrado com a folha de grafeno em sua abertura, $\mu_{ce} = 0{,}75$ eV, $\mu_{ce} = 1$ meV e $a = 100$ nm, para $f = 2{,}65$ THz (primeira ressonância).



Fonte: O autor.

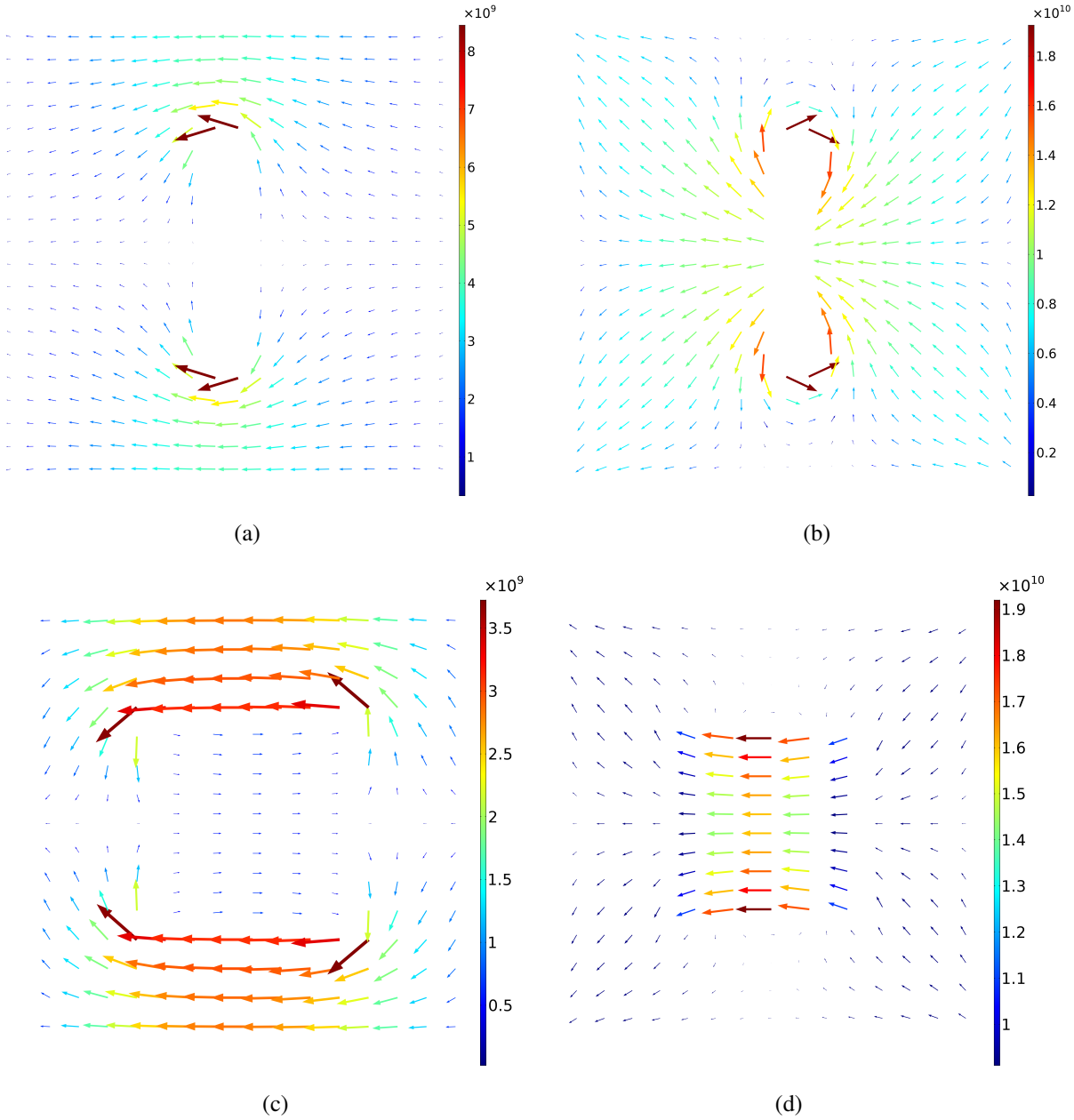
Assim, a ideia principal que fundamenta o projeto da FSS inteligente proposta é usar a folha de grafeno na abertura retangular do anel para ativar ou desativar a banda de rejeição de maior frequência, produzindo dois modos de operação reconfiguráveis. Isto é possível porque ajustando o potencial químico de uma folha de grafeno para zero, esta se torna praticamente transparente para ondas eletromagnéticas e o incremento deste parâmetro aumenta a condutividade elétrica

do elemento de grafeno (ver Fig. 16(a)). Para os casos em que $\mu_{ci} = 0$ eV e $\mu_{ce} \cong 1$ eV, a FSS opera principalmente devido às intensas correntes vistas no anel da Fig. 28(c) (modo dipolo), que é similar à distribuição de corrente vista na Fig. 27(a) para o caso baseado apenas com anel. Além disso, quando μ_{ci} se aproxima de 1 eV, uma segunda ressonância é criada, funcionando com base não somente pela distribuição de corrente no anel vista na Fig. 28(d), que é similar ao modo quadrupolo da Fig. 28(b) do anel com abertura retangular na segunda ressonância. A operação também é baseada nas correntes induzidas na folha de grafeno, na abertura do anel. Em resumo, quando μ_{ce} e μ_{ci} são muito maiores do que zero simultaneamente, o espaço a, entre o anel e a folha interna de grafeno, funciona de maneira semelhante à abertura retangular da Fig. 28(b). Além disso, quando μ_{ci} se aproxima de zero, a folha interna torna-se quase transparente e a FSS comporta-se analogamente como a estrutura da Fig. 27(a).

Para a FSS inteligente proposta, as dimensões associadas à abertura são $d = l = 2{,}25$ μm, e a distância entre a extremidade da abertura e a folha de grafeno é $a = 100$ nm. No método FDTD, uma malha computacional uniforme com $200 \times 200 \times 400$ células cúbicas de Yee é usada ($\Delta_x = \Delta_y = \Delta_z = 25$ nm). Na malha criada usando o HFSS, as arestas mínima e máxima dos elementos triangulares são 13 nm e 270 nm, respectivamente. Esta malha de elementos finitos é ilustrada na Fig. 29.

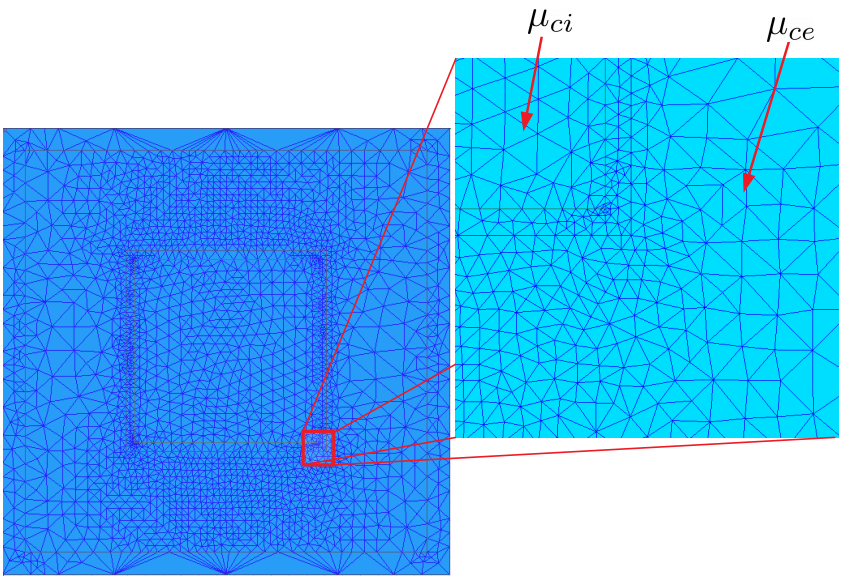
O primeiro estado de operação é o modo *dual-band* (modo *on*). Como explicado anteriormente, ele pode ser obtido, por exemplo, definindo $\mu_{ce} = \mu_{ci} = 1$ eV. Para esta configuração de estado, a primeira banda de rejeição tem uma largura de banda relativa de $29{,}30\%$ ($2{,}36 - 3{,}17$ THz), onde o mínimo de transmissão é $-7{,}19$ dB em $2{,}78$ THz. A segunda banda de rejeição de transmissão tem uma largura de banda de $23{,}30\%$ ($5{,}50 - 6{,}95$ THz), em que o mínimo de transmissão é $-10{,}27$ dB em $f = 6{,}21$ THz. Como mostra a Fig. 30, o mínimo de transmissão na janela de rejeição de banda superior está 3 dB abaixo do mínimo da primeira banda de rejeição. Isto é esperado, uma vez que a banda de rejeição de menor frequência é principalmente devido às correntes induzidas no anel e a banda de rejeição de maior frequência é devida não apenas a correntes induzidas no anel de grafeno, mas também por indução na folha de grafeno, na abertura do anel. Este comportamento físico pode ser observado inspecionando as Figs. 28(c) e 28(d), que ilustram $\vec{J}_s$ para as frequências correspondentes aos primeiro e segundo mínimos de transmissão, respectivamente.

Figura 28 – $\vec{J}_s$ (A/m^2) para as FSSs configuradas com $\mu_{ce} = 1$ eV e com os seguintes parâmetros: (a) $d = 0{,}25$ μm e $l = 2{,}25$ μm para $f = 3{,}39$ THz (primeira ressonância, sem folha de grafeno na abertura do anel), (b) $d = 0{,}25$ μm e $l = 2{,}25$ μm para $f = 6{,}93$ THz (segunda ressonância, sem folha de grafeno na abertura do anel), (c) $\mu_{ci} = 1$ eV e $a = 100$ nm, para $f = 2{,}78$ THz (primeira ressonância da FSS proposta), (d) $\mu_{ci} = 1$ eV e $a = 100$ nm, para $f = 6{,}21$ THz (segunda ressonância da FSS proposta).



Fonte: O autor.

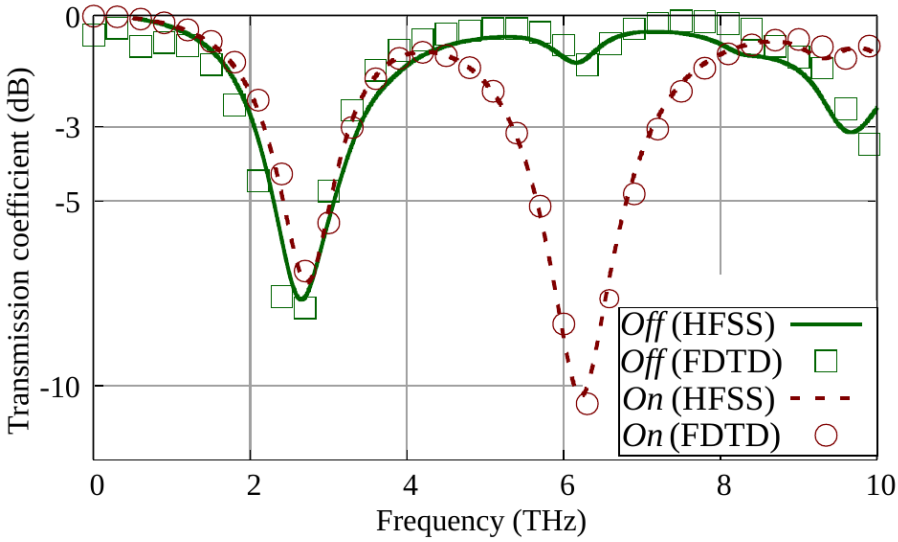
Figura 29 – Malha gerada no HFSS para modelagem da FSS com $a = 100$ nm. Os Detalhes de malha estão destacados.



Fonte: O autor.

O segundo estado de operação é o modo *single-band* (modo *off*), que pode ser obtido fixando $\mu_{ce} = 0{,}75$ eV e $\mu_{ci} = 1$ meV. Neste estado, o dispositivo opera com uma única banda de frequências de baixos níveis de transmissão, uma vez que a folha de grafeno colocada na abertura quadrada do anel é praticamente transparente. O parâmetro μ_{ce} é ajustado para $0{,}75$ eV, a fim de maximizar a coincidência da faixa única de rejeição espectral com a banda inferior de ressonância do modo *dual-band*. Assim, o mínimo de transmissão é $-7{,}66$ dB em $f = 2{,}65$ THz. A largura de banda relativa nesta configuração *single-band* é aproximadamente $37{,}50\%$ ($2{,}21 - 3{,}23$ THz), ligeiramente menor do que a largura de banda da banda inferior de ressonância do modo *on*, conforme pode ser inspecionado através da Fig. 30. Além disso, como ilustrado na Fig. 27(b), a distribuição apresenta um modo dipolo semelhante ao observado na Fig. 27(a) para a FSS sem a folha de grafeno na abertura do anel. A Tabela 1 resume os parâmetros das bandas de rejeição das estruturas da FSS proposta e analisada até este ponto do trabalho.

Figura 30 – Coeficiente de transmissão de co-polarização para $a = 100$ nm, para as duas configurações de operação da FSS proposta.



Fonte: O autor.

Tabela 1 – Bandas de rejeição das FSSs

	Banda de rejeição inferior	Banda de rejeição superior
FSS baseada no anel de grafeno com abertura retangular	40% (2,70 − 4,05 THz) −10,05 dB (3,39 THz)	13,76% (6,43 − 7,38 THz) −7,71 dB (6,93 THz)
FSS inteligente no modo *dual-band*	29,30% (2,36 − 3,17 THz) −7,19 dB (2,78 THz)	23,30% (5,50 − 6,95 THz) −10,37 dB (6,21 THz)
FSS inteligente no modo *single-band*	37,50% (2,21 − 3,23 THz) −7,76 dB (2,65 THz)	–

Fonte: O autor.

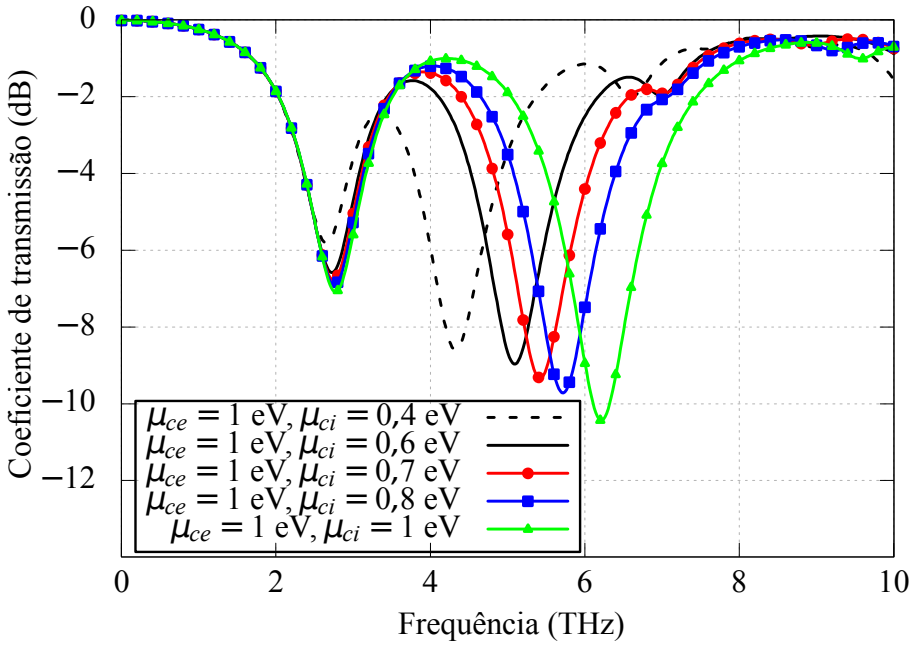
5.3 Controle inteligente da(s) banda(s) de rejeição

Nesta seção, os modos de operação do dispositivo proposto são apresentados juntamente com os resultados e as análises físicas, fundamentando os mecanismos de funcionamento da FSS.

5.3.1 Ajuste somente da banda superior de rejeição (modo *on*)

A fim de se obter, de forma controlável, o deslocamento exclusivamente da banda superior de rejeição no modo *on*, o ajuste de μ_{ci} é suficiente. Assim, μ_{ce} é definido como 1 eV e μ_{ci} pode assumir os valores entre $0{,}4$ eV e $1{,}0$ eV. A Fig. 31 mostra os coeficientes de transmissão para quatro configurações de potenciais químicos, ilustrando a mudança somente da banda superior de rejeição. Para as configurações demonstradas, a faixa de varredura espectral é de $1{,}89$ THz (de $4{,}33$ a $6{,}22$ THz). A primeira banda de rejeição não é deslocada, de modo que o seu mínimo de transmissão tende a estar em torno de $2{,}75$ THz, quando apenas μ_{ci} é ajustado.

Figura 31 – Coeficiente de transmissão para as configurações analisadas.



Fonte: O autor.

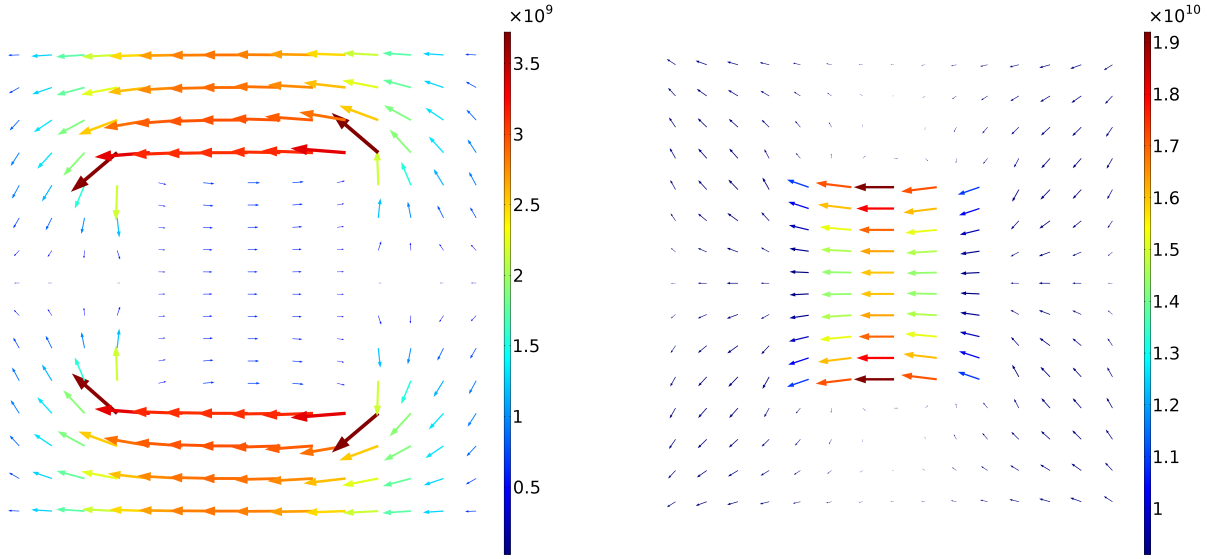
Para entender melhor a física que governa o modo de operação do dispositivo, analisam-se mais duas configurações: $\mu_{ce} = \mu_{ci} = 1$ eV e $\mu_{ce} = 1$ eV / $\mu_{ci} = 0{,}6$ eV. As Figs. 32(a) e 33(a) ilustram as distribuições espaciais de $\vec{J}_s$ obtidas nas frequências de mínimo de transmissão das bandas inferior de rejeição, em $2{,}78$ e $2{,}73$ THz, correspondentes às configurações $\mu_{ce} = \mu_{ci} = 1$ eV e $\mu_{ce} = 1$ eV / $\mu_{ci} = 0{,}6$ eV, respectivamente. Para ambas as configurações, $\vec{J}_s$ no anel de grafeno é muito mais intenso do que a densidade de corrente produzida na folha de grafeno colocada na abertura do anel. Observando os dados da Tabela 2, nota-se que λ_{SPP} é em torno de 86 μm, que é aproximadamente quatro vezes o perímetro do anel (18 μm), produzindo ressonância para a densidade de corrente $\vec{J}_s = \Re\{\tilde{\boldsymbol{\sigma}}\tilde{\boldsymbol{E}}\}$. Por outro lado, a aresta da folha de

grafeno na abertura é $d - 2a = 2{,}05$ μm (ver Fig. 25), desfavorecendo a ressonância neste elemento.

Comparando as Figs. 32(a) e 33(a), observa-se que a densidade de corrente produzida na folha de grafeno na abertura quando $\mu_{ci} = 0{,}6$ eV, na primeira ressonância, exibe níveis maiores do que a densidade de corrente naquela folha configurada com $\mu_{ci} = 1$ eV. Esta característica pode ser explicada pela análise dos dados na Tabela 2. Quando $\mu_{ci} = 0{,}6$ eV, na primeira ressonância ($f = 2{,}73$ THz), $\lambda_{SPP} = 67{,}8$ μm. No entanto, para $\mu_{ci} = 1$ eV, também na primeira ressonância (2,78 THz), $\lambda_{SPP} = 85{,}3$ μm. Assim, as dimensões das arestas da folha estão mais próximas de $\lambda_{SPP} = 67{,}8$ μm, facilitando as correntes mais altas apontadas fluírem. Além disso, comparando os níveis de $\vec{J}_s$ no anel de grafeno, indicados nas Figs. 32(a) e 33(a), intensidades ligeiramente mais altas são observadas para a configuração $\mu_{ce} = \mu_{ci} = 1$ eV (Fig. 32(a)). É por isso que, na primeira ressonância, o nível de transmissão para esta configuração é menor do que para a configuração $\mu_{ce} = 1$ eV / $\mu_{ci} = 0{,}6$ eV, tal como ilustrado na Fig. 31. O padrão de corrente em antifase estabelecido envolvendo o anel e a folha é formado, porque as correntes vistas na folha são induzidas principalmente pelas correntes no anel, a fim de compensar as variações do fluxo magnético através da folha. Para o caso da configuração $\mu_{ce} = 1$ eV / $\mu_{ci} = 0{,}6$ eV, este acoplamento promove reduções moderadas das correntes no anel e, consequentemente, os níveis de transmissão observados para esta configuração são ligeiramente maiores aos vistos para $\mu_{ce} = \mu_{ci} = 1$ eV (ver Fig. 31).

As distribuições de $\vec{J}_s$ nas segundas frequências de ressonância (nos mínimos de transmissão das bandas superiores de rejeição) para as configurações $\mu_{ce} = \mu_{ci} = 1$ eV e $\mu_{ce} = 1$ eV / $\mu_{ci} = 0{,}6$ eV são mostradas nas Figs. 32(b) e 33(b), respectivamente. A Fig. 32(b) ilustra níveis mais elevados de correntes na folha de grafeno da abertura do que o observado na Fig. 33(b). Isso acontece devido às dimensões elétricas específicas da folha para os diferentes casos em análise. Para o caso da Fig. 33(b), tem-se $\mu_{ci} = 0{,}6$ eV na frequência de ressonância de $5{,}09$ THz ($\lambda_{SPP} = 22{,}67$ μm). Para o caso da Fig. 32(b), a folha é configurada com $\mu_{ci} = 0{,}6$ eV e $f = 6{,}21$ THz ($\lambda_{SPP} = 23{,}90$ μm). Desta forma, observa-se que as dimensões da folha estão mais próximas de $22{,}67$ μm do que de $23{,}90$ μm, justificando as amplitudes de corrente da folha serem ligeiramente superiores às observadas na Fig. 33(b).

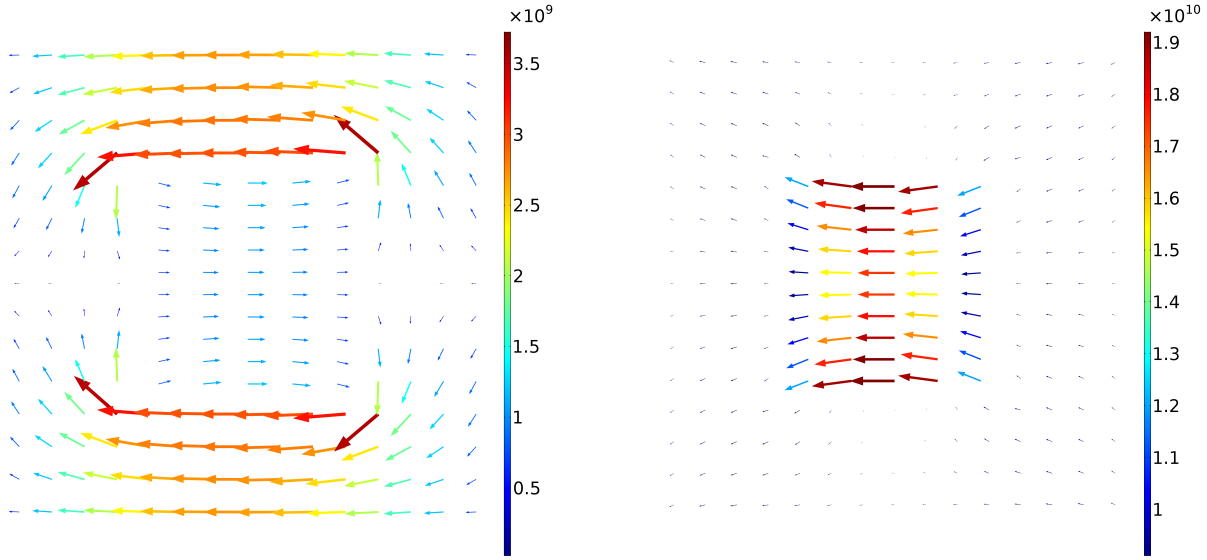
Figura 32 – Distribuição da densidade de corrente superficial $\vec{J}_s$ (A/m^2) para a configuração $\mu_{ce} = \mu_{ci} = 1$ eV: (a) na primeira ressonância (2,78 THz) e (b) na segunda ressonância (6,21 THz).



(a) (b)

Fonte: O autor.

Figura 33 – Distribuição de $\vec{J}_s$ (A/m^2) para a configuração $\mu_{ce} = 1$ eV / $\mu_{ci} = 0{,}6$ eV: (a) 2,73 THz e (b) 5,09 THz.



(a) (b)

Fonte: O autor.

Com relação às densidades de correntes da segunda ressonância no anel de grafeno, é importante observar que as correntes são produzidas em sua maioria alinhadas às linhas diagonais do anel. Além disso, as correntes alinhadas ao eixo x são observadas, devido à polarização de excitação da onda plana. As correntes nas diagonais são formadas devido às correntes em antifase induzidas pelas correntes da folha, nas fitas do anel de grafeno, que são paralelas ao eixo x e, naturalmente, devido à polarização de excitação da onda plana. Como pode ser visto nas Figs. 33(a) e 33(b), a configuração $\mu_{ce} = \mu_{ci} = 1$ eV tem amplitudes de correntes nas diagonais maiores do que na configuração $\mu_{ce} = 1$ eV / $\mu_{ci} = 0{,}6$ eV, em suas respectivas segundas frequências de ressonância. Os diferentes níveis de corrente estão relacionados ao parâmetro da diagonal do anel de grafeno d_e, que mede $1{,}59$ μm (Fig. 25). O comprimento d_e é mais próximo de $\lambda_{SPP} = 23{,}90$ μm (caso da Fig. 32(b)) do que de $\lambda_{SPP} = 33{,}65$ μm (caso da Fig. 33(b)). Portanto, é possível afirmar que as maiores correntes nas diagonais do anel para o caso da Fig. 32(b) estabelecem uma área efetiva maior para a reflexão da onda incidente, ou seja, o anel tem contribuição relevante para os níveis de reflexão neste caso. Assim, o nível de transmissão para a configuração $\mu_{ce} = \mu_{ci} = 1$ eV é, portanto, menor do que para a configuração $\mu_{ce} = 1$ eV / $\mu_{ci} = 0{,}6$ eV, tal como ilustrado na Fig. 31. Em suma, o principal mecanismo para deslocar, exclusivamente, a segunda banda de rejeição é baseado nas seguintes características: 1) na primeira ressonância, a reflexão é regida principalmente pelo anel, na medida em que as dimensões elétricas da folha não favorecem uma influência considerável; 2) na segunda ressonância, as reflexões ocorrem principalmente na folha da abertura. Os ajustes dinâmicos das dimensões elétricas da folha, pela mudança de μ_{ci}, é o mecanismo mais importante de inteligência. O anel também, pode contribuir para definir o perfil de reflexão da segunda banda de ressonância, quando níveis relevantes de correntes são induzidas.

Tabela 2 – λ_0 (comprimento de onda no vácuo) e λ_{SPP} (comprimento de onda no grafeno) para várias condições de interesse.

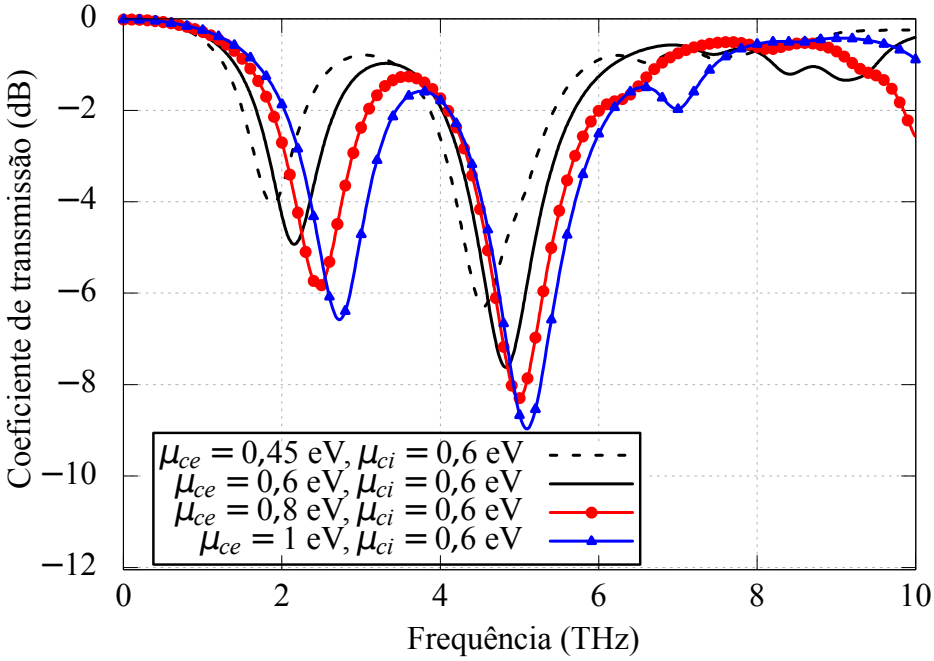
Potencial químico	Frequência	λ_0 (μm)	λ_{SPP} (μm)
$\mu_c = 1$ eV	2,71 THz	110,70	88,38
	2,73 THz	109,89	87,49
	2,78 THz	107,91	85,32
	4,91 THz	61,10	35,74
	5,09 THz	58,94	33,65
	6,21 THz	48,31	23,90
$\mu_c = 0{,}65$ eV	2,07 THz	144,92	108,88
	4,88 THz	61,47	26,20
$\mu_c = 0{,}6$ eV	2,73 THz	109,89	67,80
	5,09 THz	58,94	22,67
$\mu_c = 0{,}55$ eV	2,07 THz	144,92	100,32
	2,71 THz	110,70	64,88
	4,88 THz	61,47	22,75
	4,91 THz	61,10	22,50

Fonte: O autor.

5.3.2 Ajuste simultaneamente das duas bandas de rejeição (modo *on*)

Como é claramente visto na Fig. 17 e (3.11), ajustando μ_{ce} individualmente, alteram-se as dimensões elétricas do anel, visto que λ_{SPP} é fortemente dependente do potencial químico do grafeno. A frequência central da banda inferior de rejeição é, assim alterada, como consequência direta. No entanto, com base na discussão anterior sobre a influência do anel na banda superior de ressonância, pode-se esperar que a banda superior de rejeição também seja afetada pelo ajuste de μ_{ce}, enquanto μ_{ci} é mantido fixo. Isso é demonstrado na Fig. 34, que ilustra várias curvas de coeficientes de transmissão obtidas com $\mu_{ci} = 0{,}6$ eV e μ_{ce} variando entre $0{,}45$ eV e $1{,}0$ eV. O fato de que o deslocamento das bandas de ressonância ser à direita, conforme μ_{ce} é aumentado, pode ser entendido, ao notar (3.11) ,que a velocidade da onda plasmônica no grafeno aumenta com μ_{ce} [70], ou seja, os comprimentos elétricos do anel de grafeno são reduzidos.

Figura 34 – Coeficientes de transmissão ilustrando o deslocamento de ambas as bandas de rejeição do modo *on*, devido ao ajuste de μ_{ce}.



Fonte: O autor.

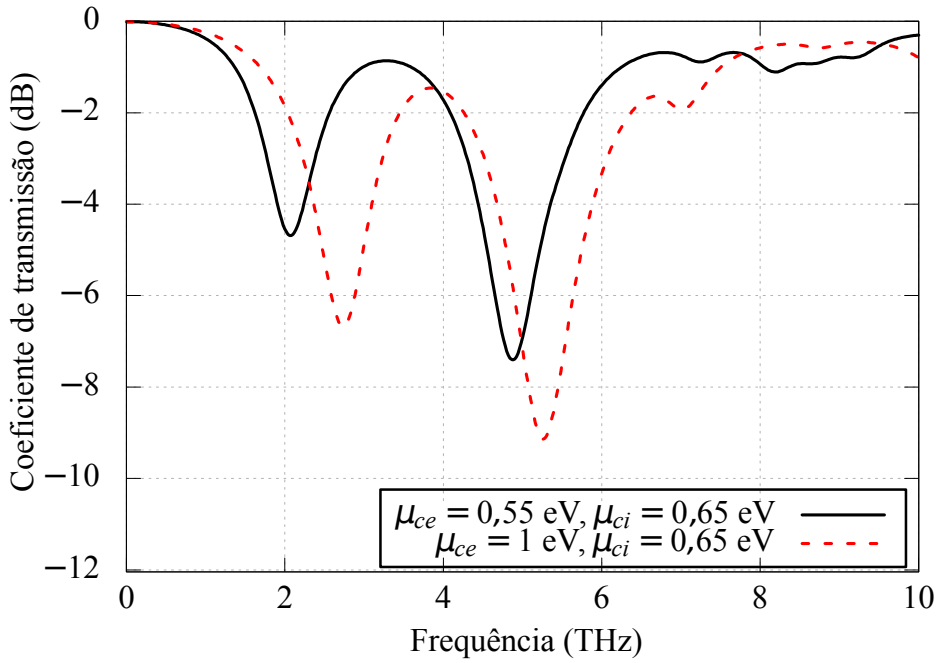
Considerando o nível de rejeição de -4 dB como referência, a varredura espectral para a banda inferior de rejeição é de $0{,}85$ THz ($1{,}87 - 2{,}72$ THz) e para a banda superior de rejeição é $0{,}55$ THz ($4{,}54 - 5{,}09$ THz). A varredura da largura de banda para a banda superior de rejeição é visivelmente mais estreita do que a da banda inferior de rejeição. Esta característica é claramente explicada pelo fato de que, a primeira depende muito mais do acoplamento entre a folha e o anel do que a anterior, conforme discutido anteriormente. Finalmente, a Tabela 3 contém a largura de banda relativa, também calculada tomando o nível de referência de rejeição como -4 dB, para cada configuração de potenciais químicos na Fig. 34.

5.3.3 Ajuste somente da banda inferior de rejeição (modo *on*)

O deslocamento, exclusivamente, da banda inferior de rejeição pode ser alcançado regulando adequadamente μ_{ce} e μ_{ci}. O ajuste de ambos os parâmetros é necessário porque, como discutido anteriormente, modificando-se unicamente μ_{ci} produz deslocamento exclusivamente na segunda banda de rejeição e, como é visto claramente da análise anterior, o ajuste de μ_{ce} altera ambas as bandas de rejeição simultaneamente, tal como ilustra a Fig. 35. Portanto, os comprimentos elétricos da folha e do anel devem ser modificados simultaneamente para produzir

o efeito desejado de deslocar exclusivamente a banda inferior de rejeição.

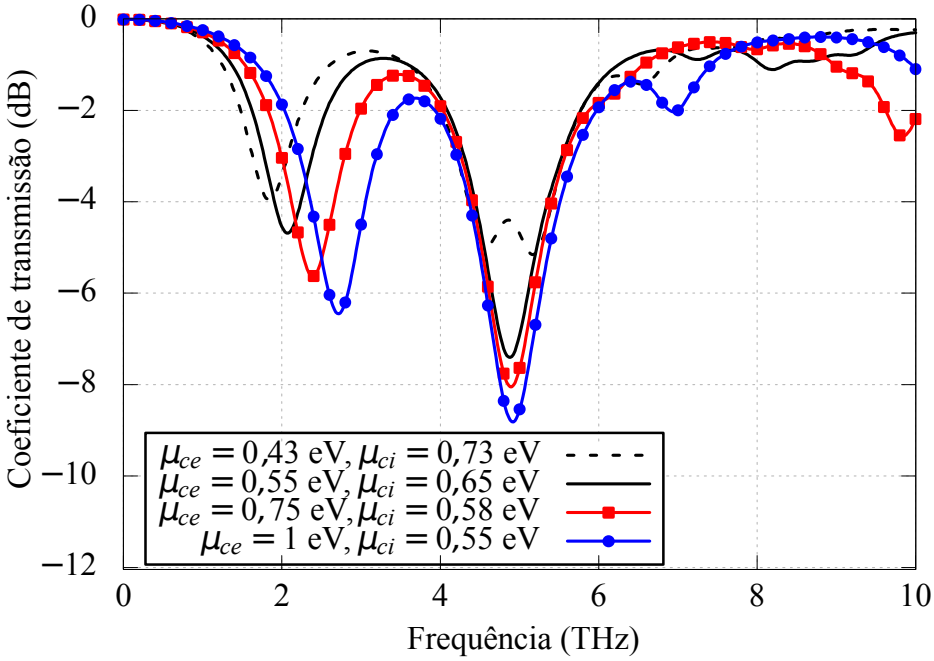
Figura 35 – Coeficientes de transmissão para as duas configurações iniciais ilustrativas, exibindo o deslocamento de ambas as bandas.



Fonte: O autor.

Na medida em que é possível deslocar apenas a segunda banda de rejeição, simplesmente ajustando μ_{ci}, como demonstrado anteriormente, o problema em questão pode ser resolvido em duas etapas. Referindo-se à Fig. 35, supõem-se que a banda inferior de rejeição esteja centrada em aproximadamente $2{,}0$ THz (linha contínua), que deve ser deslocada para aproximadamente $2{,}8$ THz (linha tracejada), preservando, entretanto, a frequência central da banda superior de rejeição em aproximadamente $4{,}9$ THz (linha contínua). Para este objetivo, o primeiro passo é centralizar a primeira banda de rejeição em $2{,}8$ THz. Isso pode ser feito preliminarmente aumentando μ_{ce} de 0,55 eV para 1 eV. No entanto, conforme mostrado na Fig. 34, ambas as bandas de rejeição são deslocadas para a direita, como esperado. Consequentemente, o segundo passo é reduzir μ_{ci} a fim de definir o mínimo de transmissão da segunda banda de ressonância de volta para $4{,}9$ THz. Seguindo o procedimento descrito, a banda inferior de rejeição pode ser deslocada, de modo controlável, tal como ilustra a Fig. 36.

Figura 36 – Coeficiente de transmissão para as configurações analisadas, ilustrando o deslocamento controlado da banda inferior de rejeição.



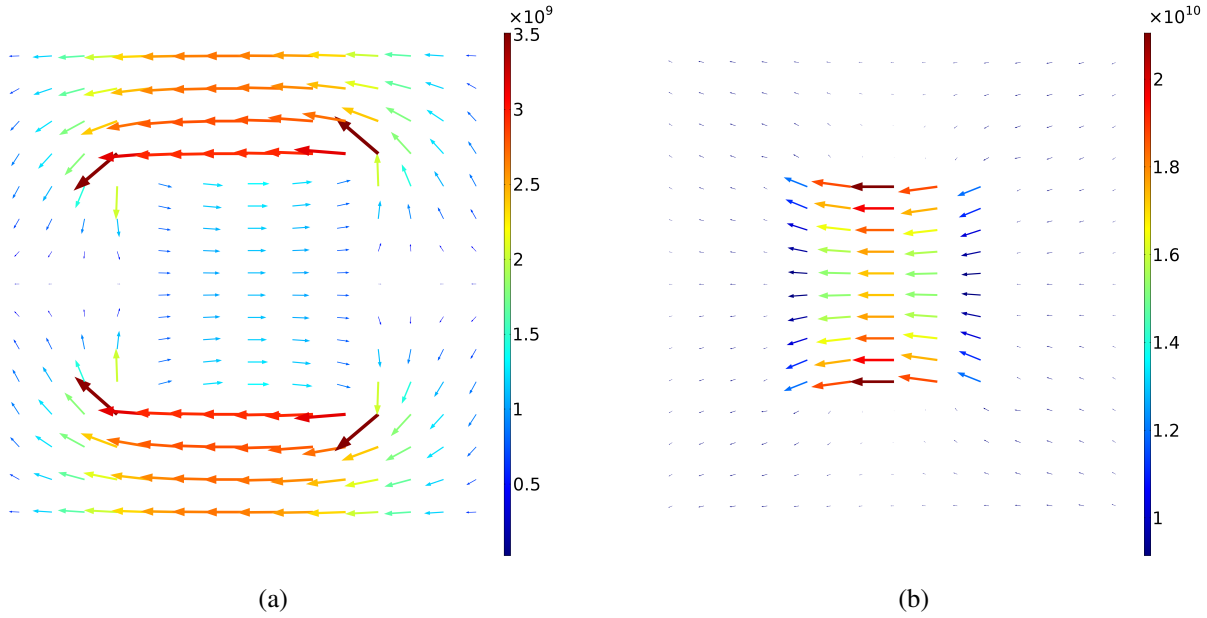
Fonte: O autor.

A Fig. 36 também ilustra os arranjos de potenciais químicos obtidos para resolver o problema em questão, isto é, deslocando a banda inferior de rejeição, enquanto preserva a banda superior de rejeição centrada em aproximadamente $4{,}9$ THz. À medida que μ_{ce} aumenta, μ_{ci} reduz-se para compensar os desvios indesejados da banda superior de rejeição. Considerando o nível de rejeição de -4 dB, como referência para o máximo de transmissão tolerável, a faixa de varredura espectral obtida, para a banda inferior de rejeição, é de 870 GHz (de $1{,}84$ THz para $2{,}71$ THz). A Tabela 3 fornece a largura de banda relativa para cada arranjo de potenciais químicos dados na Fig. 36.

O deslocamento exclusivamente da primeira banda de ressonância, também pode ser entendido analisando as distribuições superficiais de corrente $\vec{J}_s$, ilustradas nas Figs. 37 e 38. Nas Figs. 37(a) e 38(a), as distribuições obtidas nas respectivas frequências inferiores de ressonância ($2{,}71$ THz e $2{,}07$ THz) são ilustradas para as configurações $\mu_{ce} = 1$ eV / $\mu_{ci} = 0{,}55$ eV e $\mu_{ce} = 0{,}55$ eV / $\mu_{ci} = 0{,}65$ eV. Em ambos os casos, os níveis de $\vec{J}_s$ no anel de grafeno são muito mais altos do que na folha da abertura, uma vez que a banda inferior de rejeição é produzida principalmente pelo anel. Além disso, devido ao maior comprimento elétrico do anel de grafeno na Fig. 37(a) (ver Tabela 2), $|\vec{J}_s|$ é maior no anel (e na folha da abertura devido à indução do anel)

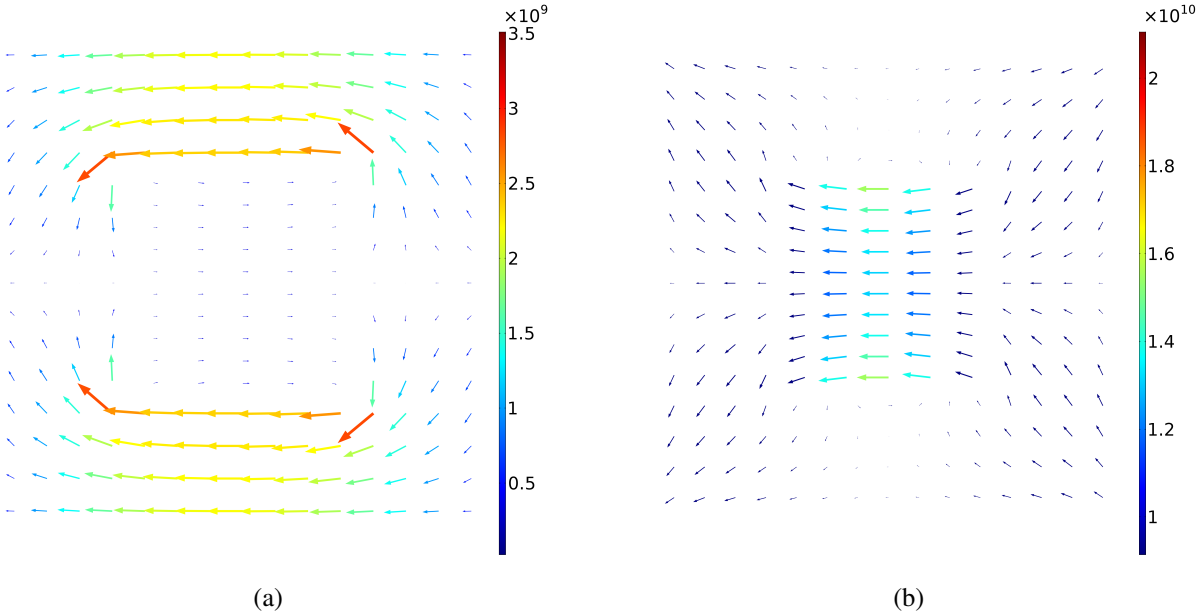
para a configuração $\mu_{ce} = 1$ eV / $\mu_{ci} = 0{,}55$ eV. Como principais consequências, a configuração $\mu_{ce} = 1$ eV / $\mu_{ci} = 0{,}55$ eV produz níveis mais baixos de transmissão e, conforme previsível, surgem bandas inferiores de ressonância centradas em frequências diferentes para cada caso (ver Fig. 36).

Figura 37 – Distribuição da densidade de corrente superficial $\vec{J}_s$ (A/m^2) para a configuração $\mu_{ce} = 1$ eV / $\mu_{ci} = 0{,}55$ eV: (a) na primeira ressonância ($2{,}71$ THz) e (b) na segunda ressonância ($4{,}91$ THz).



Fonte: O autor.

Figura 38 – Distribuição da densidade de corrente superficial $\vec{J}_s$ (A/m^2) para a configuração $\mu_{ce} = 0{,}55$ eV / $\mu_{ci} = 0{,}65$ eV: (a) na primeira ressonância (2,07 THz) e (b) na segunda ressonância (4,88 THz).



Fonte: O autor.

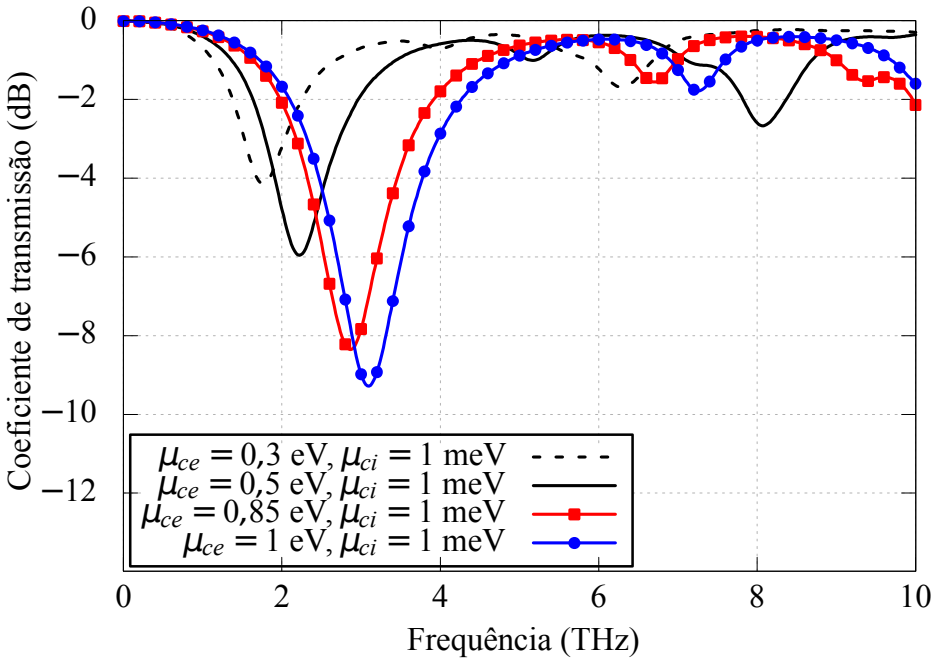
As densidades de corrente para a banda superior de rejeição (em aproximadamente 4,9 THz) são ilustradas nas Figs. 37(b) e 38(b) para as configurações $\mu_{ce} = 1$ eV / $\mu_{ci} = 0{,}55$ eV e $\mu_{ce} = 0{,}55$ eV / $\mu_{ci} = 0{,}65$ eV, respectivamente. As correntes na folha da abertura são moderadamente mais intensas para a configuração da Fig. 37(b) porque a folha é ligeiramente maior eletricamente do que no caso da Fig. 38(b), como pode ser visto inspecionando a Tabela 2 (λ_{SPP} na folha é 22,50 μm e 26,20 μm, respectivamente). Assim, a fim de preservar a frequência central da segunda banda de rejeição em aproximadamente 4,9 THz, quando o modo de operação do dispositivo é alterado de $\mu_{ce} = 1$ eV / $\mu_{ci} = 0{,}55$ eV para $\mu_{ce} = 0{,}55$ eV / $\mu_{ci} = 0{,}65$ eV, a redução do comprimento elétrico da folha da abertura é compensada aumentando-se o comprimento elétrico do anel, tanto que, λ_{SPP} no anel vai de 35,74 μm para 22,75 μm. Este aumento do comprimento elétrico do anel produz correntes consideráveis vistas no anel na Fig.38(b), uma vez que favorece a ressonância do anel, demonstrando assim a importância do acoplamento eletromagnético entre o anel e a folha da abertura, para preservar a frequência central da banda superior de rejeição.

5.3.4 Ajuste da banda de rejeição de modo *off*

No modo *off*, a folha de grafeno da abertura não deve apresentar fluxos de correntes, suprimindo assim a banda superior de rejeição. Como pode ser visto na Fig. 16, isso pode ser alcançado ajustando-se μ_{ci} a um valor muito pequeno, de tal maneira que as partes real e imaginária da condutividade sejam desprezíveis. Neste trabalho, μ_{ci} é fixado em 1 meV. Assim, o deslocamento da banda de rejeição no modo *off* é produzido pelo ajuste de μ_{ce} no anel de grafeno, conforme ilustra a Fig. 39. A Tabela 4 fornece a largura de banda relativa, considerando o nível de rejeição de -4 dB como referência, para cada configuração de potencial químico mostrado na Fig. 39. Para o modo presente de operação, a faixa de varredura espectral é de $1{,}33$ THz ($1{,}76 - 3{,}09$ THz). Assim, a mudança do comprimento elétrico do anel permite que a estrutura tenha várias frequências centrais de bandas de rejeição.

À medida que μ_{ce} é incrementado, as frequências centrais das bandas de rejeição aumentam, mais uma vez devido ao aumento da velocidade de onda plasmônica dada em (3.11). Além disso, incrementos em μ_{ce} causam um comportamento mais metálico do anel de grafeno, como é perceptível na Fig. 16. Como resultado, a FSS irá refletir mais energia eletromagnética à medida que μ_{ce} aumenta.

Figura 39 – Coeficiente de transmissão ilustrando o deslocamento da banda de rejeição do modo *off* a partir do ajuste de μ_{ce}.



Fonte: O autor.

Tabela 3 – Largura de banda relativa para as bandas de rejeição produzidas pela FSS operando no modo *on*, para cada configuração de potenciais químicos.

	Potenciais químicos	Banda inferior de rejeição	Banda superior de rejeição
Deslocamento da banda inferior de rejeição no modo *on*	$\mu_{ce} = 0{,}43$ eV, $\mu_{ci} = 0{,}73$ eV	apenas 1,83 THz	–
	$\mu_{ce} = 0{,}55$ eV, $\mu_{ci} = 0{,}65$ eV	16,42 % (1,90 – 2,24 THz)	–
	$\mu_{ce} = 0{,}75$ eV, $\mu_{ci} = 0{,}58$ eV	22,6 % (2,12 – 2,66 THz)	–
	$\mu_{ce} = 1$ eV, $\mu_{ci} = 0{,}55$ eV	25,50 % (2,36 – 3,05 THz)	–
Deslocamento da banda superior de rejeição no modo *on*	$\mu_{ce} = 1$ eV, $\mu_{ci} = 0{,}4$ eV	–	25,55 % (3,79 – 4,90 THz)
	$\mu_{ce} = 1$ eV, $\mu_{ci} = 0{,}6$ eV	–	23,09 % (4,52 – 5,70 THz)
	$\mu_{ce} = 1$ eV, $\mu_{ci} = 0{,}7$ eV	–	22,8 % (4,82 – 6,06 THz)
	$\mu_{ce} = 1$ eV, $\mu_{ci} = 0{,}8$ eV	–	23,04 % (5,07 – 6,39 THz)
	$\mu_{ce} = 1$ eV, $\mu_{ci} = 1$ eV	–	23,30 % (5,5 – 6,95 THz)
Deslocamento de ambas as bandas de rejeição	$\mu_{ce} = 0{,}45$ eV, $\mu_{ci} = 0{,}6$ eV	apenas 1,87 THz	17,8 % (4,20 – 5,02 THz)
	$\mu_{ce} = 0{,}6$ eV, $\mu_{ci} = 0{,}6$ eV	18,1 % (2,36 – 3,05 THz)	19 % (4,38 – 5,3 THz)
	$\mu_{ce} = 0{,}8$ eV, $\mu_{ci} = 0{,}6$ eV	23,93 % (2,17 – 2,76 THz)	20,97 % (4,48 – 5,53 THz)
	$\mu_{ce} = 1$ eV, $\mu_{ci} = 0{,}6$ eV	26,48 % (2,36 – 3,08 THz)	23,04 % (4,52 – 5,7 THz)

Tabela 4 – Largura de banda relativa para as bandas de rejeição produzidas pela FSS operando no modo *off*, para cada configuração de potenciais químicos.

	Configuração de potenciais químicos	Banda de rejeição
Deslocamento da banda de rejeição no modo *off*	$\mu_{ce} = 0{,}3$ eV, $\mu_{ci} = 1$ meV	apenas 1,76 THz
	$\mu_{ce} = 0{,}5$ eV, $\mu_{ci} = 1$ meV	28,7 % (1,91 – 2,55 THz)
	$\mu_{ce} = 0{,}85$ eV, $\mu_{ci} = 1$ meV	39,16 % (2,32 – 3,45 THz)
	$\mu_{ce} = 1$ eV, $\mu_{ci} = 1$ meV	41,41 % (2,47 – 3,76 THz)

Fonte: O autor.

6 Conclusão

Neste trabalho, uma formulação FDTD baseada no método exponencial matriz é implementada. As folhas de grafeno são modeladas considerando apenas a contribuição intrabanda da condutividade do grafeno. Os resultados apresentam boa concordância com os obtidos no *software* comercial HFSS, validando a formulação implementada no método FDTD. A formulação implementada apresenta correções numéricas para caracterizar adequadamente a interdependência física entre J_x e J_y, representada pela natureza tensorial da condutividade elétrica do grafeno. Além disso, uma FSS inteligente é projetada. Ela é formada apenas de elementos de grafeno e é analisada via FDTD e HFSS. A célula unitária do dispositivo contém um anel de grafeno e uma folha de grafeno coplanar à abertura formada pelo anel. Com essa geometria, o dispositivo pode operar nos modos *single-band* ou *dual-band*. Na configuração *single-band*, a estrutura tem uma largura de banda fracionária de $52{,}3$ %, com sua frequência central de banda de rejeição reconfigurável. No modo de operação *dual-band*, a primeira banda de rejeição tem uma largura de banda fracionária de $37{,}9$ % e a segunda, $33{,}3$ %. Além disso, operando em *dual-band*, o dispositivo pode ter a primeira, segunda ou ambas as bandas de rejeição deslocadas, através do ajuste adequado dos potenciais químicos dos elementos de grafeno. Para o deslocamento da banda inferior de rejeição no modo *on*, a faixa de varredura espectral é $0{,}87$ THz ($1{,}84 - 2{,}71$ THz). O deslocamento da banda superior de rejeição mostra uma faixa de varredura espectral de $1{,}89$ THz ($6{,}22 - 4{,}33$ THz). Considerando o deslocamento de ambas as bandas de rejeição, a varredura espectral para banda inferior de rejeição é $0{,}85$ THz ($1{,}87 - 2{,}72$ THz) e para a banda superior de rejeição é $0{,}55$ THz ($4{,}54 - 5{,}09$ THz). Finalmente, para o modo *off*, a faixa de varredura espectral é de $1{,}33$ THz ($1{,}76 - 3{,}09$ THz).

6.1 Propostas para trabalhos futuros

Para trabalhos futuros, são sugeridas as seguintes propostas:

- Propor uma formulação FDTD que considere a contribuição interbanda, para o cálculo da condutividade em elementos de grafeno, presentes na FSS;
- considerar a influência da densidade de fluxo magnético $\vec{B}$ nos elementos de grafeno, para análise de resposta em frequência da FSS inteligente;

- criar novos tipos de geometrias para os elementos de grafeno, presentes nas células unitárias, a fim de aumentar a eficiência da FSS;
- utilizar técnicas de inteligência computacional para aumento de performance da FSS, através da escolha ótima de parâmetros físicos e elétricos dos seus elementos constituintes.

6.2 Publicações geradas

- R. R. Paiva, R. M. S. de Oliveira, M. R. Elias Filho e N. R. N. M. Rodrigues, "Superfícies Seletivas de Frequência Inteligentes Baseadas em Grafeno", *18° SBMO – Simpósio Brasileiro de Micro-ondas e Optoeletrônica e no 13° CBMag – Congresso Brasileiro de Eletromagnetismo* (MOMAG 2018), Santa Rita do Sapucaí - MG, 2018, pp 1-5. Premiado como "Melhor Paper de Magnetismo".
- R. M. S. de Oliveira, R. R. Paiva, N. R. N. M. Rodrigues and M. R. Elias Filho, "Smart Graphene-Based Frequency Selective Surface Designed to Act as Single or Dual Band Device with Reconfigurable Operation Bands", *Journal of Microwaves, Optoelectronics and Electromagnetic Applications* (JMOe).

Referências

[1] L. Lin, L.-S. Wu, W.-Y. Yin, and J.-F. Mao, "Modeling of magnetically biased graphene patch frequency selective surface (FSS)," in *2015 IEEE MTT-S International Microwave Workshop Series on Advanced Materials and Processes for RF and THz Applications (IMWS-AMP)*. IEEE, 2015, pp. 1–3.

[2] A. B. Khanikaev, R. Fleury, S. H. Mousavi, and A. Alu, "Topologically robust sound propagation in an angular-momentum-biased graphene-like resonator lattice," *Nature communications*, vol. 6, p. 8260, 2015.

[3] I. Llatser, C. Kremers, A. Cabellos-Aparicio, J. M. Jornet, E. Alarcón, 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.

[4] I. F. Akyildiz, J. M. Jornet, and C. Han, "Terahertz band: Next frontier for wireless communications," *Physical Communication*, vol. 12, pp. 16–32, 2014.

[5] T. Kürner and S. Priebe, "Towards THz communications-status in research, standardization and regulation," *Journal of Infrared, Millimeter, and Terahertz Waves*, vol. 35, no. 1, pp. 53–62, 2014.

[6] A. K. Geim and K. S. Novoselov, "The rise of graphene," in *Nanoscience and Technology: A Collection of Reviews from Nature Journals*. World Scientific, 2010, pp. 11–19.

[7] R. M. S. de Oliveira, N. R. N. M. Rodrigues, and V. Dmitriev, "FDTD Formulation for Graphene Modeling Based on Piecewise Linear Recursive Convolution and Thin Material Sheets Techniques," *IEEE Antennas Wireless Propag. Lett.*, vol. 14, pp. 767–770, Mar. 2015.

[8] J. Chen, G. Hao, and Q.-H. Liu, "Using the ADI-FDTD method to simulate graphene-based FSS at terahertz frequency," *IEEE Transactions on Electromagnetic Compatibility*, vol. 59, no. 4, pp. 1218–1223, 2017.

[9] S. Narayan, B. Sangeetha, and R. M. Jha, "Frequency Selective Surfaces-Based High Performance Microstrip Antenna," in *Frequency Selective Surfaces based High Performance Microstrip Antenna*. Springer, 2016, pp. 1–40.

[10] B. A. Munk, *Frequency selective surfaces: theory and design*. John Wiley & Sons, 2005.

[11] H. Zhou, S. Qu, B. Lin, J. Wang, H. Ma, Z. Xu, W. Peng, and P. Bai, "Filter-antenna consisting of conical FSS radome and monopole antenna," *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, vol. 60, no. 6, pp. 3040–3045, 2012.

[12] M. Qu, J. Song, L. Yao, S. Li, L. Deng, and Y. Yang, "Design of a Graphene-Based Tunable Frequency Selective Surface and Its Application for Variable Radiation Pattern of a Dipole at Terahertz," *Radio Science*, vol. 53, no. 2, pp. 183–189, 2018.

[13] G. W. Hanson, "Dyadic Green's functions and guided surface waves for a surface conductivity model of graphene," *Journal of Applied Physics*, vol. 103, no. 6, p. 064302, 2008.

[14] 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.

[15] G. Lovat, "Equivalent circuit for electromagnetic interaction and transmission through graphene sheets," *IEEE Transactions on Electromagnetic Compatibility*, vol. 54, no. 1, pp. 101–109, 2012.

[16] P. K. Khoozani, M. Maddahali, M. Shahabadi, and A. Bakhtafrouz, "Analysis of magnetically biased graphene-based periodic structures using a transmission-line formulation," *JOSA B*, vol. 33, no. 12, pp. 2566–2576, 2016.

[17] T. Namiki, "3-D ADI-FDTD method-unconditionally stable time-domain algorithm for solving full vector Maxwell's equations," *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques*, vol. 48, no. 10, pp. 1743–1748, 2000.

[18] A. Taflove and S. C. Hagness, *Computational electrodynamics: the finite-difference time-domain method*. Artech house, 2005.

[19] G. A. Baker, G. A. Baker Jr, G. A. BAKER JR, P. Graves-Morris, and S. S. Baker, *Padé approximants*. Cambridge University Press, 1996, vol. 59.

[20] D. SYSTEMES. CST. [Online]. Available: cst.com/products

[21] Tasolamprou, Anna C and Koulouklidis, Anastasios D and Daskalaki, Christina and Mavidis, Charalampos P and Kenanakis, George and Deligeorgis, George and Viskadourakis, Zacharias and Kuzhir, Polina and Tzortzakis, Stelios and Kafesaki, Maria and others,

"Experimental demonstration of ultrafast THz modulation in a graphene-based thin film absorber through negative photoinduced conductivity," *ACS photonics*, 2019.

[22] V. Dmitriev and C. Nascimento, "Graphene-Based Plasmonic Components for THz Applications: Planar Ring Array Devices," *Handbook of Graphene: Technology and Innovations*, p. 393, 2019.

[23] X. H. Wang, W. Y. Yin, and Z. Chen, "Matrix Exponential FDTD Modeling of Magnetized Graphene Sheet," *IEEE Antennas and Wireless Propagation Letters*, vol. 12, pp. 1129–1132, 2013.

[24] ANSYS. HFSS. [Online]. Available: ansys.com/products/electronics

[25] R. Mittra, C. H. Chan, and T. Cwik, "Techniques for analyzing frequency selective surfaces-a review," *Proceedings of the IEEE*, vol. 76, no. 12, pp. 1593–1615, 1988.

[26] Campos, Antônio Luiz Pereira de Siqueira, *Superfícies seletivas em frequência: análise e projeto*. Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Rio Grande do Norte, 2008.

[27] T.-K. Wu, "Frequency selective surfaces," *Encyclopedia of RF and Microwave Engineering*, 2005.

[28] F. Hopkinson and D. Rittenhouse, "An optical problem, proposed by Mr. Hopkinson, and solved by Mr. Rittenhouse," *Transactions of the American Philosophical Society*, vol. 2, pp. 201–206, 1786.

[29] G. Marconi and C. S. Franklin, "Reflector for use in wireless telegraphy and telephony." Apr. 22 1919, uS Patent 1,301,473.

[30] A. E. Welch, "Microwave heating apparatus and method of heating a food package," Jul. 26 1955, uS Patent 2,714,070.

[31] André Nascimento da Ilva, "Caracterização de FSS com Geometria em Forma de U," Dissertação de Mestrado, Programa de Pós Graduação em Engenharia Elétrica, Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia da Paraíba, Paraíba, 2015.

[32] T. Smith, U. Gothelf, O. S. Kim, and O. Breinbjerg, "An FSS-backed 20/30 GHz circularly polarized reflectarray for a shared aperture L-and Ka-band satellite communication antenna," *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, vol. 62, no. 2, pp. 661–668, 2014.

[33] O. Vidal, G. Verelst, J. Lacan, E. Alberty, J. Radzik, and M. Bousquet, "Next generation high throughput satellite system," in *2012 IEEE First AESS European Conference on Satellite Telecommunications (ESTEL)*. IEEE, 2012, pp. 1–7.

[34] M. C. de Alcântara Neto, "Síntese de Superfícies Seletivas de Frequência para Microondas Utilizando Otimização Multiobjetivo Bioinspirada," Tese de Doutorado, Programa de Pós Graduação em Engenharia Elétrica, Universidade Federal do Pará, Belém, 2015.

[35] J. H. Kim, H. J. Chun, I. P. Hong, Y. J. Kim, and Y. B. Park, "Analysis of FSS radomes based on physical optics method and ray tracing technique," *IEEE Antennas and Wireless Propagation Letters*, vol. 13, pp. 868–871, 2014.

[36] F. Costa and A. Monorchio, "A frequency selective radome with wideband absorbing properties," *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, vol. 60, no. 6, pp. 2740–2747, 2012.

[37] M. N. M. Kehn, M. Nannetti, A. Cucini, S. Maci, and P.-S. Kildal, "Analysis of dispersion in dipole-FSS loaded hard rectangular waveguide," *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, vol. 54, no. 8, pp. 2275–2282, 2006.

[38] S. Maci, M. Caiazzo, A. Cucini, and M. Casaletti, "A pole-zero matching method for EBG surfaces composed of a dipole FSS printed on a grounded dielectric slab," *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, vol. 53, no. 1, pp. 70–81, 2005.

[39] C.-H. Tsao and R. Mittra, "Spectral-domain analysis of frequency selective surfaces comprised of periodic arrays of cross dipoles and Jerusalem crosses," *IEEE Transactions on antennas and propagation*, vol. 32, no. 5, pp. 478–486, 1984.

[40] G. I. Kiani, A. R. Weily, and K. P. Esselle, "Frequency selective surface absorber using resistive cross-dipoles," in *2006 IEEE Antennas and Propagation Society International Symposium*. IEEE, 2006, pp. 4199–4202.

[41] G. I. Kiani, L. G. Olsson, A. Karlsson, K. P. Esselle, and M. Nilsson, "Cross-dipole bandpass frequency selective surface for energy-saving glass used in buildings," *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, vol. 59, no. 2, pp. 520–525, 2011.

[42] M. Hosseini, A. Pirhadi, and M. Hakkak, "A novel AMC with little sensitivity to the angle of incidence using 2-layer Jerusalem cross FSS," *Progress In Electromagnetics Research*, vol. 64, pp. 43–51, 2006.

[43] I. Sohail, Y. Ranga, K. P. Esselle, and S. G. Hay, "A linear to circular polarization converter based on Jerusalem-Cross frequency selective surface," in *2013 7th European Conference on Antennas and Propagation (EuCAP)*. IEEE, 2013, pp. 2141–2143.

[44] L. Musa, P. Au, E. A. Parker, and R. J. Langley, "Sensitivity of tripole and calthrop FSS reflection bands to angle of incidence," *Electronics Letters*, vol. 25, no. 4, pp. 284–285, 1989.

[45] M. Mokhtar and E. A. Parker, "Conjugate gradient computation of the current distribution on a tripole FSS array element," *Electronics Letters*, vol. 26, no. 4, pp. 227–228, 1990.

[46] A. Pirhadi, F. Keshmiri, M. Hakkak, and M. Tayarani, "Analysis and design of dual band high directive EBG resonator antenna using square loop FSS as superstrate layer," *Progress In Electromagnetics Research*, vol. 70, pp. 1–20, 2007.

[47] B. Monacelli, J. B. Pryor, B. A. Munk, D. Kotter, and G. D. Boreman, "Infrared frequency selective surface based on circuit-analog square loop design," *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, vol. 53, no. 2, pp. 745–752, 2005.

[48] A. E. Yilmaz and M. Kuzuoglu, "Design of the Square Loop Frequency Selective Surfaces with Particle Swarm Optimization via the Equivalent Circuit Model." *Radioengineering*, vol. 18, no. 2, 2009.

[49] T.-K. Wu, "Double-square-loop FSS for multiplexing four (S/X/Ku/Ka) bands," in *Antennas and Propagation Society Symposium 1991 Digest*. IEEE, 1991, pp. 1885–1888.

[50] C. K. Lee and R. Langley, "Equivalent-circuit models for frequency-selective surfaces at oblique angles of incidence," in *IEE Proceedings H (Microwaves, Antennas and Propagation)*, vol. 132, no. 6. IET, 1985, pp. 395–399.

[51] E. A. Parker and J. Vardaxoglou, "Plane-wave illumination of concentric-ring frequency-selective surfaces," in *IEE Proceedings H (Microwaves, Antennas and Propagation)*, vol. 132, no. 3. IET, 1985, pp. 176–180.

[52] E. A. Parker, S. Hamdy, and R. J. Langley, "Arrays of concentric rings as frequency selective surfaces," *Electronics Letters*, vol. 17, no. 23, pp. 880–881, 1981.

[53] R. Kastner and R. Mittra, "Iterative analysis of finite-sized planar frequency selective surfaces with rectangular patches or perforations," *IEEE transactions on antennas and propagation*, vol. 35, no. 4, pp. 372–377, 1987.

[54] P. H. d. F. Silva, A. F. Dos Santos, R. M. Cruz, and A. G. D'Assunção, "Dual-band bandstop frequency selective surfaces with gosper prefractal elements," *Microwave and Optical Technology Letters*, vol. 54, no. 3, pp. 771–775, 2012.

[55] W. T. Wang, P. Zhang, S. Gong, B. Lu, J. Ling, and T. T. Wan, "Compact angularly stable frequency selective surface using hexagonal fractal configurations," *Microwave and Optical Technology Letters*, vol. 51, no. 11, pp. 2541–2544, 2009.

[56] S.-W. Lee, G. Zarrillo, and C.-L. Law, "Simple formulas for transmission through periodic metal grids or plates," *IEEE Transactions on antennas and propagation*, vol. 30, no. 5, pp. 904–909, 1982.

[57] G. Zarrillo and K. Aguiar, "Closed-form low frequency solutions for electromagnetic waves through a frequency selective surface," *IEEE transactions on antennas and propagation*, vol. 35, no. 12, pp. 1406–1417, 1987.

[58] R. J. Langley and E. A. Parker, "Equivalent circuit model for arrays of square loops," *Electronics Letters*, vol. 18, no. 7, pp. 294–296, 1982.

[59] ——, "Double-square frequency-selective surfaces and their equivalent circuit," *Electronics Letters*, vol. 19, no. 17, pp. 675–677, 1983.

[60] C. K. Lee and R. Langley, "Equivalent-circuit models for frequency-selective surfaces at oblique angles of incidence," in *IEE Proceedings H (Microwaves, Antennas and Propagation)*, vol. 132, no. 6. IET, 1985, pp. 395–399.

[61] J. Huang, T.-K. Wu, and S.-W. Lee, "Tri-band frequency selective surface with circular ring elements," *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, vol. 42, no. 2, pp. 166–175, 1994.

[62] G. Pelosi, A. Cocchi, and S. Selleri, "Electromagnetic scattering from infinite periodic structures with a localized impurity," *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, vol. 49, no. 5, pp. 697–702, 2001.

[63] D. S. Weile, E. Michielssen, and K. Gallivan, "Reduced-order modeling of multiscreen frequency-selective surfaces using Krylov-based rational interpolation," *IEEE transactions on antennas and propagation*, vol. 49, no. 5, pp. 801–813, 2001.

[64] M. Bozzi, L. Perregrini, J. Weinzierl, and C. Winnewisser, "Efficient analysis of quasi-optical filters by a hybrid MoM/BI-RME method," *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, vol. 49, no. 7, pp. 1054–1064, 2001.

[65] G. Manara, A. Monorchio, and R. Mittra, "Frequency selective surface design based on genetic algorithm," *Electronics Letters*, vol. 35, no. 17, pp. 1400–1401, 1999.

[66] J. A. Bossard, D. H. Werner, T. S. Mayer, and R. P. Drupp, "A novel design methodology for reconfigurable frequency selective surfaces using genetic algorithms," *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, vol. 53, no. 4, pp. 1390–1400, 2005.

[67] R. M. Cruz, P. H. d. F. Silva, and A. G. D'Assuncao, "Synthesis of crossed dipole frequency selective surfaces using genetic algorithms and artificial neural networks," in *2009 International Joint Conference on Neural Networks*. IEEE, 2009, pp. 627–633.

[68] P. Harms, R. Mittra, and W. Ko, "Implementation of the periodic boundary condition in the finite-difference time-domain algorithm for FSS structures," *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, vol. 42, no. 9, pp. 1317–1324, 1994.

[69] H.-S. P. Wong and D. Akinwande, *Carbon nanotube and graphene device physics*. Cambridge University Press, 2011.

[70] P. A. D. Gonçalves and N. M. Peres, *An introduction to graphene plasmonics*. World Scientific, 2016.

[71] A. Hirsch, "The era of carbon allotropes," *Nature materials*, vol. 9, no. 11, p. 868, 2010.

[72] Y. Huang, J. Wu, and K.-C. Hwang, "Thickness of graphene and single-wall carbon nanotubes," *Physical review B*, vol. 74, no. 24, p. 245413, 2006.

[73] J. Gao, H. L. Wang, A. Shreve, and R. Iyer, "Fullerene derivatives induce premature senescence: A new toxicity paradigm or novel biomedical applications," *Toxicology and applied pharmacology*, vol. 244, no. 2, pp. 130–143, 2010.

[74] D. Srivastava, M. Menon, and K. Cho, "Computational nanotechnology with carbon nanotubes and fullerenes," *Computing in Science & Engineering*, vol. 3, no. 4, p. 42, 2001.

[75] K. Zaghib, X. Song, A. Guerfi, R. Rioux, and K. Kinoshita, "Purification process of natural graphite as anode for Li-ion batteries: chemical versus thermal," *Journal of power Sources*, vol. 119, pp. 8–15, 2003.

[76] P. Atkin and M. M. Farid, "Improving the efficiency of photovoltaic cells using PCM infused graphite and aluminium fins," *Solar Energy*, vol. 114, pp. 217–228, 2015.

[77] K. B. Gregory, D. R. Bond, and D. R. Lovley, "Graphite electrodes as electron donors for anaerobic respiration," *Environmental microbiology*, vol. 6, no. 6, pp. 596–604, 2004.

[78] R. H. Baughman, A. A. Zakhidov, and W. A. De Heer, "Carbon nanotubes–the route toward applications," *science*, vol. 297, no. 5582, pp. 787–792, 2002.

[79] L. Ma, A. H. Hart, S. Ozden, R. Vajtai, and P. M. Ajayan, "Spiers Memorial Lecture," *Faraday discussions*, vol. 173, pp. 9–46, 2014.

[80] J. E. Proctor, D. M. Armada, and A. Vijayaraghavan, *An introduction to graphene and carbon nanotubes*. CRC Press, 2017.

[81] A. C. Neto, F. Guinea, N. M. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, "The electronic properties of graphene," *Reviews of modern physics*, vol. 81, no. 1, p. 109, 2009.

[82] J. March, *Advanced organic chemistry: reactions, mechanisms, and structure*. John Wiley & Sons,, 1992.

[83] M. I. Katsnelson, "Graphene: carbon in two dimensions," *Materials today*, vol. 10, no. 1-2, pp. 20–27, 2007.

[84] J. Tuček, P. Błoński, J. Ugolotti, A. K. Swain, T. Enoki, and R. Zbořil, "Emerging chemical strategies for imprinting magnetism in graphene and related 2D materials for spintronic and biomedical applications," *Chemical Society Reviews*, vol. 47, no. 11, pp. 3899–3990, 2018.

[85] C. Kittel, P. McEuen, and P. McEuen, *Introduction to solid state physics*. Wiley New York, 1976, vol. 8.

[86] R. E. Peierls, *Quantum theory of solids*. Clarendon Press, 1996.

[87] Y. Wu, D. B. Farmer, F. Xia, and P. Avouris, "Graphene electronics: Materials, devices, and circuits," *Proceedings of the IEEE*, vol. 101, no. 7, pp. 1620–1637, 2013.

[88] P. Avouris, "Graphene: electronic and photonic properties and devices," *Nano letters*, vol. 10, no. 11, pp. 4285–4294, 2010.

[89] S. Mikhailov, *Physics and Applications of Graphene-Experiments*, 2011.

[90] A. Vakil and N. Engheta, "Transformation optics using graphene," *Science*, vol. 332, no. 6035, pp. 1291–1294, 2011.

[91] A. Y. Nikitin, F. Guinea, F. García-Vidal, and L. Martín-Moreno, "Edge and waveguide terahertz surface plasmon modes in graphene microribbons," *Physical Review B*, vol. 84, no. 16, p. 161407, 2011.

[92] C. A. Balanis, *Advanced engineering electromagnetics*. John Wiley & Sons, 1999.

[93] A. Grigorenko, M. Polini, and K. Novoselov, "Graphene plasmonics," *Nature photonics*, vol. 6, no. 11, p. 749, 2012.

[94] C. L. Kane and E. J. Mele, "Quantum spin Hall effect in graphene," *Physical review letters*, vol. 95, no. 22, p. 226801, 2005.

[95] D. Sounas, H. Skulason, H. Nguyen, A. Guermoune, M. Siaj, T. Szkopek, and C. Caloz, "Faraday rotation in magnetically biased graphene at microwave frequencies," *Applied Physics Letters*, vol. 102, no. 19, p. 191901, 2013.

[96] B. Bukvic and D. Budimir, "Magnetically biased graphene-based switches for microwave applications," *Microwave and Optical Technology Letters*, vol. 57, no. 12, pp. 2956–2958, 2015.

[97] S. Pisana, P. M. Braganca, E. E. Marinero, and B. A. Gurney, "Graphene magnetic field sensors," *IEEE Transactions on Magnetics*, vol. 46, no. 6, pp. 1910–1913, 2010.

[98] A. Dolatabady and N. Granpayeh, "Graphene Based Far-Infrared Junction Circulator," *IEEE Transactions on Nanotechnology*, vol. 18, pp. 200–207, 2019.

[99] K. Yee, "Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell's equations in isotropic media," *IEEE Transactions on antennas and propagation*, vol. 14, no. 3, pp. 302–307, 1966.

[100] R. M. S. 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, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Elétrica, Instituto de Tecnologia, Universidade Federal do Pará, 2008.

[101] R. Courant, K. Friedrichs, and H. Lewy, "Über die partiellen Differenzengleichungen der mathematischen Physik," *Mathematische annalen*, vol. 100, no. 1, pp. 32–74, 1928.

[102] G. Mur, "Absorbing boundary conditions for the finite-difference approximation of the time-domain electromagnetic-field equations," *IEEE transactions on Electromagnetic Compatibility*, no. 4, pp. 377–382, 1981.

[103] J.-P. Berenger, "Perfectly matched layer for the FDTD solution of wave-structure interaction problems," *IEEE Transactions on antennas and propagation*, vol. 44, no. 1, pp. 110–117, 1996.

[104] S. D. Gedney, "An anisotropic perfectly matched layer-absorbing medium for the truncation of FDTD lattices," *IEEE transactions on Antennas and Propagation*, vol. 44, no. 12, pp. 1630–1639, 1996.

[105] J. A. Roden and S. D. Gedney, "Convolution PML (CPML): An efficient FDTD implementation of the CFS–PML for arbitrary media," *Microwave and optical technology letters*, vol. 27, no. 5, pp. 334–339, 2000.

[106] D. F. Kelley and R. J. Luebbers, "Piecewise linear recursive convolution for dispersive media using FDTD," *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, vol. 44, no. 6, pp. 792–797, 1996.

[107] Ž. i. Kancleris, G. Slekas, and A. Matulis, "Modeling of Two-Dimensional Electron Gas Sheet in FDTD Method," *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, vol. 61, no. 2, pp. 994–996, Feb. 2013.

[108] D. Y. Heh and E. L. Tan, "FDTD Modeling for Dispersive Media Using Matrix Exponential Method," *IEEE Microwave and Wireless Components Letters*, vol. 19, no. 2, pp. 53–55, Feb. 2009.

[109] F. Yang, J. Chen, R. Qiang, and A. Elsherbeni, "A simple and efficient FDTD/PBC algorithm for scattering analysis of periodic structures," *Radio Science*, vol. 42, no. 04, pp. 1–9, 2007.