

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
FACULDADE DE ENGENHARIA ELÉTRICA
DEPARTAMENTO DE MICROONDAS E ÓPTICA

**MÉTODO DAS DIFERENÇAS FINITAS NO DOMÍNIO DO TEMPO
(FDTD) APLICADO A GUIAS DIELÉTRICOS CONTROLADOS POR
PLASMA**

Este exemplar corresponde à versão final da tese
defendida por RUBEM GONÇALVES
FARIAS e aprovada pela Comissão

Julgadora em _____.


Orientador

Rubem Gonçalves Farias

Orientador: Prof. Dr. Atílio José Giarola

*Tese apresentada à Faculdade de Engenharia
Elétrica da Universidade Estadual de Campinas
como parte dos requisitos para obtenção do
título de Doutor em Engenharia Elétrica.*

Campinas, 09 de fevereiro de 1996.

*Aos meus filhos Tatiana,
Luciana,
Rubem Jr.,
Alexandre e
à minha netinha Ana Luiza*

Resumo

A formulação para diferenças finitas no domínio do tempo (FDTD), aplicada a plasma magnetizado segundo direção arbitrária, é desenvolvida para aplicação em dispositivos dielétricos em duas (2D-FDTD) e três dimensões (3D-FDTD). A ênfase é dada no processo de cálculo iterativo da convolução entre o campo elétrico e o tensor susceptibilidade elétrica do plasma magnetizado. Também, são propostos diversos tipos de dispositivos para propagação de sinais na banda milimétrica.

O método é aplicado a estruturas controladas por plasma. Este plasma pode ser induzido por um feixe óptico sobre uma película semicondutora, depositada sobre o guia. Neste caso, as características de propagação do guia são controladas por um feixe óptico com energia apropriada. Esse plasma também pode ser esbabelecido em semicondutor por dopagem. Neste tipo de dispositivo, o núcleo do guia é totalmente preenchido com plasma. Nesta opção, a propagação dos campos de RF é controlada por um campo magnetostático.

Alguns dispositivos com guias singelos e acoplados são analisados. Observa-se então a possibilidade de controle efetivo de fase e acoplamento, assim como o controle na faixa de operação de modo único, notadamente nos guias opticamente controlados.

Devido à carência de dados na literatura especializada, são estabelecidos critérios para discretização graduada e rigorismo nos testes de convergências propostos. Diversos tipos de dados são utilizados para essa finalidade. Obtém-se, então, uma espécie de perfil de discretização, o qual é aplicado aos demais dispositivos.

Abstract

A finite-difference in the time domain (FDTD) formulation is developed for plasmas magnetized along an arbitrary direction and applicable to two dimensions (2D-FDTD) and to three dimensions (3D-FDTD) dielectric devices. Emphasis is given to the iterative calculation of the convolution between the electric field vector and the electric susceptibility tensor of the magnetized plasma. Various types of devices are also proposed for the propagation of signals in the millimeter-wave band.

The method is applied to structures controlled by plasma. This plasma may be induced by an optical beam applied to a semiconductor layer deposited on the waveguide. In this case, the propagation characteristic of the waveguide is controlled by an optical beam with appropriate energy. This plasma may also be introduced in the semiconductor by means of doping. For these devices the waveguide core is completely filled with plasma. With this option the propagation of the RF fields is controlled by a static magnetic field.

Some devices with single and coupled waveguides are analyzed. The possibility of an effective control of phase and coupling, as well as the operating bandwidth with a single mode was examined, particularly with optically controlled waveguides.

Due to the lack of data in the specialized literature, gradual discretization criteria and rigorous tests of convergence are proposed. Various types of data are used to accomplish this objective. As a result, a kind of discretization profile is obtained and is applied to the remaining devices.

Agradecimentos

- Ao Prof. Atílio José Giarola, pela orientação precisa e estimulante.
- Aos amigos Leônidas, Ramiro e João Crisóstomo, pelo incentivo e colaboração.
- Ao Departamento de Engenharia Elétrica da UFPA, pela confiança.
- Aos meus pais José e Alda, pelo carinho e apoio de sempre.
- Aos meus irmãos Sílvia, José Geraldo e Álvaro, pela amizade.
- Aos amigos do DMO: Antônio Leal, Segatto, Tetê, Zezé, Luisa, Luciano, Helder.
- Aos professores, colegas e funcionários da FEE/UNICAMP, pelo convívio saudável.
- Aos amigos do CMEE/DEE/UFPA pelo incentivo.
- Aos colegas Castelli, Carlos e Claudio Ribeiro pelo apoio.
- À Marcia (DMO).

Conteúdo

1 - Introdução	
1.1 Introdução	1
1.2 O Método das Diferenças Finitas no Domínio do Tempo (FDTD).....	2
1.3 Objetivos do Trabalho	4
1.4 Organização do Trabalho	7
Referências Bibliográficas	9
2 - Susceptibilidade Elétrica de Magnetoplasma em Semicondutor Devido a Portadores Livres	
2.1 Introdução	
2.2 Tensor Susceptibilidade Elétrica de Magnetoplasma em Semicondutor	12
2.3 Plasma Induzido por Feixe Óptico Incidente sobre Semicondutor não Magnetizado	13
Referências Bibliográficas	19
Referências Bibliográficas	25
3 - Método das Diferenças Finitas no Domínio do Tempo para Guias Dielétricos Contendo Magnetoplasma	
3.1 Introdução	27
3.2 Equações de Maxwell para Campos Normalizados	29
3.3 Discretização Temporal das Equações de Maxwell	31
3.4 Cálculo Iterativo do Vetor Convolução	33
3.5 Discretização Espacial Tridimensional (3D-FDTD)	39
3.6 Diferenças Finitas no Domínio do Tempo Bidimensional (2D-FDTD)	43
3.7 Fontes de Excitação, Graduação de Malha e Estabilidade Numérica	
3.7.1 Fontes de excitação.....	46
3.7.2 Graduação de malha	47
3.7.3 Estabilidade numérica	49
3.8 Paredes Elétrica, Magnética e Absorvente	
3.8.1 Paredes elétrica e magnética	51
3.8.2 Parede absorvente [8].....	53
3.8.3 Apresentação dos resultados	54
Referências Bibliográficas	57

4 - Guias Dielétricos Contendo Plasma Isotrópico Ópticamente Controlado	
4.1 Introdução	59
4.2 Equações de Diferenças Finitas para Guias de Onda Contendo Plasma Fotoinduzido	62
4.3 Guia Contendo Núcleo Dielétrico de Alto Contraste em Relação ao Semicondutor do Plasma (<i>Plasma Host</i>)	
4.3.1 Introdução	65
4.3.2 Graduação da malha do domínio numérico	66
4.3.3 Resultados das simulações	69
4.4 Guia Contendo Núcleo Semicondutor com Índice de Refração de Baixo Contraste	76
4.5 Teste de Convergência	
4.5.1 Introdução	84
4.5.2 Teste de convergência através das características de dispersão ...	86
4.5.3 Teste de convergência através de reposta espectral	86
4.5.4 Teste de convergência usando distribuição espacial de campo	91
4.6 Guias Acoplados	94
Referências Bibliográficas	104
5 - Guias Dielétricos Contendo Plasma Controlado por Campo Magnetostático (Magnetoplasma)	
5.1 Introdução	105
5.2 Equações de Diferenças Finitas para Magnetoplasma	106
5.3 Guia Canal com Núcleo Semicondutor Contendo Magnetoplasma	111
5.4 Guias Canais Acoplados, com Núcleos Constituídos de Magnetoplasma em Semicondutor	122
Referências Bibliográficas	128
6- Conclusões	129
Referências	132
Apêndice A - Algoritmo empregado na implementação da técnica FDTD para análise de guias dielétricos	133

Capítulo 1

Introdução

1.1 Introdução

O crescente interesse no processamento de sinais em taxas muito altas, da ordem de dezenas de GHz, tem despertado o interesse na pesquisa sobre dispositivos na banda milimétrica. Nesta faixa de frequência os guias dielétricos têm melhor desempenho do que os guias de ondas que contêm elementos metálicos em sua constituição, tais como *microstripline*, *finline*, etc.

A possibilidade de controlar as características de propagação do guia com um feixe de luz, por exemplo, é muito conveniente para a implementação de dispositivos com certas características desejáveis, tais como, alta isolamento entre sinal de RF (banda milimétrica) e sinal de controle, largura de banda elevada e boa compatibilidade com elementos de fibras ópticas, entre outras. O controle pode ser feito também com campo magnetostático, havendo neste caso, a possibilidade de obter efeitos não recíprocos nos dispositivos. Em ambos os casos o controle é possível por intermédio da manipulação do plasma induzido em um elemento semiconductor incorporado ao dispositivo. Para analisar dispositivos com complexidade dessa ordem, é necessário utilizar recursos de simulação adequados.

1.2 O Método das Diferenças Finitas no Domínio do Tempo (FDTD)

O método das diferenças finitas no domínio do tempo (FDTD), tem sido uma das técnicas mais disseminadas ultimamente na solução de problemas do eletromagnetismo. Isto deve-se principalmente à simplicidade desse método, quando comparado a outros concorrentes tais como: elementos finitos, variacional, domínio espectral, TLM, etc. Além disso, a disponibilidade de recursos computacionais cada vez mais baratos e potentes, tais como *workstations*, por exemplo, permitem simular elementos com geometria complexa, os quais são de difícil implementação por outros métodos. Embora haja alguma limitação quando se aplica o algoritmo FDTD diretamente às equações de Maxwell, este recurso permite analisar dispositivos bastante complexos. Entretanto, muitas vezes torna-se difícil o cálculo de atenuação de modos propagantes, em estruturas guiadas contendo materiais complexos. Também não é possível obter resultados precisos quando se deseja analisar efeitos relacionados a modos evanescentes. Essas limitações são concernentes a guias de onda complexos, quando a discretização é feita diretamente sobre as equações de Maxwell. Entretanto, o algoritmo FDTD permite obter uma gama expressiva de informações importantes em uma variedade muito grande de aplicações práticas [1], [2].

A técnica de diferenças finitas no domínio do tempo (FDTD) foi introduzida por Yee em 1966 [3]. Inicialmente o método foi aplicado a espalhamento em meios isotrópicos cujo espaço computacional foi discretizado uniformemente em células contendo, cada uma, as seis componentes de campos elétrico, \mathbf{E} , e magnético, \mathbf{H} , entrelaçadas no espaço e no tempo de modo a simular a propagação de uma onda caminhante. Taflove & Brodwin [4], acrescentaram ao método a condição de Courant, a qual estabelece o compromisso entre os parâmetros dos materiais e de discretização espaço-temporal a fim de atender a estabilidade numérica do algoritmo.

A aplicação desse método aos problemas de autovalores, teve como ponto de partida o artigo de Choi & Hoefler [5]. Este é o trabalho básico para análise de ressonância em cavi-

dades e características de dispersão em guias de onda incluindo materiais anisotrópicos.

A versão bidimensional (2D-FDTD), adequada para tratamento de estruturas com uniformidade axial, teve sua primeira versão estabelecida por Brankovic et al. [6], os quais analisaram diversos tipos de guias metálicos e dielétricos com recursos de graduação de malha, para melhorar ainda mais a eficiência do método. A versão compacta bidimensional, a qual é adotada neste trabalho, foi melhor estabelecida por Cangellaris [7]. Neste artigo também foi obtida a condição de estabilidade para 2D-FDTD.

Para simular os limites numéricos em estruturas abertas ou semi-abertas, o recurso mais usado, por causa da simplicidade e eficiência, é o conceito de parede absorvente introduzida por Mur [8]. Uma solução alternativa interessante foi desenvolvida por Wang et al. [9].

A adaptação do método FDTD para aplicação a meios dispersivos foi feita por Luebbers et al. [10], os quais estabeleceram um procedimento eficiente para o cálculo iterativo da convolução entre a intensidade de campo elétrico, \mathbf{E} , e a susceptibilidade elétrica, χ . Neste caso foi considerado um plasma tipo Debye, isto é, plasma com susceptibilidade no domínio da frequência contendo apenas polo simples. O tratamento para o caso de plasma com polos de ordem superior, tipo Lorentz, também foi desenvolvido por Luebbers et al. [11].

A extensão do método FDTD para aplicação em magnetoplasma, denominado *frequency-dependent FDTD*, ou (FD)²TD, foi desenvolvida por Hunsberger et al. [12]. Neste tipo de plasma, a susceptibilidade elétrica adquire natureza tensorial e seus elementos são do tipo Debye ou Lorentz. Outros tipos de formulações e generalizações foram propostos por outros autores, dentro os quais se destacam Gandhi et al. [13] e Hulse & Knoesen [14].

Algumas aplicações importantes do método FDTD em medicina, na forma como é tratado aqui, foram feitas por Sullivan et al. [15], [16], [17].

1.3 Objetivos do Trabalho

As principais contribuições do presente trabalho podem ser resumidas em três itens:

- Extensão do método FDTD, usando os princípios introduzidos por Luebbers *et al.* [11], para aplicação em magnetoplasma, considerando orientação arbitrária do campo magnetostático. Nesta situação, os elementos do tensor susceptibilidade elétrica, $\vec{\chi}(\mathbf{r}, t)$, apresentam polos tipo Debye e Lorentz, simultaneamente, e todos os seus elementos podem ser não nulos. Isto implica em acoplamento entre todas as componentes de campo elétrico (E_x, E_y e E_z).
- Proposta de novos dispositivos, para banda milimétrica, constituídos de dielétrico e semicondutor com plasma. A Fig. 1.1 mostra estruturas nas quais um plasma é induzido e controlado por incidência de luz com energia apropriada. Também é proposto o controle de guias por campo magnetostático, como ilustrado na Fig. 1.2. Neste caso o plasma é estabelecido por dopagem do semicondutor. O grau de dopagem deve ser pequeno a fim de manter a atenuação em níveis aceitáveis.
- Aplicação do método FDTD estendido na simulação dos dispositivos propostos.

A validação do modelo foi feita através de comparações com resultados obtidos através de outro método. Especificamente aplicou-se o método FDTD a uma cavidade de microondas contendo magnetoplasma, a fim de observar o efeito da densidade do plasma e do campo magnetostático sobre a frequência de ressonância [18]. Os resultados apresentaram boa concordância com aqueles obtidos pelo método dos momentos [19]. Também foram feitos diversos testes de convergência no dispositivo de maior complexidade proposto aqui.

Parte dos resultados apresentados neste texto já foram expostos em congressos e publicados em anais [20], [21].

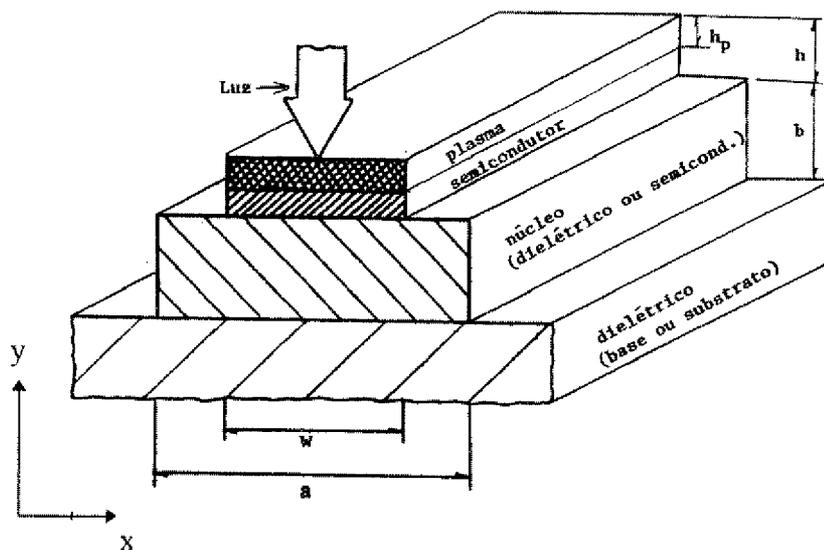


Fig. 1.1a - Guia dielétrico singolo controlado por plasma induzido em uma camada semicondutora

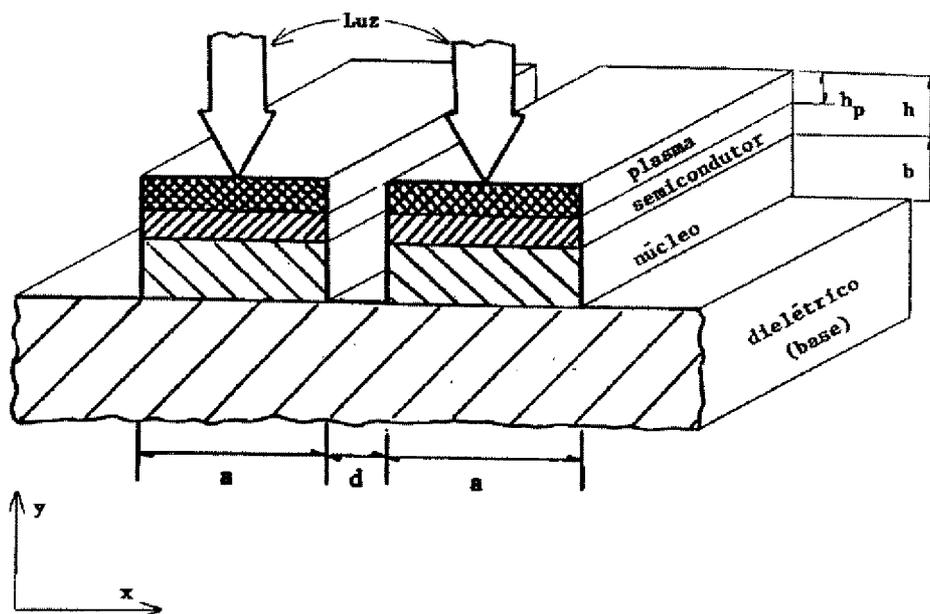


Fig. 1.1b - Guias dielétricos acoplados e opticamente controlados

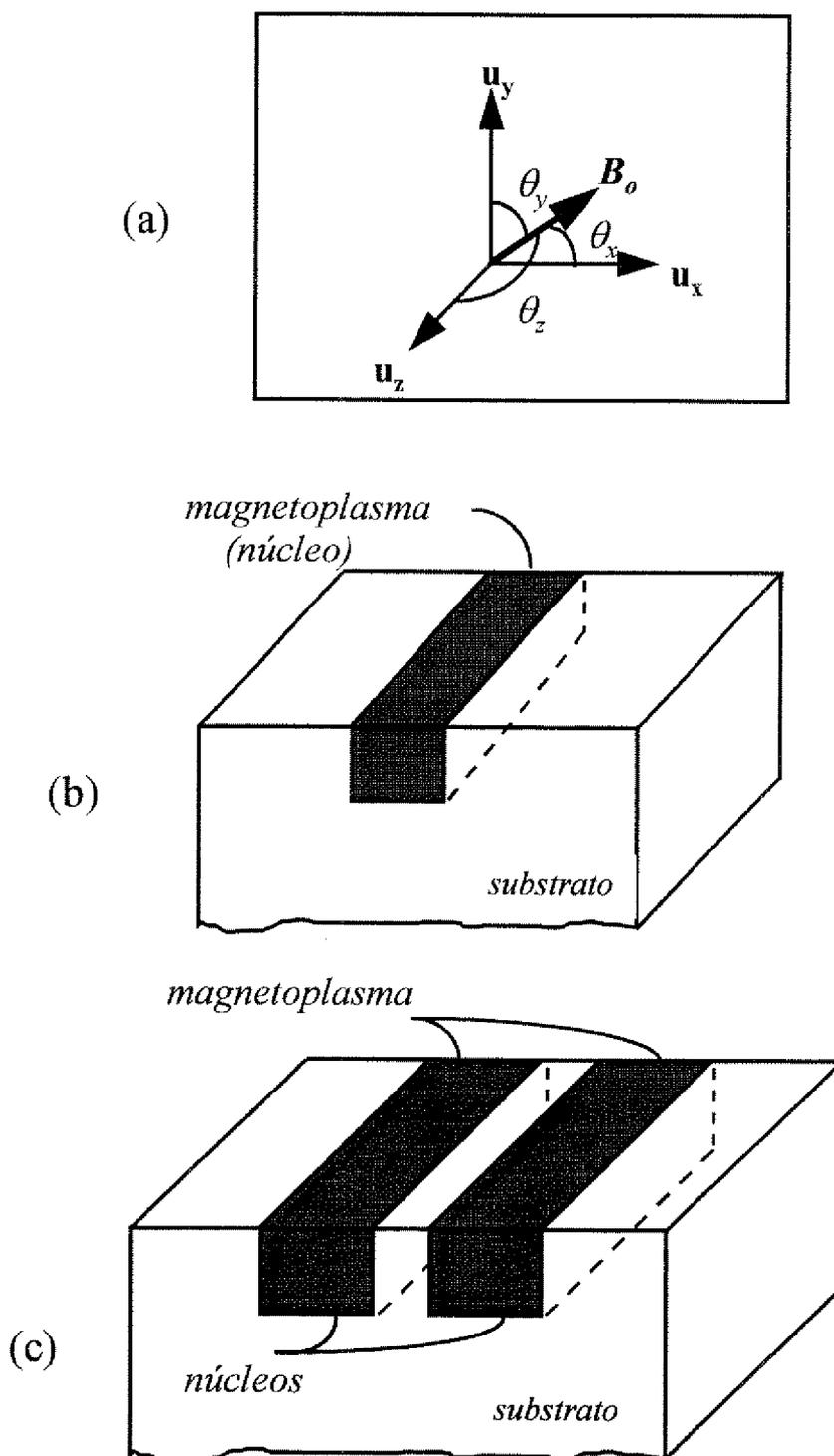


Fig. 1.2 - Guias dielétricos com núcleos contendo magnetoplasma em material semiconductor (*plasma host*) dopado: a) Orientação do campo magnetostático; b) guia singelo; c) guias acoplados.

1.4 Organização do Trabalho

Este texto apresenta uma estrutura que requer a leitura dos capítulos em seqüência, por causa do esforço dispendido no sentido de compactar as equações de diferenças finitas, para dispositivos contendo magnetoplasma. Para tanto, foram introduzidos vetores, tensores e matrizes auxiliares.

No Cap. 2 obtém-se o tensor susceptibilidade elétrica, $\vec{\chi}(\mathbf{r}, t)$, para magnetização do plasma segundo direção arbitrária. Neste procedimento, considera-se o conceito de massa efetiva de portadores em semicondutor e a linearização da equação do movimento dos portadores. Também são apresentadas as propriedades do plasma induzido por incidência de feixe óptico em semicondutor.

Os vetores auxiliares associados aos rotacionais dos campos eletromagnéticos, \mathbf{R}_e e \mathbf{R}_h , assim como o vetor convolução entre o campo elétrico e o tensor susceptibilidade elétrica, \mathbf{C} , são introduzidos no Cap. 3. Esses vetores permitem separar os processos de discretização espacial e temporal. Os vetores auxiliares \mathbf{R}_e e \mathbf{R}_h estão envolvidos com o detalhamento da discretização espacial. Ao vetor convolução, \mathbf{C} , é incorporado o vetor **convolução diferença**, ψ , o qual permite, através de suas componentes básicas, obter iterativamente o efeito da convolução com discretização no tempo. Também permite o cálculo explícito do campo elétrico, na forma de diferenças finitas. O cálculo detalhado de ψ para um elemento genérico do tensor $\vec{\chi}(\mathbf{r}, t)$ é desenvolvido.

Alguns recursos básicos do método FDTD são colocados aqui, a saber: fontes de excitação, graduação de malha do domínio computacional, estabilidade numérica, paredes elétrica, magnética e absorvente e obtenção dos dados para apresentação.

No Cap. 4 são feitas as simulações sobre dispositivos opticamente controlados, com estruturas singela e acoplada. Mostra-se que guias de baixo contraste entre *plasma host* (material onde o plasma é estabelecido) e o núcleo são mais eficientes no controle de fase, pelo feixe óptico, para guias singelo ou acoplados.

O guia de baixo contraste é utilizado como protótipo para os testes de convergência do algoritmo. Esse tipo de guia interage mais fortemente com o plasma e, portanto, a

convergência do método é mais difícil. Dessa análise extrai-se um perfil de discretização de malha para utilização nos demais dispositivos. Os testes de convergência são aplicados sobre diversos dados, tais como: características de dispersão, espectros e distribuição espacial dos campos.

Para concluir, no Cap. 5 são feitas as simulações para guias com núcleos constituídos de magnetoplasma em semicondutor. Para compactar as fórmulas de diferenças finitas são introduzidos o tensor associado aos parâmetros do plasma, \vec{K}^o , e a matriz \vec{V} , a qual está associada ao campo elétrico, à convolução diferença e ao rotacional do campo magnético. Com isto, obtém-se fórmulas de diferenças finitas compactas para cálculo do campo elétrico, de forma explícita.

Referências

- [1] A. Taflove, "Review of the formulation and applications of the finite-difference time-domain method for numerical modeling of electromagnetic wave interactions with arbitrary structures", *Wave Motion, Elsevier Science Publ.*, no. 10, pp. 547-582, 1988.
- [2] K. S. Kunz e R. J. Luebbers, "The Finite Difference Time Domain Method for Electromagnetics", *CRC Press*, 1993.
- [3] K. S. Yee, "Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell equations in isotropic media", *IEEE Trans. Antennas Propag.*, vol. AP-14, pp. 302-307, maio 1966.
- [4] A. Taflove e M. E. Brodwin, "Numerical solution of steady-state electromagnetic scattering problems using the time-dependent Maxwell's equations", *IEEE Trans. Microwave Theory Tech.*, vol. MTT-23, pp. 623-630, agosto 1975.
- [5] D. H. Choi e W. J. R. Hofer, "The finite-difference time-domain method and its application to eigenvalue problems", *IEEE Trans. Microwave Theory Tech.*, vol. MTT-34, pp. 1464-1470, dez. 1986.
- [6] V. J. Brankovic, D. P. Krupezevic e F. Arndt, "An efficient two-dimensional graded mesh finite-difference time-domain algorithm for shielded or open waveguide structures", *IEEE Trans. Microwave Theory and Tech.*, vol. MTT-40, pp. 2272-2277, dez. 1992.

- [7] A. C. Cangellaris, "Numerical stability and numerical dispersion of a compact 2-D/FDTD method used for the dispersion analysis of waveguides", *IEEE Microwave and Guided Wave Lett.*, vol. 3, pp.3-5, jan. 1993.
- [8] G. Mur, "Absorbing boundary conditions for the finite-difference approximation of the time-domain electromagnetic-field equations", *IEEE Trans. Electromag. Compat.*, vol. EMC-23, pp. 377-382, nov. 1981.
- [9] P. Y. Wang, S. Kosaki, M. Ohki e T. Yabe, "Higher order formulation of absorbing boundary conditions for finite-difference time-domain method ", *Electron. Lett.*, vol. 29, pp. 2018-2020, nov. 1993.
- [10] R. J. Luebbers, F. P. Hunsberger, K. S. Kunz, R. B. Standler e M. Schneider, "A frequency-dependent finite-difference time-domain formulation for dispersive materials", *IEEE Trans. Electromag. Compat.*, vol. ECM-32, pp. 222-227, agosto 1990.
- [11] R. J. Luebbers, F. P. Hunsberger e K. S. Kunz, "A frequency-dependent finite-difference time-domain formulation for transient propagation in plasma", *IEEE Trans. Antennas Propagat.*, vol. AP-39, pp. 29-34, Jan. 1991.
- [12] F. P. Hunsberger, R. J. Luebbers e K. S. Kunz, "Finite-difference time-domain analysis of gyrotropic media - I: magnetized plasma ", *IEEE Trans. Antennas Propagat.*, vol. AP-40, pp. 1489-1495, dez. 1992.
- [13] O. P. Gandhi, B.-Q. Gao e J.-Y. Chen, "A frequency-dependent finite-difference time-domain formulation for general dispersive media", *IEEE Trans. Microwave Theory Tech.*, vol. MTT-41, pp. 658-665, abril 1993.
- [14] C. Hulse e A. Knoesen, "Dispersive models for the finite-difference time-domain method: design, analysis, and implementation", *J. Opt. Soc. Am. A*, vol. 11, pp. 1802-1811, jun. 1994.

- [15] D. M. Sullivan, D. T. Borup e O. P. Gandhi, "Use of the finite-difference time-domain method in calculating EM absorption in human tissues", *IEEE Trans. Biomed. Eng.*, vol. 34, pp. 148-157, 1987.
- [16] D. M. Sullivan, O. P. Gandhi e A. Taflove, "Use of finite-difference time domain-method in calculating EM absorption in man models", *IEEE Trans. Biomed. Eng.*, vol. 35, pp. 179-186, 1988.
- [17] D. M. Sullivan, "A frequency-dependent FDTD method for biological applications", *Trans. Microwave Theory Tech.*, vol. MTT-40, pp. 532-539, março 1992.
- [18] M. E. V. Segatto, R. G. Farias e A. J. Giarola, "Electromagnetic wave propagation in waveguide with magnetized plasma", *IEEE Antennas Propagat. Intern. Symp.*, Newport Beach, Ca., pp. 652-655, junho 1995.
- [19] R. F. Harrington, "Field Computation by Moment Methods ", *IEEE Press*, Cap. 9, pp. 184-186, 1993.
- [20] R. G. Farias e A. J. Giarola, "Frequency-dependent FDTD method applied to optically-controlled dielectric waveguide", *IEEE Antennas Propagat. Intern. Symp.*, Newport Beach, Ca., pp. 212-215, junho 1995.
- [21] R. G. Farias e A. J. Giarola, "Frequency-dependent FDTD method applied to optically-controlled coupled-dielectric-waveguide", *SBMO/IEEE MTT-S Intern. Microwave Optoelectr. Conf.*, Rio de Janeiro, pp. 430 - 434, julho 1995.

Capítulo 2

Susceptibilidade Elétrica de Magnetoplasma em Semicondutor Devido a Portadores Livres.

2.1 Introdução.

O plasma do qual trata este trabalho é gerado ou induzido em um semicondutor através de dopagem ou incidência de luz, com energia suficiente para provocar geração de pares elétron-lacuna. Os portadores intrínsecos também serão considerados. O modelo usado para descrever a dinâmica dos portadores em um magnetoplasma é linearizado, considerando que o campo magnético de RF tem magnitude muito pequena quando comparada com o campo magnetostático. A aproximação para descrever o comportamento dos portadores na rede cristalina, se baseia no conceito de massa efetiva, com estrutura de banda de energia versus número de onda, do tipo parabólico. Também considera-se que a taxa de colisão ou espalhamento dos portadores com a rede cristalina independe da energia do portador. Essas aproximações são adequadas para GaAs [1], [2], [3], [4].

2.2 Tensor Susceptibilidade Elétrica de Magnetoplasma em Semicondutor.

A equação de movimento de um portador de carga q e massa efetiva m^* , em um semicondutor sujeito a um campo elétrico, $\mathbf{E}(t)$, e densidade de fluxo magnético, $\mathbf{B}(t)$, é dada por [5], [7]

$$m^* \left[\frac{\partial \mathbf{v}(t)}{\partial t} \right] = q [\mathbf{E}(t) + \mathbf{v}(t) \times \mathbf{B}(t)] - (m^*/\tau) \mathbf{v}(t) . \quad (2.1)$$

onde $\mathbf{v}(t)$ é a velocidade da partícula e τ é o tempo médio de colisão ou espalhamento do portador com a rede cristalina. Nesse modelo foi considerado que a estrutura de banda de energia do semicondutor é parabólica e o tempo de relaxação, τ , independe da energia [6].

Alternativamente, a equação de movimento pode ser escrita em termos do vetor polarização, $\mathbf{P}(t)$, o qual se relaciona à velocidade média, $\mathbf{v}(t)$, de N portadores por unidade de volume, por

$$\frac{\partial \mathbf{P}(t)}{\partial t} = qN \mathbf{v}(t) . \quad (2.2)$$

Multiplicando a equação (2.1) por (qN) , e usando a equação (2.2), obtém-se

$$m^* \left[\frac{\partial^2 \mathbf{P}(t)}{\partial t^2} \right] = q \left[qN \mathbf{E}(t) + \frac{\partial \mathbf{P}(t)}{\partial t} \times \mathbf{B}(t) \right] - (m^* \nu) \frac{\partial \mathbf{P}(t)}{\partial t} , \quad (2.3)$$

onde $\nu = 1/\tau$, é a taxa de colisão dos portadores com a estrutura cristalina.

O plasma é polarizado com campo magnetostático segundo uma direção arbitrária, \mathbf{u} , com intensidade B_o . Considerando campos harmônicos propagando-se no semicondutor, com frequência angular, ω , tem-se:

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{u} B_o + \mathbf{B}(\mathbf{r}) e^{j\omega t} , \quad (2.4)$$

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}(\mathbf{r}) e^{j\omega t} , \quad (2.5)$$

$$\mathbf{P}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{P}(\mathbf{r}) e^{i\omega t} , \quad (2.6)$$

onde \mathbf{r} é o vetor posição, dado por

$$\mathbf{r} = \mathbf{u}_x x + \mathbf{u}_y y + \mathbf{u}_z z , \quad (2.7)$$

sendo \mathbf{u}_x , \mathbf{u}_y e \mathbf{u}_z os versores ao longo dos eixos cartesianos.

Nas fórmulas, a seguir, será omitido o argumento \mathbf{r} dos fasores $\mathbf{B}(\mathbf{r})$, $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ e $\mathbf{P}(\mathbf{r})$.

Substituindo-se as equações (2.4) - (2.6) em (2.3) e desprezando-se o termo em $\mathbf{P} \times \mathbf{B}$ em relação a $\mathbf{P} \times \mathbf{u}B_o$, obtém-se:

$$s(s + \nu)\mathbf{P} - s\omega_c\mathbf{P} \times \mathbf{u} = \epsilon_o\epsilon_s\omega_p^2\mathbf{E} , \quad (2.8)$$

onde $s = j\omega$ e

$$\omega_c = \frac{qB_o}{m^*} , \quad (2.9)$$

$$\omega_p = \sqrt{\frac{q^2 N}{\epsilon_o\epsilon_s m^*}} . \quad (2.10)$$

O parâmetro ϵ_s é a permissividade relativa do semiconductor, na qual estão incorporados os efeitos de polarização das cargas presas ("bound") na estrutura cristalina e outros efeitos não associados às cargas livres. Os parâmetros ω_c e ω_p são as frequências ciclotron e de plasma, respectivamente, dadas em rad/s. Estes parâmetros são muito importantes e podem ser controlados basicamente através do campo magnético estático, $\mathbf{u}B_o$, e pela densidade de portadores, N , respectivamente. Também, está implícito que os parâmetros ν , ϵ_s e ω_p dependem de \mathbf{r} .

O parâmetro ϵ_s algumas vezes é denominado, neste trabalho, de *constante dielétrica estática*, embora esse valor seja para a faixa da banda milimétrica. O termo *constante dielétrica estática* é para diferenciar esse termo da parcela dinâmica provocada pelo plasma. Quando o plasma é gerado por feixe óptico, ao mesmo tempo que interage com campos de RF, o semiconductor fica sujeito a processos ocorrendo simultaneamente nas faixas do infravermelho e milimétrica. No infravermelho a constante dielétrica tem outro valor, o qual é designado de ϵ_∞ [6].

A relação entre o vetor polarização, \mathbf{P} , e a intensidade de campo elétrico, \mathbf{E} , é

$$\mathbf{P}(s) = \epsilon_o \overleftrightarrow{\chi}(s) \mathbf{E}(s) , \quad (2.11)$$

onde $\vec{\chi}(s)$ é o tensor susceptibilidade elétrica associada aos portadores livres no domínio da frequência. Aqui foi colocado explicitamente o argumento s , para enfatizar a natureza dispersiva do tensor susceptibilidade elétrica.

Calculando-se \mathbf{P} , da equação (2.8), e comparando-se o resultado com a equação (2.11), obtém-se o tensor susceptibilidade, cuja forma matricial é

$$\vec{\chi}(s) = \begin{pmatrix} \chi_{xx}(s) & \chi_{xy}(s) & \chi_{xz}(s) \\ \chi_{yx}(s) & \chi_{yy}(s) & \chi_{yz}(s) \\ \chi_{zx}(s) & \chi_{zy}(s) & \chi_{zz}(s) \end{pmatrix}, \quad (2.12)$$

onde

$$\chi_{xx}(s) = +(\epsilon_s \omega_p^2) \frac{(s + \nu)^2 + \omega_{c_x}^2}{s(s + \nu)[(s + \nu)^2 + \omega_c^2]}, \quad (2.13)$$

$$\chi_{xy}(s) = -(\epsilon_s \omega_p^2) \frac{\omega_{c_x}(s + \nu) - \omega_{c_x} \omega_{c_y}}{s(s + \nu)[(s + \nu)^2 + \omega_c^2]}, \quad (2.14)$$

$$\chi_{xz}(s) = +(\epsilon_s \omega_p^2) \frac{\omega_{c_y}(s + \nu) + \omega_{c_x} \omega_{c_z}}{s(s + \nu)[(s + \nu)^2 + \omega_c^2]}, \quad (2.15)$$

$$\chi_{yx}(s) = +(\epsilon_s \omega_p^2) \frac{\omega_{c_x}(s + \nu) + \omega_{c_x} \omega_{c_y}}{s(s + \nu)[(s + \nu)^2 + \omega_c^2]}, \quad (2.16)$$

$$\chi_{yy}(s) = +(\epsilon_s \omega_p^2) \frac{(s + \nu)^2 + \omega_{c_y}^2}{s(s + \nu)[(s + \nu)^2 + \omega_c^2]}, \quad (2.17)$$

$$\chi_{yz}(s) = -(\epsilon_s \omega_p^2) \frac{\omega_{c_x}(s + \nu) - \omega_{c_y} \omega_{c_z}}{s(s + \nu)[(s + \nu)^2 + \omega_c^2]}, \quad (2.18)$$

$$\chi_{zx}(s) = -(\epsilon_s \omega_p^2) \frac{\omega_{c_y}(s + \nu) - \omega_{c_x} \omega_{c_z}}{s(s + \nu)[(s + \nu)^2 + \omega_c^2]}, \quad (2.19)$$

$$\chi_{zy}(s) = +(\epsilon_s \omega_p^2) \frac{\omega_{c_x}(s + \nu) + \omega_{c_y} \omega_{c_z}}{s(s + \nu)[(s + \nu)^2 + \omega_c^2]}, \quad (2.20)$$

$$\chi_{zz}(s) = +(\epsilon_s \omega_p^2) \frac{(s + \nu)^2 + \omega_{c_z}^2}{s(s + \nu)[(s + \nu)^2 + \omega_c^2]}, \quad (2.21)$$

onde ω_{c_x} , ω_{c_y} e ω_{c_z} são as componentes do vetor frequência ciclotron, ω_c , na direção dos eixos

x, y e z, respectivamente. A versão vetorial da frequência ciclotron, dada pela equação (2.9), é

$$\boldsymbol{\omega}_c = \omega_c \mathbf{u} = \left(\frac{qB_0}{m^*} \right) \mathbf{u} . \quad (2.22)$$

Expressando \mathbf{u} em termos de seus cossenos diretores:

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}_x \cos \theta_x + \mathbf{u}_y \cos \theta_y + \mathbf{u}_z \cos \theta_z ,$$

onde θ_x , θ_y e θ_z são os ângulos que o campo magnetostático forma com os eixos cartesianos, x, y e z, respectivamente. Tem-se então

$$\omega_{c_j} = \omega_c \cos \theta_j |_{j=x,y,z} . \quad (2.23)$$

Os elementos da diagonal principal de $\vec{\chi}(s)$, dados pelas equações (2.13), (2.17) e (2.21), têm a forma

$$\chi_{jj}(s) = \frac{s^2 + (2\nu)s + (\nu^2 + \omega_{c_j}^2)}{s(s + \nu) [(s + \nu)^2 + \omega_c^2]} \quad (2.24)$$

cuja transformada inversa de Fourier é dada por

$$\chi_{jj}(t) = \chi_{s_{jj}} \left\{ 1 + K_{1_{jj}} e^{-\nu t} + \left[K_{2_{jj}} \cos(\omega_c t) + K_{3_{jj}} \text{sen}(\omega_c t) \right] e^{-\nu t} \right\} U(t) , \quad (2.25)$$

onde

$$\chi_{s_{jj}} = \left(\epsilon_s \omega_p^2 \right) \frac{\nu^2 + \omega_{c_j}^2}{\nu (\nu^2 + \omega_c^2)} , \quad (2.26)$$

$$K_{1_{jj}} = - \left(\frac{\omega_{c_j}^2}{\omega_c^2} \right) \frac{\nu^2 + \omega_c^2}{\nu^2 + \omega_{c_j}^2} , \quad (2.27)$$

$$K_{2_{jj}} = - \left(\frac{\nu^2}{\omega_c^2} \right) \left[\frac{\omega_c^2 - \omega_{c_j}^2}{\nu^2 + \omega_{c_j}^2} \right] , \quad (2.28)$$

$$K_{3_{jj}} = \left(\frac{\nu}{\omega_c} \right) \left[\frac{\omega_c^2 - \omega_{c_j}^2}{\nu^2 + \omega_{c_j}^2} \right] , \quad (2.29)$$

sendo $U(t)$ a função degrau unitário.

Para os elementos do tensor susceptibilidade, fora da diagonal principal, $\chi_{ij}(s)_{i \neq j}$, tem-se

$$\chi_{ij}(s)_{i \neq j} = \frac{sa_{ij} + b_{ij}}{s(s + \nu) [(s + \nu)^2 + \omega_c^2]} , \quad (2.30)$$

onde os parâmetros a_{ij} e b_{ij} são dados na seguinte tabela:

$ij \big _{i \neq j}$	a_{ij}	b_{ij}
xy	$-\omega_{c_z}$	$\omega_{c_x}\omega_{c_y} - \nu\omega_{c_z}$
yz	$-\omega_{c_x}$	$\omega_{c_y}\omega_{c_z} - \nu\omega_{c_x}$
zx	$-\omega_{c_y}$	$\omega_{c_z}\omega_{c_x} - \nu\omega_{c_y}$
yx	$+\omega_{c_z}$	$\omega_{c_x}\omega_{c_y} + \nu\omega_{c_z}$
zy	$+\omega_{c_x}$	$\omega_{c_y}\omega_{c_z} + \nu\omega_{c_x}$
xz	$+\omega_{c_y}$	$\omega_{c_z}\omega_{c_x} + \nu\omega_{c_y}$

A transformada inversa de Fourier da equação (2.30) é

$$\chi_{ij}(t)_{i \neq j} = \chi_{s_{ij}} \left\{ 1 + K_{1_{ij}} e^{-\nu t} + \left[K_{2_{ij}} \cos(\omega_c t) + K_{3_{ij}} \text{sen}(\omega_c t) \right] e^{-\nu t} \right\} U(t) , \quad (2.31)$$

onde

$$\chi_{s_{ij}} = (\epsilon_s \omega_p^2) \frac{b_{ij}}{\nu(\nu^2 + \omega_c^2)} , \quad (2.32)$$

$$K_{1_{ij}} = \frac{(\nu^2 + \omega_c^2)}{\omega_c^2} \left(\nu \frac{a_{ij}}{b_{ij}} - 1 \right) , \quad (2.33)$$

$$K_{2_{ij}} = \frac{\nu^2}{\omega_c^2} \left[1 - \frac{(\nu^2 + \omega_c^2)}{\nu} \left(\frac{a_{ij}}{b_{ij}} \right) \right] , \quad (2.34)$$

$$K_{3_{ij}} = -\frac{\nu}{\omega_c} . \quad (2.35)$$

As equações (2.25)-(2.35) permitem obter o **tensor susceptibilidade no domínio do tempo** para um único tipo de portador, com campo magnetostático em uma direção arbitrária, **u**.

Se vários tipos de portadores estão envolvidos no plasma, tais como, elétrons fotoinduzidos,

lacunas fotoinduzidas, elétrons devido a dopagem, etc., o tensor susceptibilidade total é [7]

$$\vec{\chi}(t) = \sum_{k=1}^{N_k} \vec{\chi}_k(t) , \quad (2.36)$$

onde N_k é o número de portadores envolvidos no processo. Este é um caso muito complexo e exige uma quantidade formidável de processamento quando implementado através da técnica FDTD.

Neste trabalho serão considerados casos em que vários portadores são envolvidos, mas sem a presença do campo magnetostático. Ou então, em situações em que o campo magnetostático está presente, porém, apenas o efeito de um tipo de portador é relevante para a dispersão da susceptibilidade elétrica.

Um exemplo que se enquadra no primeiro caso, é a ocorrência de plasma induzido por feixe de luz, com energia adequada, incidindo sobre uma camada semicondutora. O segundo caso ocorre em semicondutor dopado. Por exemplo, em material do tipo n, apenas o efeito dinâmico dos elétrons é relevante para a dispersão da susceptibilidade elétrica.

A relação entre o vetor densidade de fluxo elétrico, $\mathbf{D}(t)$, e a intensidade de campo elétrico, $\mathbf{E}(t)$, é

$$\mathbf{D}(t) = \vec{\epsilon}(t) \otimes \mathbf{E}(t) , \quad (2.37)$$

onde \otimes é o operador convolução e o tensor permissividade elétrica, $\vec{\epsilon}(t)$, se relaciona ao tensor susceptibilidade, $\vec{\chi}(t)$, por

$$\vec{\epsilon}(t) = \epsilon_o \left[\vec{I} \delta(t) + \vec{\chi}(t) \right] , \quad (2.38)$$

onde \vec{I} é o tensor unitário e $\delta(t)$ é o delta de Dirac.

Substituindo a equação (2.38) em (2.37), resulta a relação constitutiva para o magnetoplasma em termos do tensor susceptibilidade, onde a variação espacial é apresentada explicitamente

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}, t) = \epsilon_o \left[\epsilon_s(\mathbf{r}) \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) + \vec{\chi}(\mathbf{r}, t) \otimes \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \right] . \quad (2.39)$$

2.3 Plasma Induzido por Feixe Óptico Incidente sobre Semicondutor não Magnetizado

A incidência de luz sobre um semicondutor, pode induzir um plasma na região iluminada. Para que isto aconteça, é necessário que a energia do feixe óptico incidente seja maior que o "gap" de energia proibida do material, \mathcal{E}_g , isto é,

$$hf_{opt} > \mathcal{E}_g$$

onde h é a constante de Planck e f_{opt} é a frequência da portadora óptica do feixe incidente. Se essa condição é satisfeita, então cinco tipos de portadores contribuem para o tensor susceptibilidade elétrica, $\vec{\chi}(\mathbf{r}, t)$, a saber:

- k Tipo de portador k
- 1 lacunas intrínsecas
- 2 elétrons intrínsecos
- 3 elétrons fotoinduzidos
- 4 lacunas fotogeradas tipo "light "
- 5 lacunas fotogeradas tipo "heavy "

Para o caso particular de plasma não magnetizado a equação do movimento para o portador k reduz-se a

$$s(s + \nu_k) \mathbf{P}_k = \epsilon_0 \epsilon_s \omega_{pk}^2 \mathbf{E} \quad (2.40)$$

Tem-se, diretamente desta equação, que a susceptibilidade é um escalar dado por

$$\chi_k(s) = \chi_{sk} \frac{1}{s(s + \nu_k)} \quad (2.41)$$

com

$$\chi_{sk} = \epsilon_s \omega_{pk}^2$$

e

$$\omega_{pk} = \sqrt{\frac{q_k^2 N_k}{\epsilon_0 \epsilon_s m_k^*}} . \quad (2.42)$$

No domínio do tempo a susceptibilidade é simplesmente

$$\chi_k(t) = \chi_{sk} \left(1 - e^{-\nu_k t}\right) U(t) . \quad (2.43)$$

Para o caso de haver N_k portadores contribuindo para o plasma fotoinduzido, a susceptibilidade resultante é a somatória das susceptibilidades devidas a cada portador [7] . Tem-se, então

$$\chi(t) = \sum_{k=1}^{N_k} \chi_{sk} \left(1 - e^{-\nu_k t}\right) U(t) . \quad (2.44)$$

Ao penetrar no semicondutor, a potência do feixe óptico é absorvida pelo material e diminui exponencialmente com a distância, de maneira semelhante ao efeito pelicular (*skin depth*), o qual se observa em condutores na faixa de microondas. Para uma profundidade z , a potência óptica absorvida, $P_{opt}(z)$, é dada por

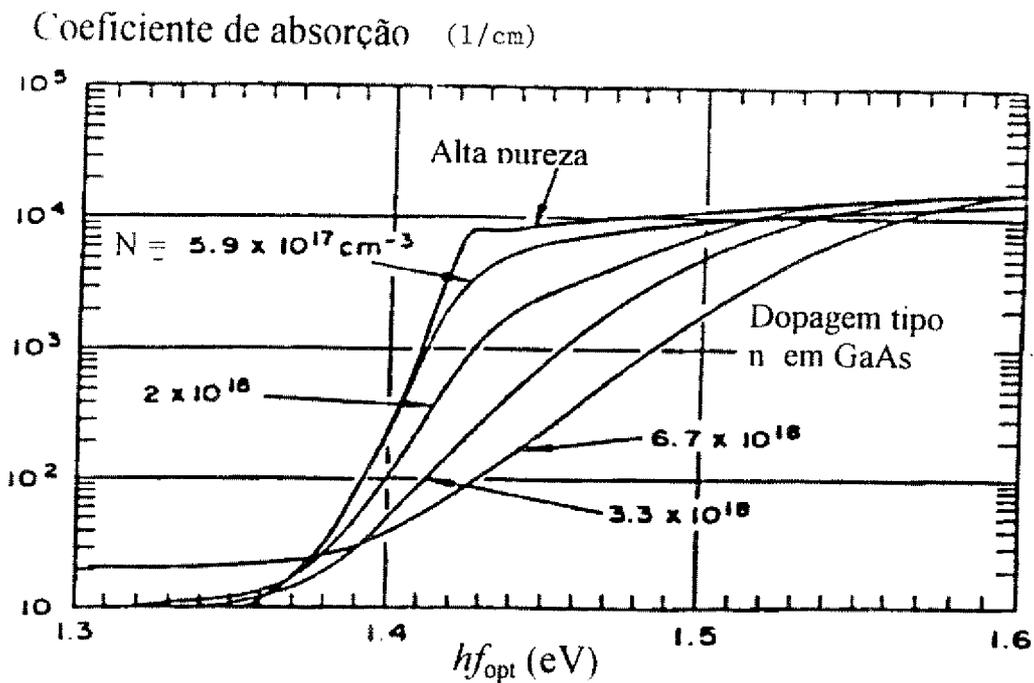
$$P_{opt}(z) = P_{opt_0} (1 - R_s) (1 - e^{-\alpha_s z}) \quad (2.45)$$

onde P_{opt_0} é a potência óptica incidente, R_s é a reflectância na interface ar-semicondutor e α_s é o coeficiente de absorção do semicondutor.

Neste trabalho será usado o conceito de espessura efetiva da camada de plasma, h_p , para a qual a potência óptica cai a um valor de $1/e$ do seu valor na superfície. Da equação acima, tem-se

$$h_p = \frac{1}{\alpha_s} .$$

A Fig.2.1(a) mostra o comportamento do coeficiente de absorção, α_s (cm^{-1}), para GaAs tipo n e intrínseco (alto grau de pureza) em função da energia do feixe óptico incidente, e para diversos graus de dopagem [1]. O nível de dopagem capaz de provocar perdas aceitáveis em guia canal com núcleo feito de magnetoplasma é muito pequeno, da ordem de $10^{12} cm^{-3}$. Para plasma não magnetizado, o nível de dopagem é menor ainda, tal que a curva de alta pureza é considerada para dimensionamento da espessura da camada de plasma fotoinduzido. Isto se



(a)

Coeficiente de absorção (1/cm)

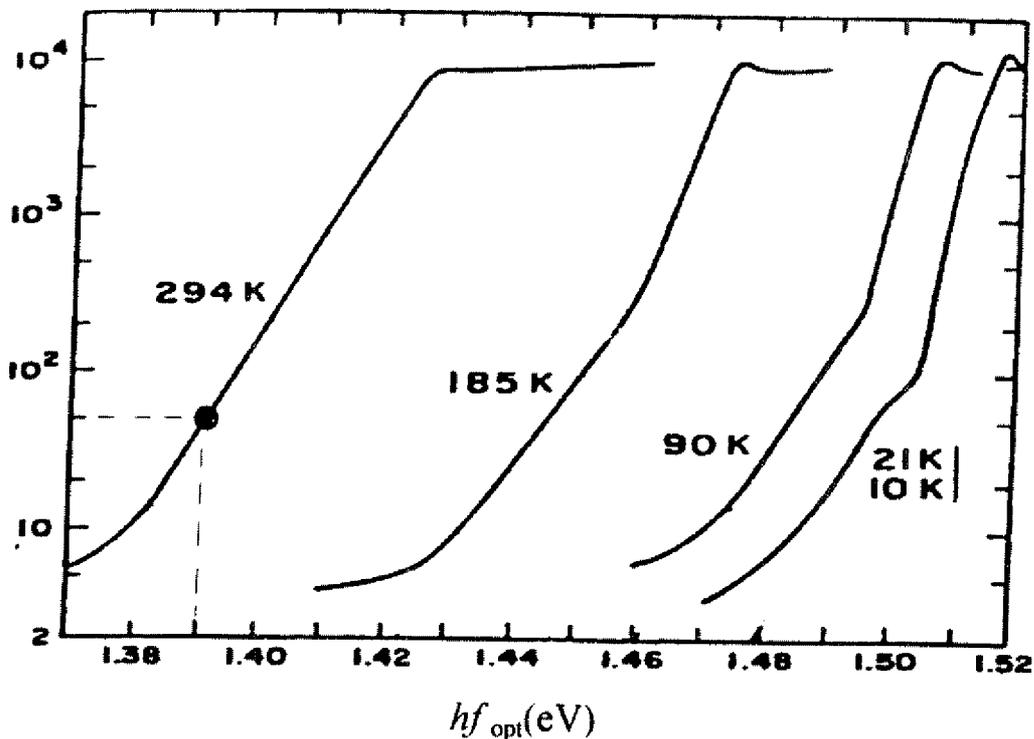


Fig. 2.1 - Coeficiente de absorção versus energia do feixe óptico, em GaAs: a) Efeito de dopagem ou impureza; b) efeito da temperatura [1].

justifica, também, pela necessidade de se ter um coeficiente de absorção relativamente pequeno de modo a provocar uma espessura de plasma suficientemente grande.

A Fig 2.1(b) mostra o efeito da temperatura sobre a curva $\alpha_s \times hf_{opt}$, para GaAs com alto grau de pureza (ou intrínseco), para três temperaturas diferentes [1]. Também é destacado um ponto, na curva de temperatura igual a 294 K, para o qual $\alpha_s = 50 \text{ cm}^{-1}$ e $hf_{opt} = 1,39 \text{ eV}$. Isto corresponde a uma espessura efetiva de plasma $h_p = 200 \text{ }\mu\text{m}$. Esses parâmetros são importantes para a simulação de guias com plasma fotoinduzido.

A relação entre a densidade do plasma fotoinduzido, N , e a radiância do feixe óptico incidente, \mathcal{S} , é dada por [8]:

$$\mathcal{S} = \frac{P_{opto}}{A} \simeq \frac{(hf_{opt}) h_p N}{(\tau_e + \tau_p) (1 - R_s)} ,$$

onde A é a área iluminada, τ_e e τ_p são os tempos de vida de elétrons e lacunas, respectivamente. Esta relação é válida para alto nível de injeção, tal que $N \simeq N_p \gg N_{po}$ ou N_o , onde N_p é a densidade de lacunas fotogeradas, N_{po} e N_o são as densidades de portadores intrínsecos. Para GaAs($T = 300\text{K}$) a equação acima aplica-se para $N \geq 10^{15} \text{ cm}^{-3}$. Os parâmetros para esse material são: $R_s = 0,38$, $\tau_e \simeq 0,338 \text{ ps}$, $\tau_p \simeq 0,154 \text{ ps}$. Escolhendo $hf_{opt} = 1,39 \text{ eV}$, tem-se $h_p = 200 \text{ }\mu\text{m}$. Usando esses valores, resulta

$$\mathcal{S}_{mW/cm^2} \simeq 1,33 \times 10^{-16} N_{cm^{-3}}$$

Os valores de interesse neste trabalho variam na faixa $N = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ ($\mathcal{S} \simeq 0,133 \text{ mW/cm}^2$) até $N = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ ($\mathcal{S} \simeq 13,3 \text{ mW/cm}^2$).

O efeito da girofrequência sobre as características de propagação em guias dielétricos, tem alguma semelhança com aquele observado em cavidade metálica [9], [10]. A Fig. 2.2 mostra a variação percentual da frequência de ressonância em função da frequência ciclotron normalizada, para a cavidade cheia de plasma magnetizado, onde ω_o é a frequência de ressonância da cavidade vazia. As dimensões da cavidade, segundo os eixos x, y e z, são 9 mm , 4 mm e 12 mm , respectivamente. A curva contínua é o resultado obtido pelos métodos dos momentos [9], enquanto que os pequenos quadrados resultaram da simulação pelo método FDTD [10]. Esses resultados foram obtidos para $\omega_p/\omega_o = \nu/\omega_o = 0,1$.

A Fig. 2.3 mostra o efeito da intensidade do plasma, através da frequência angular de

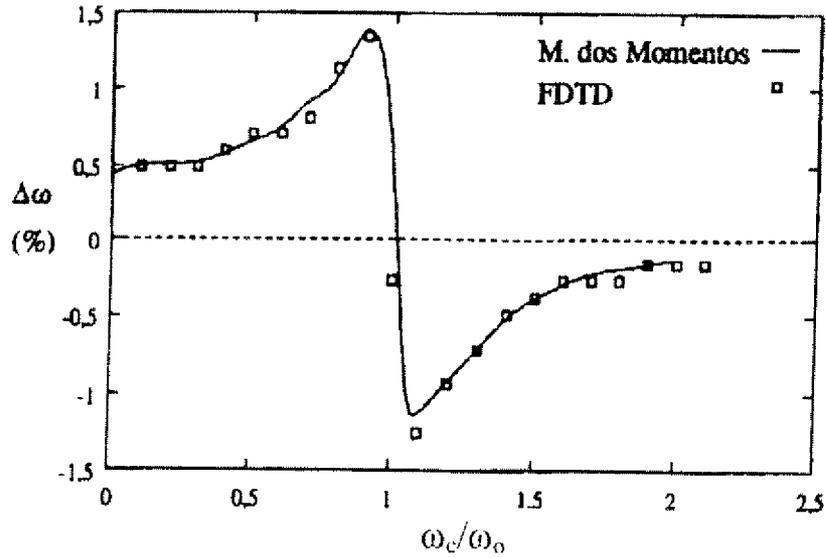


Fig. 2.2 - Variação da frequência de ressonância em função da frequência cícotron relativa, para modo quase- TE_{011} .

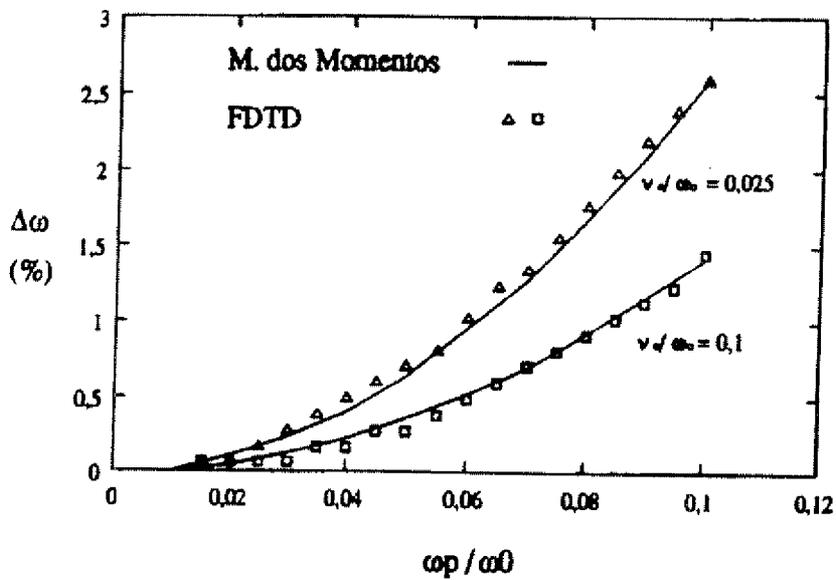


Fig. 2.3 - Variação da frequência de ressonância em termos da frequência de plasma relativa, para o modo quase- TE_{011} .

plasma normalizada, ω_p/ω_o , sobre a variação da frequência de ressonância da cavidade, para dois valores da taxa de colisão normalizada, ν/ω_o : 0,025 e 0,2. A frequência ciclotron é igual a $0,9\omega_o$. Aqui, novamente, a curva contínua é o resultado obtido pelo método dos momentos. Observe a boa concordância entre os dois métodos.

Referências

- [1] J. S. Blakemore, "Semiconducting and other major properties of gallium arsenide", *J. Appl. Phys.*, vol. 53, pp. R123-R181, out. 1982.
- [2] C. M. Krowne, A. A. Mostafa e K. Z. Zaki, "Slot and microstrip guiding structures using magnetoplasmons for nonreciprocal millimeter propagation", *IEEE Trans. Microwave Theory Tech.*, vol. MTT-36, pp. 1850-1860, dez. 1988.
- [3] D. M. Bolle e S. H. Talisa, "Fundamental considerations in millimeter and near-millimeter component design employing magnetoplasmons", *IEEE Trans. Microwave Theory and Tech.*, vol. MTT-29, pp. 916-923, set 1981.
- [4] S. H. Talisa e D. M. Bolle, "Performance predictions and differential phase shifters near-millimeter wave range", *IEEE Trans. Microwave Theory and Tech.*, vol. MTT-29, pp.1338-1343, dez. 1981.
- [5] C. W. Krowne, "Waveguiding structures employing the solid-state magnetoplasma for microwave and millimeter propagation", *IEE Proceedings - H*, vol. 140, pp. 147-164, junho 1993.
- [6] C. R. Pidgeon, "Free carrier optical properties of semiconductors", em M. Balkanski e T. S. Moss (eds.), "Handbook on Semiconductors", *North Holland Publishing Co.*, vol. 2, pp. 223-328, 1980.
- [7] D. G. Swanson, "Plasma Waves", *Academic Press*, 1989.

- [8] Y. Shen, K. Nickerson e J. Litva, "Frequency-dependent FDTD modeling of optically controlled dielectric resonators", *IEEE Trans. Microwave Theory Tech.*, vol MTT-41, pp. 1005-1010, junho/julho 1993.
- [9] R. F. Harrington, "Field Computation by Moment Methods", *IEEE Press*, Cap. 9, pp. 184-186, 1993.
- [10] M. E. V. Segatto, R. G. Farias e A. J. Giarola, "Electromagnetic wave propagation in waveguides with magnetized plasma", *IEEE Antennas Propag. Intern. Symp.*, Newport Beach, Ca., pp.652-655, junho 1995.

Capítulo 3

Método das Diferenças Finitas no Domínio do Tempo para Guias Dielétricos Contendo Magnetoplasma.

3.1 Introdução

O método das diferenças finitas no domínio do tempo (FDTD), permite analisar o comportamento eletromagnético de dispositivos complexos, diretamente das equações de Maxwell. O dispositivo pode conter materiais não-homogêneos, dispersivos e anisotrópicos.

Esse método foi introduzido por Yee [1] em 1966, para meios isotrópicos e não-dispersivos. A adaptação do método para aplicação a meios dispersivos foi feita por Luebbers *et al.* [2], os quais estabeleceram um procedimento eficiente para o cálculo iterativo da convolução entre a intensidade de campo elétrico e a susceptibilidade elétrica de um plasma tipo Debye, isto é, de um plasma com a função susceptibilidade no domínio da frequência apresentando apenas um polo. Hunsberger *et al.* [3] expandiram o tratamento ao caso de plasma anisotrópico, no qual a matriz que representa o tensor susceptibilidade

elétrica é esparsa e apresenta elementos cujos espectros possuem um polo simples (tipo Debye) ou polos múltiplos (tipo Lorentz).

Neste capítulo será feita uma generalização do método FDTD para o caso de plasma com campo magnetostático polarizador orientado segundo direção arbitrária. Nesta situação a matriz susceptibilidade elétrica é completamente cheia e seus elementos têm espectros com polos múltiplos, combinando tipos Debye e Lorentz, simultaneamente.

Inicialmente, na Seção 3.2, as equações de Maxwell são apresentadas em termos dos campos normalizados, com o tensor susceptibilidade colocado explicitamente. Na Seção 3.3 é feita a discretização temporal das equações rotacionais de Maxwell normalizadas. Aqui são introduzidos os campos auxiliares associados aos rotacionais dos campos elétrico e magnético, \mathbf{R}_e e \mathbf{R}_h , respectivamente. Também é introduzido o vetor convolução entre o campo elétrico e a susceptibilidade elétrica, \mathbf{C} . O objetivo deste procedimento é compactar, generalizar e facilitar a obtenção das equações de diferenças finitas, em ambos os domínios: temporal e espacial. O cálculo recursivo da convolução discretizada no domínio do tempo, e para um elemento genérico do tensor susceptibilidade elétrica, é feito na Seção 3.4.

A discretização espacial tridimensional (3D-FDTD) dos campos rotacionais \mathbf{R}_h e \mathbf{R}_e é feita na Seção 3.5. A versão bidimensional (2D-FDTD), das equações de diferenças finitas, é obtida na Seção 3.6. Nas Seções seguintes são apresentados os conceitos básicos importantes para a implementação do método FDTD bidimensional. Na Seção 3.7 são apresentados os detalhes referentes a: fontes de excitação, graduação de malha e estabilidade numérica. Para concluir este capítulo, a Seção 3.8 trata dos conceitos de paredes elétrica, magnética, absorvente e limites numéricos. Também é descrito como os resultados da simulação são apresentados.

Os testes de convergência e detalhes complementares da discretização espacial do domínio computacional são tratados no Capítulo 4, através de simulações feitas com dispositivos complexos.

3.2 Equações de Maxwell para Campos Normalizados

As equações de Maxwell necessárias para a solução de campos usando técnica FDTD, considerando neutralidade de cargas e meios não magnéticos, são:

$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} , \quad (3.1)$$

$$\nabla \times \vec{H} = \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} . \quad (3.2)$$

As relações constitutivas necessárias são:

$$\vec{D} = \vec{\epsilon} \otimes \vec{E} , \quad (3.3)$$

$$\vec{B} = \mu \vec{H} , \quad (3.4)$$

onde \vec{E} é a intensidade de campo elétrico, em V/m, \vec{H} é a intensidade de campo magnético, em A/m, \vec{B} é a densidade de fluxo magnético, em T, \vec{D} é a densidade de fluxo elétrico, em C/m², $\vec{\epsilon}$ é o tensor susceptibilidade elétrica, em F/m, μ é a permeabilidade magnética, em H/m e \otimes é o operador convolução.

As equações de Maxwell que envolvem os divergentes de \vec{B} e \vec{D} estão implícitas nas equações (3.1) e (3.2), quando submetidas às condições iniciais e de contorno usadas no método FDTD [4].

Com o objetivo de minimizar erros de computação e permitir escrever a versão discretizada das equações de Maxwell em termos de parâmetros relevantes para o método FDTD usam-se, a partir deste ponto, os campos normalizados \mathbf{E} , \mathbf{H} , \mathbf{B} e \mathbf{D} definidos por:

$$\mathbf{E} = \vec{E} , \quad (3.5)$$

$$\mathbf{H} = \eta_0 \vec{H} , \quad (3.6)$$

$$\mathbf{D} = \vec{D} / \epsilon_o , \quad (3.7)$$

$$\mathbf{B} = c \vec{B} , \quad (3.8)$$

onde η_o e c são a impedância intrínseca e a velocidade da luz no vácuo, respectivamente.

Em termos dos campos normalizados, as equações (3.1)-(3.4) tornam-se

$$\frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} = c \nabla \times \mathbf{H} , \quad (3.9)$$

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = -c \nabla \times \mathbf{E} , \quad (3.10)$$

$$\mathbf{D} = \vec{\epsilon}_r \otimes \mathbf{E} , \quad (3.11)$$

$$\mathbf{B} = \mu_r \mathbf{H} , \quad (3.12)$$

onde $\vec{\epsilon}_r$ é o tensor permissividade relativa e μ_r é a permeabilidade magnética relativa, a qual é igual à unidade para os materiais a serem tratados aqui. Das equações (2.38) e (3.11), tem-se a seguinte forma para a relação constitutiva do campo elétrico, em termos do tensor susceptibilidade elétrica, $\vec{\chi}(t)$:

$$\mathbf{D} = [\epsilon_s \delta(t) \vec{\mathbf{I}} + \vec{\chi}(t)] \otimes \mathbf{E} ,$$

onde ϵ_s é a constante dielétrica estática do semicondutor e $\delta(t)$ é o delta de Dirac.

Seja o vetor convolução, \mathbf{C} , definido por

$$\mathbf{C} = \vec{\chi}(t) \otimes \mathbf{E} . \quad (3.13)$$

O vetor convolução foi introduzido aqui, porque representa uma quantidade muito importante no processo de discretização temporal, a qual pode ser feita independentemente da discretização espacial.

Agora, a relação constitutiva para o campo elétrico é dada por:

$$\mathbf{D} = \epsilon_s \mathbf{E} + \mathbf{C} . \quad (3.14)$$

Substituindo a equação (3.14) em (3.9) e (3.12) em (3.10), resulta o sistema de equações básico para o processo de discretização:

$$\frac{\partial \mathbf{C}}{\partial t} + \epsilon_s \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = c \nabla \times \mathbf{H} , \quad (3.15)$$

$$\frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} = -c \nabla \times \mathbf{E} , \quad (3.16)$$

onde foi considerado $\mu_r = 1$.

3.3 Discretização Temporal das Equações de Maxwell

Utilizando-se a aproximação da derivada contínua no tempo, $\frac{\partial}{\partial t}$, nas equações (3.15) e (3.16), por diferenças centradas para os campos \mathbf{E} e \mathbf{H} , intercalados no tempo, tem-se

$$\left. \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \right|_{t=(n+\frac{1}{2})\delta t} \cong \frac{\mathbf{E}^{n+1} - \mathbf{E}^n}{\delta t} , \quad (3.17)$$

$$\left. \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} \right|_{t=n\delta t} \cong \frac{\mathbf{H}^{n+\frac{1}{2}} - \mathbf{H}^{n-\frac{1}{2}}}{\delta t} . \quad (3.18)$$

Aqui é utilizada a notação introduzida por Yee[1], na qual um campo $\mathbf{W}(t)$ no instante $t = n\delta t$ é abreviado por \mathbf{W}^n , onde n é um número inteiro e δt é incremento temporal entre duas amostras consecutivas de um mesmo campo. Observe que o intervalo entre amostras dos campos \mathbf{E} e \mathbf{H} é igual a $\frac{1}{2}\delta t$. O vetor convolução será expresso diretamente em termos dos valores discretos do campo elétrico, tal que sua derivada temporal é aproximada por:

$$\left. \frac{\partial \mathbf{C}}{\partial t} \right|_{t=(n+\frac{1}{2})\delta t} \cong \frac{\mathbf{C}^{n+1} - \mathbf{C}^n}{\delta t} . \quad (3.19)$$

Substituindo as equações (3.17)-(3.19) em (3.15)-(3.16), obtém-se

$$\mathbf{C}^{n+1} - \mathbf{C}^n + \epsilon_s(\mathbf{E}^{n+1} - \mathbf{E}^n) = c\delta t \nabla \times \mathbf{H}^{n+\frac{1}{2}} , \quad (3.20)$$

$$\mathbf{H}^{n+\frac{1}{2}} - \mathbf{H}^{n-\frac{1}{2}} = -c\delta t \nabla \times \mathbf{E}^n , \quad (3.21)$$

Assim como a convolução $\mathbf{C}(t)$ é importante para o processo de discretização temporal, os termos contendo rotacional nas equações (3.20) e (3.21) são importantes ao processo de discretização espacial. Além disso, uma vez estabelecido o tipo de célula para discretização espacial, as expressões para os rotacionais não se alteram. Portanto, é conveniente introduzir os campos rotacionais auxiliares, \mathbf{R}_h e \mathbf{R}_e , definidos por

$$\mathbf{R}_h = c\delta t \nabla \times \mathbf{H} , \quad (3.22)$$

$$\mathbf{R}_e = c\delta t \nabla \times \mathbf{E} . \quad (3.23)$$

Substituindo as equações (3.22) e (3.23) em (3.20) e (3.21), respectivamente, resulta o sistema de equações compacto discretizado no tempo:

$$\mathbf{H}^{n+\frac{1}{2}} = \mathbf{H}^{n-\frac{1}{2}} - \mathbf{R}_e^n , \quad (3.24)$$

$$\mathbf{C}^{n+1} + \epsilon_s \mathbf{E}^{n+1} = \mathbf{C}^n + \epsilon_s \mathbf{E}^n + \mathbf{R}_h^{n+\frac{1}{2}} . \quad (3.25)$$

As componentes $H_x^{n+\frac{1}{2}}$, $H_y^{n+\frac{1}{2}}$ e $H_z^{n+\frac{1}{2}}$ são obtidas explicitamente da equação (3.24), válida para meios com $\mu_r = 1$. Entretanto, o mesmo não acontece com o campo elétrico, porque o vetor \mathbf{C}^{n+1} contém termos em \mathbf{E}^{n+1} , \mathbf{E}^n , \mathbf{E}^{n-1} , ..., \mathbf{E}^1 .

O objetivo da próxima Seção é, justamente, obter uma relação entre \mathbf{C}^{n+1} e \mathbf{E}^{n+1} , de modo a permitir o cálculo explícito de \mathbf{E}^{n+1} .

3.4 Cálculo Iterativo do Vetor Convolução.

A separação da componente \mathbf{E}^{n+1} , contida em \mathbf{C}^{n+1} , e o cálculo da convolução diferença, ψ , a ser definida mais adiante, são baseados no método desenvolvido por Luebbers *et al.* [2]. Neste tipo de procedimento, considera-se que a variação do campo elétrico em relação a $\vec{\chi}(t)$, em um intervalo de tempo δt , é irrelevante, tal que

$$\overline{C}^n = \int_0^t \overline{\chi}(t - \tau) \overline{E}(\tau) d\tau \Big|_{t=n\delta t} \cong \sum_{m=0}^{n-1} \left\{ \left[\int_{m\delta t}^{(m+1)\delta t} \overline{\chi}(\tau) d\tau \right] \overline{E}^{n-m} \right\} . \quad (3.26)$$

Esta equação está na forma matricial, identificada pelo traço superior, em vez de negrito, nas quantidades vetoriais e tensor. Assim, na forma explícita tem-se:

$$\overline{C}^n = \begin{pmatrix} C_x^n & C_y^n & C_z^n \end{pmatrix}^T , \quad (3.27)$$

$$\overline{E}^{n-m} = \begin{pmatrix} E_x^{n-m} & E_y^{n-m} & E_z^{n-m} \end{pmatrix}^T , \quad (3.28)$$

$$\overline{\chi}(t) = \begin{pmatrix} \chi_{xx}(t) & \chi_{xy}(t) & \chi_{xz}(t) \\ \chi_{yx}(t) & \chi_{yy}(t) & \chi_{yz}(t) \\ \chi_{zx}(t) & \chi_{zy}(t) & \chi_{zz}(t) \end{pmatrix} , \quad (3.29)$$

onde $(\bullet)^T$ significa matriz transposta de (\bullet) .

Com o intuito de obter expressões simples para a convolução e parâmetros associados, são definidas as seguintes matrizes:

$$\overline{\chi}^0 = \int_0^{\delta t} \overline{\chi}(\tau) d\tau , \quad (3.30)$$

$$\overline{\chi}^m = \int_{m\delta t}^{(m+1)\delta t} \overline{\chi}(\tau) d\tau , \quad (3.31)$$

$$\Delta \overline{\chi}^m = \overline{\chi}^m - \overline{\chi}^{m+1} = \int_{m\delta t}^{(m+1)\delta t} \overline{\chi}(\tau) d\tau - \int_{(m+1)\delta t}^{(m+2)\delta t} \overline{\chi}(\tau) d\tau , \quad (3.32)$$

$$\overline{\psi}^n = \sum_{m=0}^{n-1} \Delta \overline{\chi}^m \overline{E}^{n-m} = \sum_{m=0}^{n-1} \overline{\chi}^m \overline{E}^{n-m} - \sum_{m=0}^{n-1} \overline{\chi}^{m+1} \overline{E}^{n-m} . \quad (3.33)$$

Aplicando-se os valores aproximados de \overline{C} , dados pela equação (3.26), no instante $(n+1)\delta t$, e subtraindo o valor correspondente ao instante $n\delta t$, tem-se:

$$\overline{C}^{n+1} - \overline{C}^n = \sum_{m=0}^n \overline{\chi}^m \overline{E}^{n-m+1} - \sum_{m=0}^{n-1} \overline{\chi}^m \overline{E}^{n-m} . \quad (3.34)$$

Usando-se a equação (3.30) resulta:

$$\overline{C}^{n+1} - \overline{C}^n = \overline{\chi}^0 \overline{E}^{n+1} - \left(\sum_{m=0}^{n-1} \overline{\chi}^m \overline{E}^{n-m} - \sum_{m=1}^n \overline{\chi}^m \overline{E}^{n-m+1} \right) . \quad (3.35)$$

Ajustando-se os limites das somatórias da equação (3.35), vê-se que o termo entre parênteses é igual à convolução diferença, $\overline{\psi}^n$, dada pela equação (3.33), a qual não depende de \overline{E}^{n+1} . Agora, \overline{C}^{n+1} apresenta-se com o termo \overline{E}^{n+1} separado dos seus valores em instantes anteriores. Segue-se que:

$$\overline{C}^{n+1} = \overline{\chi}^0 \overline{E}^{n+1} + \overline{C}^n - \overline{\psi}^n . \quad (3.36)$$

Uma característica importante de $\overline{\psi}^n$ é que, para os tipos de plasmas tratados no Cap. 2, o seu cálculo pode ser feito iterativamente a partir de suas componentes básicas.

Substituindo-se a equação (3.36) na versão matricial (3.25) e explicitando a matriz \overline{E}^{n+1} , resulta

$$\overline{E}^{n+1} = (\epsilon_s \overline{I} + \overline{\chi}^0)^{-1} \left(\epsilon_s \overline{E}^n + \overline{\psi}^n + \overline{R}_n^{n+\frac{1}{2}} \right) , \quad (3.37)$$

onde \overline{I} é a matriz unitária e $(\bullet)^{-1}$ é a matriz inversa de (\bullet) . A matriz convolução

diferença, $\overline{\psi^n}$, em termos de suas componentes básicas é

$$\overline{\psi^n} = \begin{pmatrix} \psi_x^n \\ \psi_y^n \\ \psi_z^n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_{xx}^n + \psi_{xy}^n + \psi_{xz}^n \\ \psi_{yx}^n + \psi_{yy}^n + \psi_{yz}^n \\ \psi_{zx}^n + \psi_{zy}^n + \psi_{zz}^n \end{pmatrix}, \quad (3.38)$$

onde

$$\psi_{uv}^n \Big|_{\substack{v=x,y,z \\ u=x,y,z}} = \sum_{m=0}^{n-1} \Delta \chi_{uv}^m E_u^{n-m}. \quad (3.39)$$

Cada parcela ψ_{uv}^n , pode ser calculada iterativamente quando o elemento do tensor susceptibilidade elétrica, χ_{uv} , é do tipo Debye [2], Lorentz [3] ou conjugado Debye-Lorentz, como é o caso geral tratado neste trabalho.

No caso de magnetização com direção arbitrária, foi mostrado no Cap.2, equações (2.25) e (2.31), que os elementos do tensor susceptibilidade têm a forma geral, para um determinado tipo de portador, k , dada por

$$\chi_{k_{ij}}(t) \Big|_{\substack{i=x,y,z \\ j=x,y,z}} = \chi_{s_{k_{ij}}} \left\{ 1 + K_{1_{k_{ij}}} e^{-\nu_k t} + [K_{2_{k_{ij}}} \cos(\omega_{c_k} t) + K_{3_{k_{ij}}} \text{sen}(\omega_{c_k} t)] e^{-\nu_k t} \right\} U(t), \quad (3.40)$$

onde ω_{c_k} e ν_k são a frequência ciclotron e a taxa de colisão do portador k , respectivamente. Os demais parâmetros são dados pelas equações (2.26) – (2.29) e (2.32) – (2.35), no Cap. 2.

Seja $\chi(t)$ um elemento genérico do tensor susceptibilidade elétrica, dado por

$$\chi(t) = \chi_s \left\{ 1 + K_1 e^{-\nu t} + [K_2 \cos(\omega_c t) + K_3 \text{sen}(\omega_c t)] e^{-\nu t} \right\} U(t). \quad (3.41)$$

Para permitir o cálculo iterativo da convolução diferença, é necessário que $\chi(t)$ seja uma função exponencial [2]. Para atender a este requisito, define-se a versão complexa

da equação (3.41) :

$$\hat{\chi}(t) = \left[1 + K_1 e^{-\nu t} + (K_2 + jK_3) e^{-\hat{\gamma} t} \right] U(t) , \quad (3.42)$$

onde $j = \sqrt{-1}$, com

$$\hat{\gamma} = \nu + j\omega_c , \quad (3.43)$$

tal que

$$\chi(t) = \mathcal{R}\{\hat{\chi}(t)\} , \quad (3.44)$$

onde $\mathcal{R}\{\hat{\chi}\}$ é a parte real de $\hat{\chi}$. Usa-se $\hat{\chi}(t)$ para obter a versão complexa da convolução diferença, $\hat{\psi}(t)$, de modo que a convolução desejada é obtida por

$$\psi(t) = \mathcal{R}\{\hat{\psi}(t)\} , \quad (3.45)$$

ou, na versão discretizada no tempo:

$$\psi^n = \mathcal{R}\{\hat{\psi}^n\} . \quad (3.46)$$

Substituindo a equação (3.42) na versão complexa para um elemento de matriz da equação (3.31), resulta

$$\hat{\chi}^m = \chi_s \left[\delta t + \frac{K_1}{\nu} (1 - e^{-\nu \delta t}) e^{-m\nu \delta t} + \frac{K_2 + jK_3}{\hat{\gamma}} (1 - e^{-\hat{\gamma} \delta t}) e^{-m\hat{\gamma} \delta t} \right] . \quad (3.47)$$

Usando esta equação para obter $\hat{\chi}^{m+1}$, e substituindo na versão complexa para um elemento de (3.32), tem-se

$$\Delta \hat{\chi}^m = \chi_s \left[\frac{K_1}{\nu} (1 - e^{-\nu \delta t})^2 e^{-m\nu \delta t} + \frac{K_2 + jK_3}{\hat{\gamma}} (1 - e^{-\hat{\gamma} \delta t})^2 e^{-m\hat{\gamma} \delta t} \right] . \quad (3.48)$$

O valor particular da equação (3.47) para $m = 0$, é útil para o cálculo do campo

elétrico. Tal valor é:

$$\hat{\chi}^o = \chi_s \left[\delta t + \frac{K_1}{\nu} (1 - e^{-\nu \delta t}) + \frac{K_2 + jK_3}{\hat{\gamma}} (1 - e^{-\hat{\gamma} \delta t}) \right] . \quad (3.49)$$

Para o cálculo iterativo de convolução diferença, substitui-se $\Delta \hat{\chi}^m$, dado pela equação (3.48), na versão complexa para um elemento da matriz de (3.33), resultando

$$\hat{\psi}^n = \psi_R^n + \hat{\psi}_C^n \quad (3.50)$$

onde

$$\psi_R^n = \sum_{m=0}^{n-1} \chi_s \left[\frac{K_1}{\nu} (1 - e^{-\nu \delta t})^2 e^{-m\nu \delta t} \right] E_u^{n-m} \quad (3.51)$$

e

$$\hat{\psi}_C^n = \sum_{m=0}^{n-1} \chi_s \left[\frac{K_2 + jK_3}{\hat{\gamma}} (1 - e^{-\hat{\gamma} \delta t})^2 e^{-m\hat{\gamma} \delta t} \right] E_u^{n-m} , \quad (3.52)$$

sendo que os índices R e C referem-se aos coeficientes de amortecimento real (ν) e complexo ($\hat{\gamma}$), respectivamente.

Alternativamente, as equações (3.51) e (3.52) podem ser escritas como:

$$\psi_R^n = \chi_s \left[\frac{K_1}{\nu} (1 - e^{-\nu \delta t})^2 \right] E_u^n + \sum_{m=0}^{n-2} \chi_s \left[\frac{K_1}{\nu} (1 - e^{-\nu \delta t})^2 e^{-m\nu \delta t} \right] E_u^{n-m-1} \quad (3.53)$$

e

$$\hat{\psi}_C^n = \chi_s \left[\frac{K_2 + jK_3}{\hat{\gamma}} (1 - e^{-\hat{\gamma} \delta t})^2 \right] E_u^n + \sum_{m=0}^{n-2} \chi_s \left[\frac{K_2 + jK_3}{\hat{\gamma}} (1 - e^{-\hat{\gamma} \delta t})^2 e^{-m\hat{\gamma} \delta t} \right] E_u^{n-m-1} , \quad (3.54)$$

ou, ainda, numa forma mais compacta, como segue, na qual a iteratividade fica explícita:

$$\psi_R^n = \chi_s \left[\frac{K_1}{\nu} (1 - e^{-\nu \delta t})^2 \right] E_u^n + e^{-\nu \delta t} \psi_R^{n-1} \quad (3.55)$$

e

$$\hat{\psi}_C^n = \chi_s \left[\frac{K_2 + jK_3}{\hat{\gamma}} (1 - e^{-\hat{\gamma} \delta t})^2 \right] E_u^n + e^{-\hat{\gamma} \delta t} \hat{\psi}_C^{n-1} . \quad (3.56)$$

Observe que ψ_R^n e $\hat{\psi}_C^n$, são obtidas a partir de ψ_R^{n-1} e $\hat{\psi}_C^{n-1}$, isto é, dependem apenas de seus valores no instante anterior.

Assim, o valor final da convolução diferença é :

$$\psi^n = \mathcal{R} \left\{ \hat{\psi}^n \right\} = \psi_R^n + \mathcal{R} \left\{ \hat{\psi}_C^n \right\} , \quad (3.57)$$

onde as convoluções ψ_R^n e $\hat{\psi}_C^n$, são obtidas iterativamente pelas equações (3.55) e (3.56), respectivamente.

Esses resultados foram obtidos para um elemento genérico, $\chi_{k_{ij}}(t) = \chi(t)$, do tensor susceptibilidade e para um determinado tipo de portador, k . A solução geral, para N_k portadores, do parâmetro $\hat{\chi}^o$, é

$$\bar{\chi}^o = \sum_{k=1}^{N_k} \mathcal{R} \left\{ \overline{(\hat{\chi}^o)_k} \right\} . \quad (3.58)$$

Para as convoluções, tem-se:

$$\bar{\psi}_{Rk}^n = \bar{\chi}_{sk} \left[\frac{\bar{K}_{1k}}{\nu_k} (1 - e^{-\nu_k \delta t})^2 \right] \bar{E}^n + e^{-\nu_k \delta t} \bar{\psi}_{Rk}^{n-1} , \quad (3.59)$$

$$\bar{\psi}_{Ck}^n = \bar{\chi}_{sk} \left[\frac{\bar{K}_{2k} + j\bar{K}_{3k}}{\hat{\gamma}_k} (1 - e^{-\hat{\gamma}_k \delta t})^2 \right] \bar{E}^n + e^{-\hat{\gamma}_k \delta t} \bar{\psi}_{Ck}^{n-1} , \quad (3.60)$$

$$\bar{\psi}_k^n = \mathcal{R} \left\{ \bar{\psi}_k^n \right\} = \bar{\psi}_{Rk}^n + \mathcal{R} \left\{ \bar{\psi}_{Ck}^n \right\} , \quad (3.61)$$

ou

$$\bar{\psi}_k^n = \begin{pmatrix} \psi_{k_x}^n \\ \psi_{k_y}^n \\ \psi_{k_z}^n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_{k_{xx}}^n + \psi_{k_{xy}}^n + \psi_{k_{xz}}^n \\ \psi_{k_{yx}}^n + \psi_{k_{yy}}^n + \psi_{k_{yz}}^n \\ \psi_{k_{zx}}^n + \psi_{k_{zy}}^n + \psi_{k_{zz}}^n \end{pmatrix} . \quad (3.62)$$

Cada elemento de convolução diferença, $\psi_{k_{ij}}^n \Big|_{i,j=x,y,z}$, deve ser calculado isoladamente,

através das equações iterativas (3.55)-(3.56), combinando com (3.57). A matriz convolução diferença final é dada pela equação (3.62).

3.5 Discretização Espacial Tridimensional (3D-FDTD)

Para discretizar as derivadas parciais nos vetores rotacionais, \mathbf{R}_h e \mathbf{R}_e , utiliza-se a aproximação por diferenças centradas das componentes dos campos elétrico e magnéticos entrelaçados no espaço. Para tanto, o espaço computacional é preenchido com células de tamanho variável nas quais as componentes de campo são dispostas como na Fig. 3.1. Este tipo de esquema é conhecido como célula de Yee [1].

A localização ou *endereço* de cada célula no sistema de eixos cartesianos é representada por

$$(I, J, K) \longleftrightarrow (I\delta x, J\delta y, K\delta z) ,$$

onde I , J e K são números inteiros e δx , δy e δz são as dimensões da célula segundo as versores \mathbf{u}_x , \mathbf{u}_y e \mathbf{u}_z , respectivamente. Para qualquer componente de campo $W(x, y, z, t)$, discretizada no espaço e no tempo, usa-se a notação [1]:

$$W(x, y, z, t) \cong W(I\delta x, J\delta y, K\delta z, n\delta t) \rightarrow W^n(I, J, K) .$$

Para cada célula espacial existem seis componentes de campo. Por exemplo, para a célula de *endereço* ou posição (I, J, K) tem-se:

- Campo elétrico:

$$\bar{\mathbf{E}}(I, J, K) = \begin{pmatrix} E_x^n(I + \frac{1}{2}, J, K) \\ E_y^n(I, J + \frac{1}{2}, K) \\ E_z^n(I, J, K + \frac{1}{2}) \end{pmatrix} ; \quad (3.63)$$

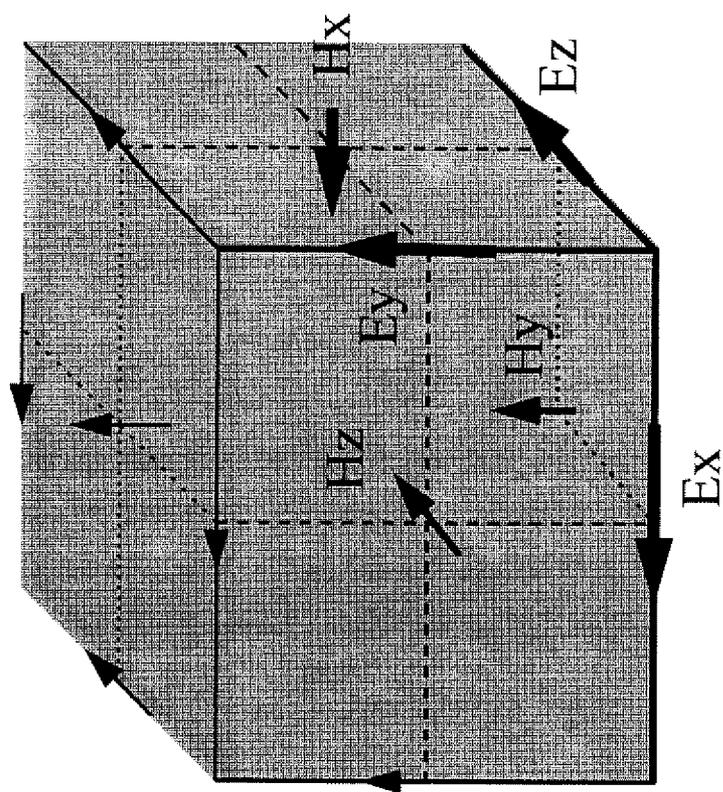


Fig. 3.1 - Célula de Yee para discretização tridimensional.

- Campo magnético:

$$\bar{H}(I, J, K) = \begin{pmatrix} H_x^{n+\frac{1}{2}}(I, J + \frac{1}{2}, K + \frac{1}{2}) \\ H_y^{n+\frac{1}{2}}(I + \frac{1}{2}, J, K + \frac{1}{2}) \\ H_z^{n+\frac{1}{2}}(I + \frac{1}{2}, J + \frac{1}{2}, K) \end{pmatrix}. \quad (3.64)$$

Observe que as componentes de um dado campo estão situadas em posições diferentes da célula. Desta forma, para representar o campo na forma compacta, utiliza-se o argumento que identifica a célula. No caso escreve-se $\bar{E}(I, J, K)$ para o campo elétrico. As componentes dos campos pertencentes à célula de localização (I, J, K) estão enfatizadas na Fig. 3.1. As demais componentes mostradas nesta figura, pertencentes às células vizinhas, são utilizadas para o cálculo aproximado dos rotacionais.

Na versão contínua, o campo rotacional auxiliar \mathbf{R}_e é dado por:

$$\mathbf{R}_e = c\delta t \left[\left(\frac{\partial E_z}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial z} \right) \mathbf{u}_x + \left(\frac{\partial E_x}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial x} \right) \mathbf{u}_y + \left(\frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial y} \right) \mathbf{u}_z \right]. \quad (3.65)$$

Para as expressões de diferenças finitas de \mathbf{R}_e e \mathbf{R}_h são usados os parâmetros S_x , S_y e S_z , definidos por

$$S_x \equiv S_x(I, J, K) = \frac{c\delta t}{\delta x(I, J, K)}, \quad (3.66)$$

$$S_y \equiv S_y(I, J, K) = \frac{c\delta t}{\delta y(I, J, K)}, \quad (3.67)$$

$$S_z \equiv S_z(I, J, K) = \frac{c\delta t}{\delta z(I, J, K)}. \quad (3.68)$$

O valor de \mathbf{R}_e é usado para calcular $\mathbf{H}^{n+\frac{1}{2}}$. Sendo assim, \mathbf{R}_e usa as componentes do campo \mathbf{E} no instante $n\delta t$, as quais são conhecidas em todo o domínio computacional no instante $(n + \frac{1}{2})\delta t$. Desta forma, para o cálculo das componentes da célula de endereço (I, J, K) , podem-se usar células espaciais auxiliares de ordem imediatamente superior, a saber: $(I + 1, J, K)$, $(I, J + 1, K)$ e $(I, J, K + 1)$. Com isso, as derivadas espaciais são

aproximadas por:

$$\left. \frac{\partial E_x^n}{\partial z} \right|_{\bar{r} \rightarrow (I + \frac{1}{2}, J, k + \frac{1}{2})} \cong \frac{E_x^n(I + \frac{1}{2}, J, K + 1) - E_x^n(I + \frac{1}{2}, J, K)}{\delta z(I, J, K)}, \quad (3.69)$$

$$\left. \frac{\partial E_y^n}{\partial z} \right|_{\bar{r} \rightarrow (I, J + \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2})} \cong \frac{E_y^n(I, J + \frac{1}{2}, K + 1) - E_y^n(I, J + \frac{1}{2}, K)}{\delta z(I, J, K)}, \quad (3.70)$$

$$\left. \frac{\partial E_z^n}{\partial x} \right|_{\bar{r} \rightarrow (I + \frac{1}{2}, J, k + \frac{1}{2})} \cong \frac{E_z^n(I + 1, J, K + \frac{1}{2}) - E_z^n(I, J, K + \frac{1}{2})}{\delta x(I, J, K)}, \quad (3.71)$$

$$\left. \frac{\partial E_x^n}{\partial y} \right|_{\bar{r} \rightarrow (I + \frac{1}{2}, J + \frac{1}{2}, k)} \cong \frac{E_x^n(I + \frac{1}{2}, J + 1, K) - E_x^n(I + \frac{1}{2}, J, K)}{\delta y(I, J, K)}, \quad (3.72)$$

$$\left. \frac{\partial E_y^n}{\partial x} \right|_{\bar{r} \rightarrow (I + \frac{1}{2}, J + \frac{1}{2}, k)} \cong \frac{E_y^n(I + 1, J + \frac{1}{2}, K) - E_y^n(I, J + \frac{1}{2}, K)}{\delta x(I, J, K)}, \quad (3.73)$$

$$\left. \frac{\partial E_z^n}{\partial y} \right|_{\bar{r} \rightarrow (I, J + \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2})} \cong \frac{E_z^n(I, J + 1, K + \frac{1}{2}) - E_z^n(I, J, K + \frac{1}{2})}{\delta y(I, J, K)}. \quad (3.74)$$

Substituindo as equações (3.69)-(3.74) em (3.65) e usando (3.66)-(3.68), obtém-se:

$$\bar{R}_e^n(I, J, K) = \begin{pmatrix} S_y \left[E_x^n(I, J + 1, K + \frac{1}{2}) - E_x^n(I, J, K + \frac{1}{2}) \right] - S_z \left[E_y^n(I, J + \frac{1}{2}, K + 1) - E_y^n(I, J + \frac{1}{2}, K) \right] \\ S_z \left[E_x^n(I + \frac{1}{2}, J, K + 1) - E_x^n(I + \frac{1}{2}, J, K) \right] - S_x \left[E_z^n(I + 1, J, K + \frac{1}{2}) - E_z^n(I, J, K + \frac{1}{2}) \right] \\ S_x \left[E_y^n(I + 1, J + \frac{1}{2}, K) - E_y^n(I, J + \frac{1}{2}, K) \right] - S_y \left[E_x^n(I + \frac{1}{2}, J + 1, K) - E_x^n(I + \frac{1}{2}, J, K) \right] \end{pmatrix}. \quad (3.75)$$

Para o cálculo de $\bar{R}_h^{n+\frac{1}{2}}(I, J, K)$ são utilizadas células auxiliares de ordem espacialmente inferior, porque as componentes de $\bar{H}^{n+\frac{1}{2}}$, para célula de ordem superior, ainda não estão disponíveis. Procedendo-se analogamente ao cálculo de $\bar{R}_e^n(I, J, K)$, obtém-se:

.

.

.

$$\overline{R}_h^{n+\frac{1}{2}}(I, J, K) =$$

$$\left(\begin{array}{l} S_y \left[H_z^{n+\frac{1}{2}}(I+\frac{1}{2}, J+\frac{1}{2}, K) - H_z^{n+\frac{1}{2}}(I+\frac{1}{2}, J-\frac{1}{2}, K) \right] - S_z \left[H_y^{n+\frac{1}{2}}(I+\frac{1}{2}, J, K+\frac{1}{2}) - H_y^{n+\frac{1}{2}}(I+\frac{1}{2}, J, K-\frac{1}{2}) \right] \\ S_z \left[H_x^{n+\frac{1}{2}}(I, J+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}) - H_x^{n+\frac{1}{2}}(I, J+\frac{1}{2}, K-\frac{1}{2}) \right] - S_x \left[H_z^{n+\frac{1}{2}}(I+\frac{1}{2}, J+\frac{1}{2}, K) - H_z^{n+\frac{1}{2}}(I-\frac{1}{2}, J+\frac{1}{2}, K) \right] \\ S_x \left[H_y^{n+\frac{1}{2}}(I+\frac{1}{2}, J, K+\frac{1}{2}) - H_y^{n+\frac{1}{2}}(I-\frac{1}{2}, J, K+\frac{1}{2}) \right] - S_y \left[H_x^{n+\frac{1}{2}}(I, J+\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}) - H_x^{n+\frac{1}{2}}(I, J-\frac{1}{2}, K+\frac{1}{2}) \right] \end{array} \right). \quad (3.76)$$

Para estruturas com uniformidade axial, as equações (3.75) e (3.76) podem ser simplificadas, reduzindo consideravelmente o esforço computacional e a quantidade de memória necessários à aplicação do algoritmo FDTD.

3.6 Diferenças Finitas no Domínio do Tempo Bidimensional (2D-FDTD).

Para o caso de guias de ondas com uniformidade axial, a variação espacial dos campos ao longo do eixo da estrutura é do tipo exponencial. Posicionando o eixo z paralelamente ao eixo do guia, os campos evoluem nessa direção de acordo com $\exp(-j\beta z)$, no sentido \mathbf{u}_z , onde β é a constante de fase do modo propagante, em rad/m. Neste caso, o operador $\frac{\partial}{\partial z}$ é igual a $-j\beta$, e o problema a ser resolvido passa a ser bidimensional.

Os campos rotacionais auxiliares, \mathbf{R}_e e \mathbf{R}_h , adquirem a forma:

$$\mathbf{R}_e = c\delta t \left[\left(\frac{\partial E_z}{\partial y} + j\beta E_y \right) \mathbf{u}_x + \left(-j\beta E_x - \frac{\partial E_z}{\partial x} \right) \mathbf{u}_y + \left(\frac{\partial E_z}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial y} \right) \mathbf{u}_z \right], \quad (3.77)$$

$$\mathbf{R}_h = c\delta t \left[\left(\frac{\partial H_z}{\partial y} + j\beta H_y \right) \mathbf{u}_x + \left(-j\beta H_x - \frac{\partial H_z}{\partial x} \right) \mathbf{u}_y + \left(\frac{\partial H_z}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} \right) \mathbf{u}_z \right]. \quad (3.78)$$

Procedendo-se como no caso tridimensional, resultam as seguintes expressões de

diferenças finitas para \mathbf{R}_e e \mathbf{R}_h , na forma matricial:

$$\overline{R}_e^n(I, J) = \begin{pmatrix} +S_y[E_z^n(I, J+1) - E_z^n(I, J)] + S_z E_y^n(I, J + \frac{1}{2}) \\ -S_z E_x^n(I + \frac{1}{2}, J) - S_x[E_z^n(I+1, J) - E_z^n(I, J)] \\ +S_x[E_y^n(I+1, J + \frac{1}{2}) - E_y^n(I, J + \frac{1}{2})] - S_y[E_x^n(I + \frac{1}{2}, J+1) - E_x^n(I + \frac{1}{2}, J)] \end{pmatrix}, \quad (3.79)$$

$$\overline{R}_h^{n+\frac{1}{2}}(I, J) = \begin{pmatrix} +S_y[H_z^{n+\frac{1}{2}}(I + \frac{1}{2}, J + \frac{1}{2}) - H_z^{n+\frac{1}{2}}(I + \frac{1}{2}, J - \frac{1}{2})] + S_z H_y^{n+\frac{1}{2}}(I + \frac{1}{2}, J) \\ -S_z H_x^{n+\frac{1}{2}}(I, J + \frac{1}{2}) - S_x[H_z^{n+\frac{1}{2}}(I + \frac{1}{2}, J + \frac{1}{2}) - H_z^{n+\frac{1}{2}}(I - \frac{1}{2}, J + \frac{1}{2})] \\ +S_x[H_y^{n+\frac{1}{2}}(I + \frac{1}{2}, J) - H_y^{n+\frac{1}{2}}(I - \frac{1}{2}, J)] - S_y[H_x^{n+\frac{1}{2}}(I, J + \frac{1}{2}) - H_x^{n+\frac{1}{2}}(I, J - \frac{1}{2})] \end{pmatrix}, \quad (3.80)$$

onde

$$\begin{aligned} S_x &= \frac{c\delta t}{\delta x(I, J)}, \\ S_y &= \frac{c\delta t}{\delta y(I, J)}, \\ S_z &= jc\delta t \beta. \end{aligned} \quad (3.81)$$

Observe que S_z é um parâmetro que depende diretamente da constante de fase, β , a qual é tratada como um dado de entrada na versão bidimensional do método FDTD.

Todas as componentes envolvidas no cálculo de $\overline{R}_e^n(I, J)$ e $\overline{R}_h^{n+\frac{1}{2}}(I, J)$ são mostradas na Fig. 3.2. Nesta figura estão enfatizadas as componentes de campo pertencentes à célula de referência (I, J) .

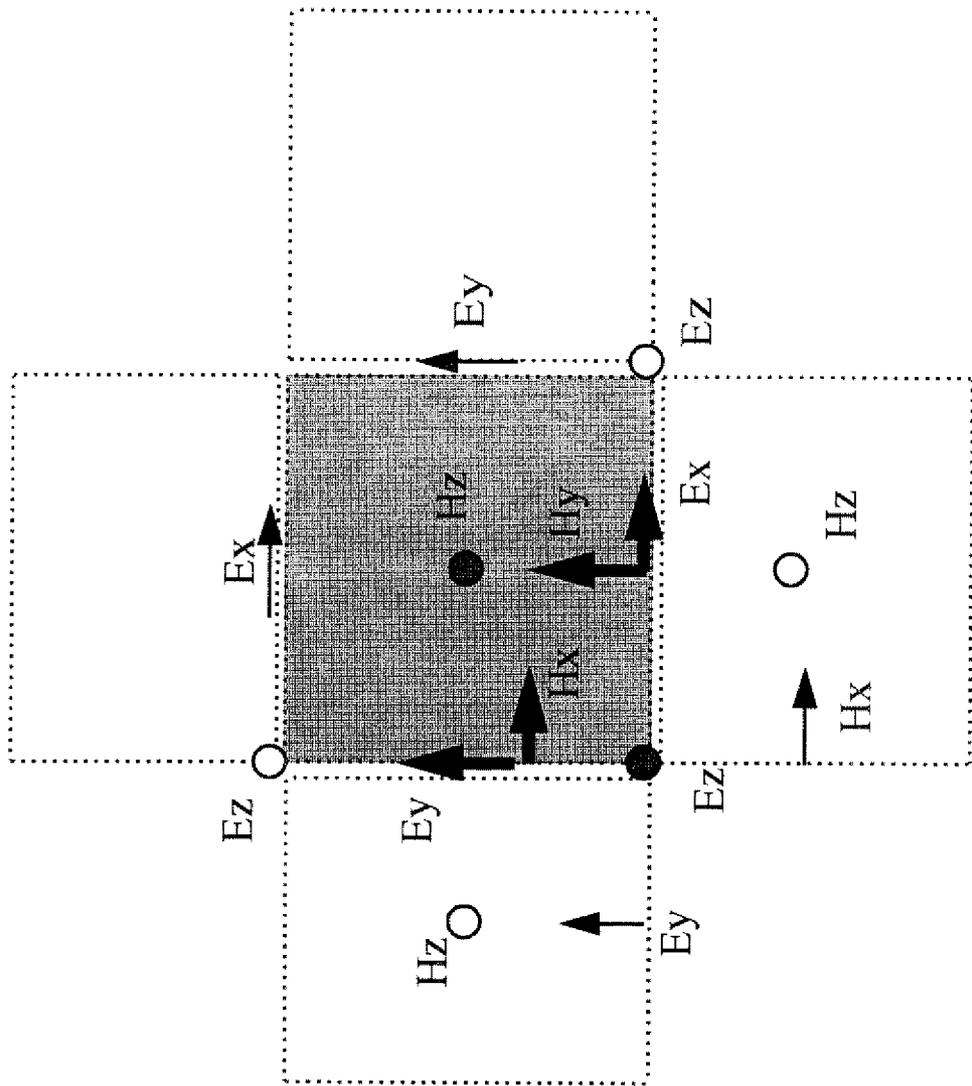


Fig. 3.2 - Célula de Yee para discretização bidimensional

3.7 Fontes de Excitação, Graduação de Malha e Estabilidade Numérica

3.7.1 Fontes de excitação

Neste trabalho é usado apenas fontes de excitação do tipo gaussiano, tanto temporal como espacialmente. A distribuição espacial é aplicada no centro do núcleo do guia, com polarização segundo \mathbf{u}_x para o modo E_{11}^x e segundo \mathbf{u}_y para excitação do modo E_{11}^y . A distribuição temporal compõe-se da superposição de duas gaussianas deslocadas no tempo e com sinais trocados, tal que sua média temporal é nula. Este tipo de excitação é necessária para neutralizar as componentes de baixas frequências que aparecem em meios contendo plasma [4]. O desvio padrão da excitação temporal, σ_t , é obtido a partir da largura de banda, B_f , fornecida como dado de entrada no algoritmo FDTD. A distribuição espacial bidimensional é caracterizada pelos valores *rms*, σ_x e σ_y , segundo os eixos x e y , respectivamente, calculada a partir da largura e altura, respectivamente, do núcleo do guia. Designando o pulso de excitação de $W_s(x, y, t)$ tem-se:

$$W_s(x, y, t) = \Phi(x, y) \left[e^{-(t-t_1)^2/2\sigma_t^2} - e^{-(t-t_2)^2/2\sigma_t^2} \right] , \quad (3.82)$$

com

$$\Phi(x, y) = W_o e^{-(x-x_o)^2/2\sigma_x^2} e^{-(y-y_o)^2/2\sigma_y^2} ,$$

onde t_1 e t_2 dependem de σ_t e W_o é uma constante. O pulso de excitação W_s é truncado para um valor $t = t_s$, suficientemente grande de modo a evitar variação brusca no pulso de excitação. Isto é importante a fim de manter sob controle a largura espectral do pulso de excitação. Os valores usados na maioria das simulações são os seguintes:

$$t_1 = 3,7 \sigma_t$$

$$t_2 = 2 t_1$$

$$t_s = 3 t_1$$

Para análise do modo E_{11}^u excita-se a estrutura com a componente de campo elétrico $E_u = W_s(x, y, t)$, onde $u = x$ ou y .

3.7.2 Graduação de malha

Para melhorar a eficiência do método FDTD, utilizou-se malha de discretização graduada. Alguns critérios foram adotados para estabelecer as regiões de maior ou menor refinamento. A Fig. 3.3 mostra esquematicamente a seção transversal de um guia dielétrico retangular imerso em ar e a malha de discretização do domínio numérico correspondente. As paredes nos limites do domínio numérico são do tipo absorvente. Este tipo de contorno simula, aproximadamente, uma onda caminhante para fora do domínio, como será visto mais adiante.

Na interface entre o dielétrico e o ar, o refinamento da malha é enfatizado, ao mesmo tempo que as dimensões são mantidas iguais para cada lado da interface. Na direção normal à interface, e para cada lado desta, as células têm dimensão mínima, igual a δ_{\min} . Nessa mesma direção, a dimensão da célula aumenta linearmente até atingir seu tamanho máximo nos limites do domínio numérico. Nessas regiões os campos são relativamente fracos.

Apesar da energia do modo E_{11}^x ou E_{11}^y estar mais concentrada no centro do núcleo do guia, na maioria dos casos simulados, nessa região as células são maiores do que nas interfaces. Isto porque o método FDTD, quando aplicado diretamente às equações de Maxwell, fica sensível ao contraste brusco do índice de refração, devido às discontinuidades nos campos eletromagnéticos. Esse tipo de comportamento fica mais evidente através do entrelaçamento espacial das componentes de campo na célula de Yee, a qual simula uma propagação de ondas caminhantes, em todas as direções. Portanto, as distribuições estacionárias transversais resultam da superposição dessas ondas caminhantes. Nas simulações feitas neste trabalho, são necessárias mais de 1000 interações para se chegar a uma distribuição estável.

Na Fig. 3.3 também é apresentada, esquematicamente, a evolução da envoltória do

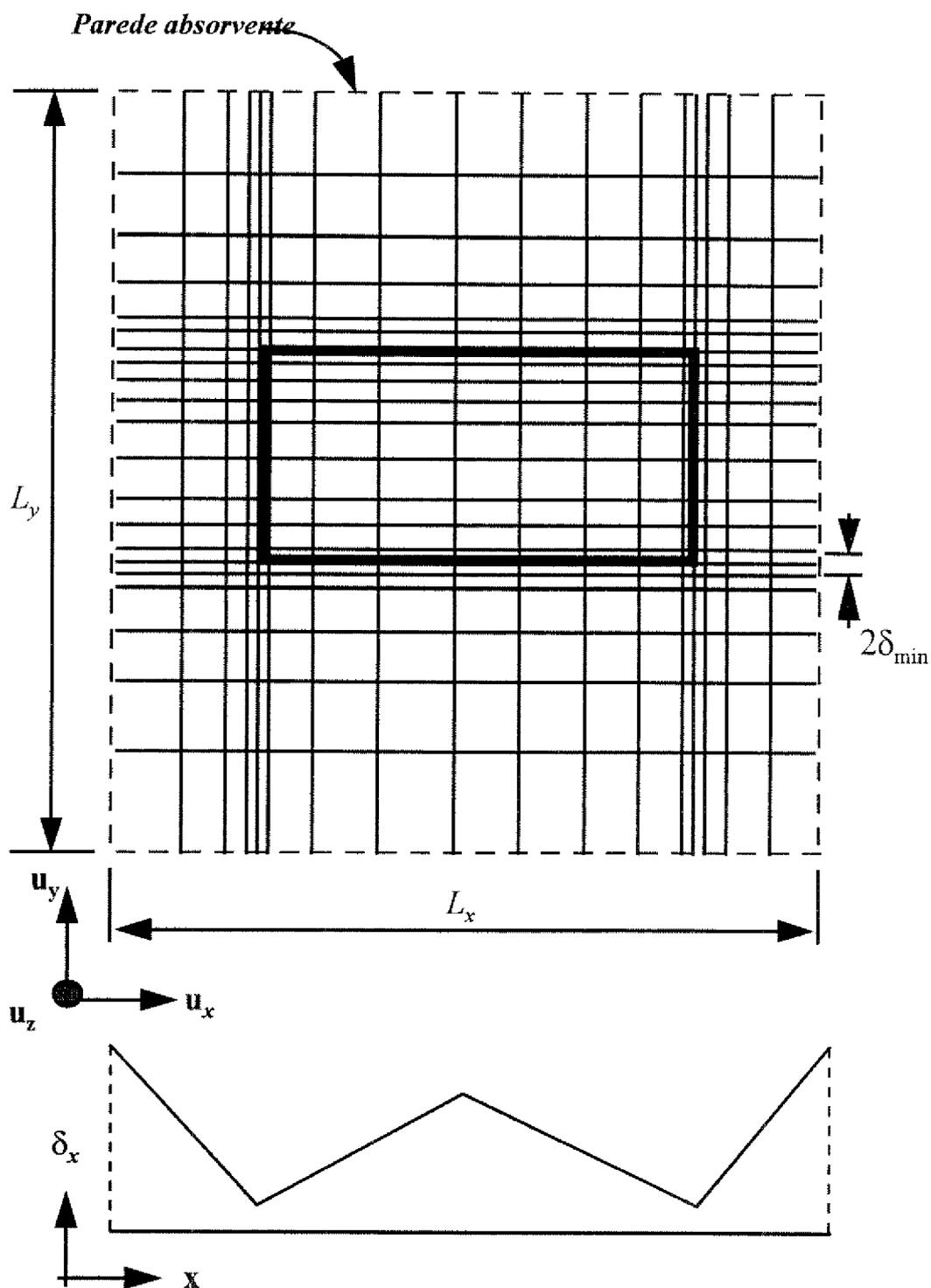


Fig. 3.3 - Discretização espacial, com graduação de malha, para um guia de onda de seção transversal retangular. Também é mostrada a envoltória da evolução das células segundo eixo horizontal de referência, δ_x versus x .

tamanho da célula δ_x ao longo do versor \mathbf{u}_x .

Pelo exposto acima, deve-se melhorar o refinamento da malha na direção de polarização do modo desejado, o qual é definido pelo pulso de excitação. Além disso deve-se levar em consideração as dimensões relativas dos diversos elementos e materiais que compõem a estrutura. Por exemplo, em guias acoplados, a distância entre os guias é relativamente pequena. O mesmo acontece com a espessura da camada de plasma fotoinduzida em semiconductor. São essas regiões que têm prioridade na definição do refinamento da malha, ou seja, na escolha do parâmetro δ_{\min} .

No Capítulo 4, ítem 4.3.2, são apresentados detalhes adicionais necessários à graduação de malha envolvendo estruturas complexas. No ítem 4.5 são fornecidos dados numéricos para diversos perfis de discretização e estabelecido um padrão para os demais dispositivos. Esse padrão resultou de testes de convergência para o guia opticamente controlado, com núcleo de baixo contraste de índice de refração, relativo ao *plasma host*.

3.7.3 Estabilidade numérica

A estabilidade numérica do método FDTD tridimensional é estabelecida pela condição de Courant [5], dada por

$$v \delta t \leq \frac{1}{\sqrt{\left(\frac{1}{\delta x}\right)^2 + \left(\frac{1}{\delta y}\right)^2 + \left(\frac{1}{\delta z}\right)^2}} \quad , \quad (3.83)$$

onde v é a velocidade de fase. Portanto, dado que o incremento espacial mínimo é δ_{\min} e considerando que o material com menor refringência tenha índice de refração n_{\min} , tem-se para o valor máximo permitido para o incremento temporal:

$$\delta t_{\max} = \frac{n_{\min} \delta_{\min}}{c\sqrt{3}} \quad .$$

Para FDTD bidimensional, a condição de Courant simplifica-se para [7]:

$$v \delta t \leq \frac{1}{\sqrt{\left(\frac{1}{\delta x}\right)^2 + \left(\frac{1}{\delta y}\right)^2 + \left(\frac{\beta}{2}\right)^2}},$$

tal que o incremento temporal máximo permitido é

$$\delta t_{\max} = \frac{n_{\min}}{c \sqrt{2 \left(\frac{1}{\delta_{\min}}\right)^2 + \left(\frac{\beta}{2}\right)^2}}. \quad (3.84)$$

Nas simulações adota-se o coeficiente (ou fator de estabilidade), C_t , para estabelecer o incremento temporal adequado, tal que

$$\delta t = C_t \delta t_{\max}, \quad (3.85)$$

onde $C_t \leq 1$. Usualmente a condição $C_t = 1$ é adequada para plasma e materiais convencionais, entretanto, para $C_t > 1$, quase sempre ocorre instabilidade. Se possível, deve-se usar o valor unitário, visto que valores menores de C_t implicam em maior erro de dispersão [6].

3.8 Paredes Elétrica, Magnética e Absorvente

Na análise dos dispositivos através do método FDTD, estão envolvidos três tipos de contornos nos limites do domínio numérico:

- parede elétrica,
- parede magnética e
- parede absorvente.

O conceito de paredes elétrica e magnética é usado aqui, com a finalidade específica de simplificar a análise dos modos ímpar e par, respectivamente, propagando em estruturas

acopladas simétricas. A simulação de parede absorvente é aplicada aos contornos do domínio computacional de modo a limitar o número de células a valores adequados ao método FDTD.

3.8.1 Paredes elétrica e magnética

A Fig. 3.4 apresenta a interface entre duas regiões do domínio numérico separadas por uma parede localizada no plano de referência $x = x_R$. As células à direita e à esquerda da interface são designadas pelos endereços (I_R, J) e $(I_R - 1, J)$, respectivamente. Também as componentes de campo envolvidas são mostradas, para cada célula. As condições de contorno, considerando parede elétrica, são:

$$\begin{aligned}
 E_y(I_R, J) &= 0 \\
 E_z(I_R, J) &= 0 \\
 H_x(I_R, J) &= 0 \\
 H_y(I_R - 1, J) &= H_y(I_R, J) \\
 H_z(I_R - 1, J) &= H_z(I_R, J)
 \end{aligned} \tag{3.86}$$

As condições de contorno em uma parede magnética, no plano $x = x_R$, são as seguintes:

$$\begin{aligned}
 E_x(I_R - 1, J) &= -E_x(I_R, J) \\
 H_y(I_R - 1, J) &= -H_y(I_R, J) \\
 H_z(I_R - 1, J) &= -H_z(I_R, J)
 \end{aligned} \tag{3.87}$$

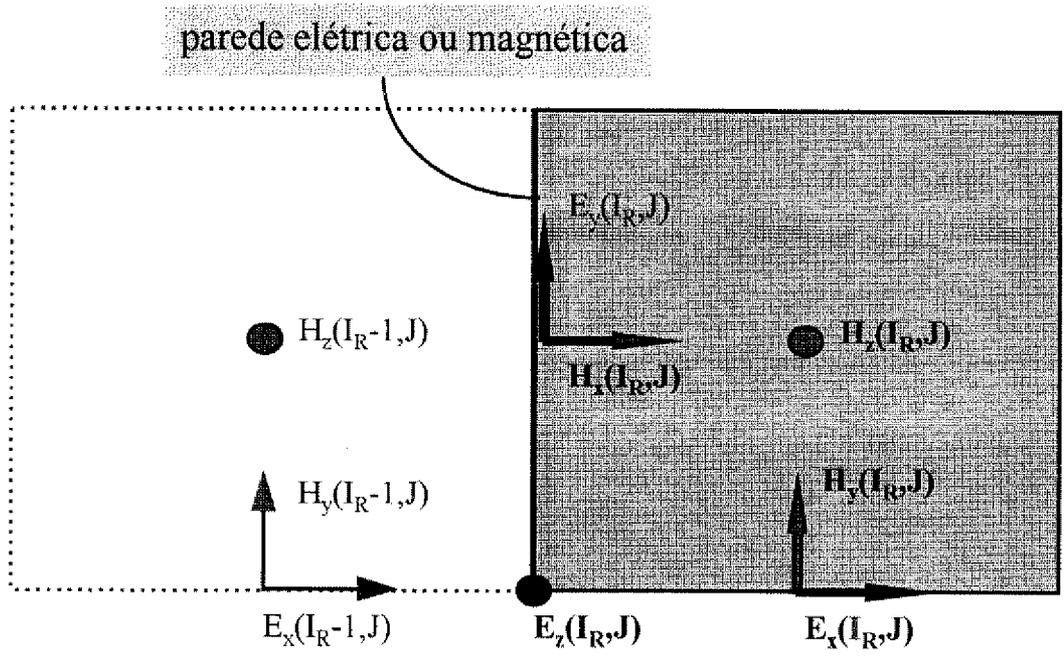


Fig. 3.4 - Componentes dos campos envolvidas nas condições de contorno de paredes elétrica e magnética, em um plano normal a \mathbf{u}_x .

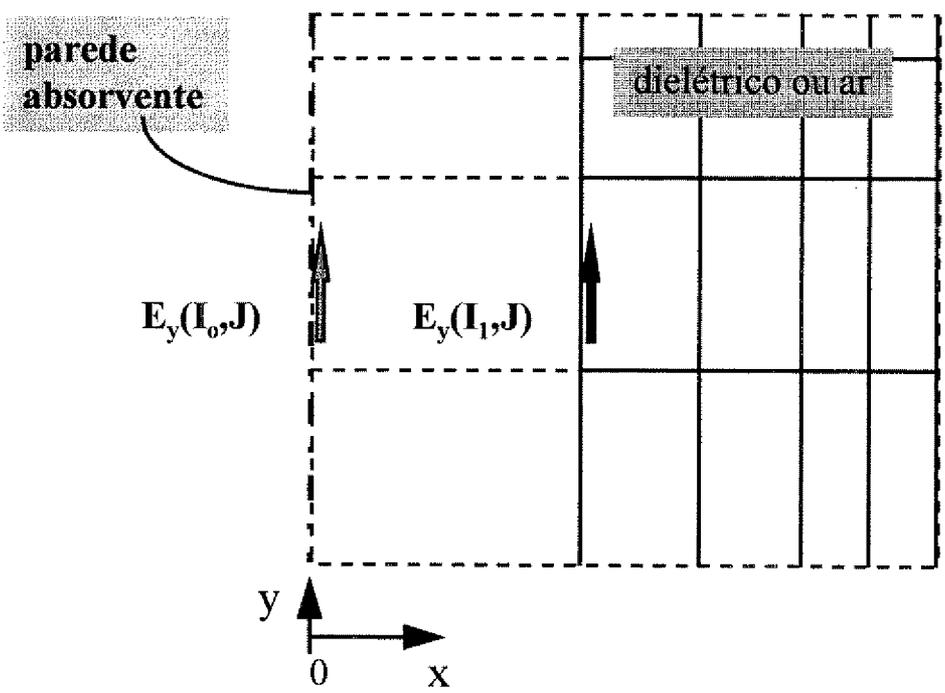


Fig. 3.5 - Componentes de campo elétrico, envolvidas na formulação de Mur, para parede absorvente: caso particular de $\mathbf{E}_{tg} = E_y \mathbf{u}_y$

3.8.2 Parede absorvente [8]

Para delimitar o domínio numérico na aplicação da técnica FDTD, é utilizado o conceito de parede absorvente introduzido por Mur [8]. A aproximação de Mur de primeira ordem é suficiente para o tratamento das estruturas de interesse, nas quais a energia de RF encontra-se bem confinada no núcleo da estrutura, mesmo na vizinhança da frequência de corte.

A aproximação de Mur de primeira ordem simula a propagação da onda, com incidência normal à parede e para fora do domínio computacional, através da condição:

$$\left(\frac{\partial}{\partial u} - \frac{1}{v_u} \frac{\partial}{\partial t} \right) \mathbf{W}_{tg} = 0 \quad , \quad (3.88)$$

onde u e v_u são a distância e a velocidade de fase ao longo do versor \mathbf{u}_u , respectivamente, e \mathbf{W}_{tg} é o campo (elétrico ou magnético), tangente à interface.

A Fig. 3.5 mostra o caso particular de uma parede absorvente em, $x = 0$, e as componentes de campo elétrico envolvidas. O objetivo, ao discretizar a equação (3.88) no espaço-tempo, é a obtenção da componente $E_y^{n+1}(I_o, J)$ em termos de $E_y^n(I_1, J)$, $E_y^{n+1}(I_1, J)$ e $E_y^n(I_o, J)$, onde $I_1 = I_o + 1$. Para tanto, as derivadas espacial e temporal são aproximadas por:

$$\frac{\partial E_y}{\partial t} \simeq \frac{1}{2} \left[\frac{E_y^{n+1}(I_o, J) - E_y^n(I_1, J)}{\delta t} + \frac{E_y^{n+1}(I_1, J) - E_y^n(I_o, J)}{\delta t} \right] \quad , \quad (3.89)$$

$$\frac{\partial E_y}{\partial x} \simeq \frac{1}{2} \left[\frac{E_y^{n+1}(I_1, J) - E_y^n(I_o, J)}{\delta x} + \frac{E_y^n(I_1, J) - E_y^{n+1}(I_o, J)}{\delta x} \right] \quad . \quad (3.90)$$

Substituindo estas equações em (3.88), com $\mathbf{W}_{tg} = \mathbf{u}_y E_y$, obtém-se:

$$E_y^{n+1}(I_o, J) \simeq E_y^n(I_1, J) + \frac{S'_x - 1}{S'_x + 1} \left[E_y^{n+1}(I_1, J) - E_y^n(I_o, J) \right] \quad , \quad (3.91)$$

com

$$S'_x = v_x \frac{\delta t}{\delta x(I_o, J)} = \frac{c}{n_x(I_o, J)} \frac{\delta t}{\delta x(I_o, J)}, \quad (3.92)$$

onde $n_x(I_o, J)$ é o índice de refração, para propagação segundo \mathbf{u}_x .

O procedimento para as outras componentes de campo e paredes em outras direções, é similar ao presente caso.

Para verificar a eficiência da equação (3.91), utilizou-se um guia retangular metálico de dimensões 12 x 6 mm. A curva tracejada da Fig. 3.6 mostra a resposta espectral da componente E_y quando o modo dominante, TE_{10} , é excitado. Em seguida, substituiu-se as paredes metálicas por paredes absorventes, isto é, aplica-se a equação (3.91) aos contornos do guia. Obtém-se então a curva contínua da Fig. 3.6. Observe que o espectro agora é virtualmente plano, o que implica que as reflexões nos contornos são muito pequenas. Considerando que, no caso de guia dielétrico, o núcleo é posicionado a uma certa distância dos contornos do domínio numérico, o efeito das reflexões neste caso é reduzido ainda mais. Desta forma, o uso da aproximação de Mur de primeira ordem é adequada para as estruturas analisadas neste trabalho.

3.8.3 Apresentação dos resultados

As distribuições espaciais das componentes dos campos eletromagnéticos são traçadas ao longo de dois eixos passando pelo centro de gravidade do núcleo do guia, ponto $P(I_{rp}, J_{rp})$. O valor médio da envoltória, como em Choi & Hoefer [9], é obtida do registro temporal por

$$\begin{aligned} \langle W(I) \rangle &= \langle W(I, J_{rp}) \rangle = \sum_{n=1}^{n_T} \frac{|W^n(I, J_{rp})|}{n_T} \quad \text{ou} \\ \langle W(J) \rangle &= \langle W(I_{rp}, J) \rangle = \sum_{n=1}^{n_T} \frac{|W^n(I_{rp}, J)|}{n_T}, \end{aligned} \quad (3.93)$$

onde W é um componente de campo elétrico ou magnético e n_T é o número total de amostras.

A resposta espectral é obtida a partir o registro temporal colhido no ponto de re-

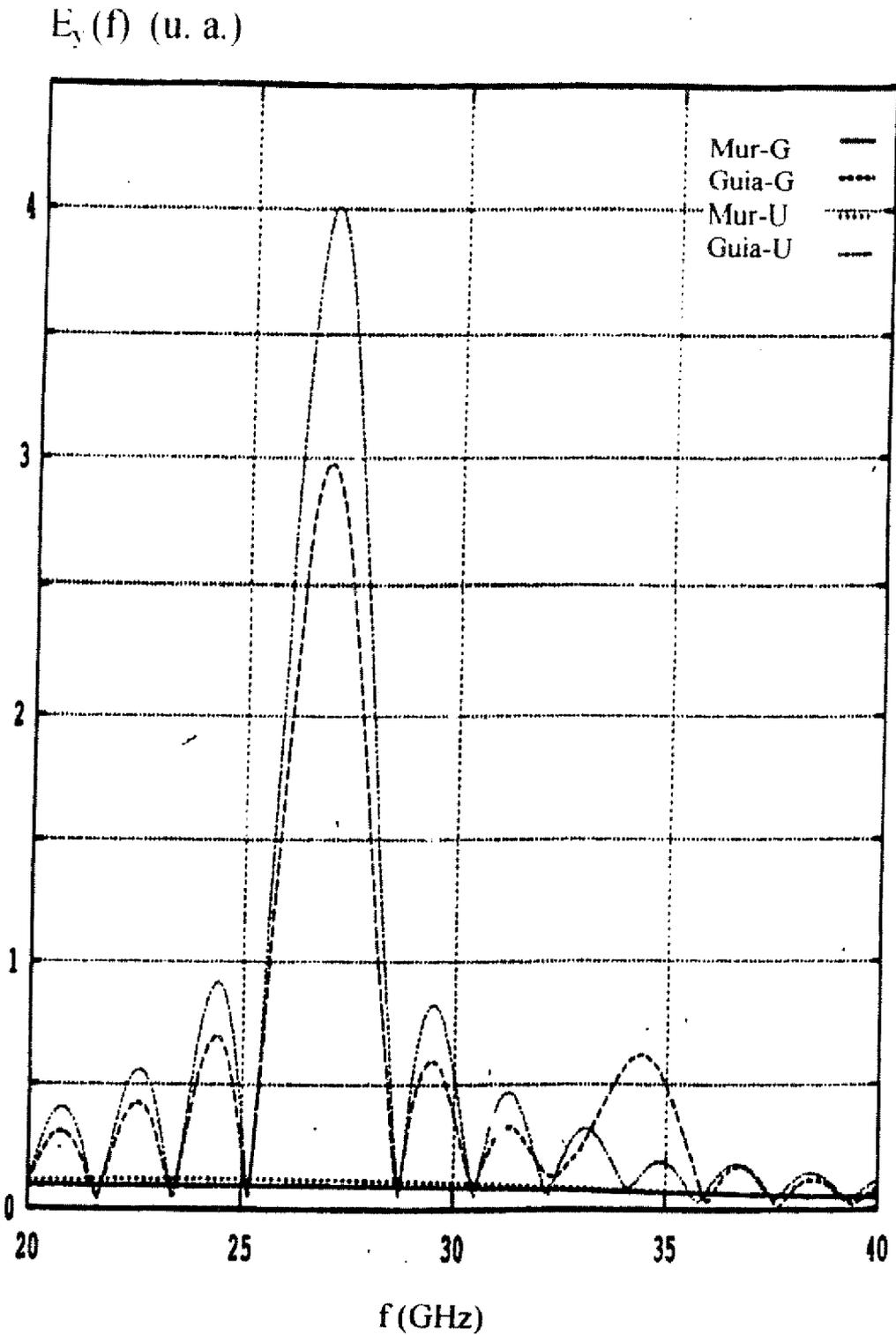


Fig. 3.6 - Espectro da componente de campo E_y para guia de onda retangular com paredes metálicas (Guia) ou absorventes (Mur). A malha é uniforme (U) ou gradual (G).

ferência, $P(I_{rp}, J_{rp})$, e aplicando o método de Filon [10]. Resulta, então, a convolução

$$W'(f) = \mathcal{F} \{W(I_{rp}, J_{rp}, n\delta t)\} \otimes \mathcal{F} \{\Pi_T(t)\},$$

onde $\mathcal{F} \{\cdot\}$ representa a transformada de Fourier e $\Pi_T(t)$ é um *gate* de largura igual à do registro temporal, $T = n_T\delta t$. Para efeito do traçado da curva de dispersão, considera-se apenas o modo que se impõe pela magnitude, isto é, a frequência modal é identificada pelo valor máximo da função $W'(f)$. Os diversos tipos de apresentações dos resultados são expostos a partir do próximo capítulo .

Referências

- [1] K. S. Yee, "Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell's equations in isotropic media", *IEEE Trans. Antennas and Propag.*, vol. AP-14, pp. 302-307, maio 1966.
- [2] R. J. Luebbers, F. Hunsberger e K. Kunz, "A frequency-dependent finite-difference time-domain formulation for transient propagation in plasma ", *IEEE Trans. Antennas and Propagat.* vol. AP-39, pp. 29-34, jan. 1991.
- [3] F. Hunsberger, R. J. Luebbers e K. Kunz, "Finite-difference time-domain analysis of gyrotropic media - I: Magnetized plasma ", *IEEE Trans. Antennas and Propagat.*, vol. AP-40, pp. 1489-1495, dez. 1992.
- [4] K. S. Kunz e R. J. Luebbers, "Finite difference time domain method for electromagnetics ", *CRC Press*, Boca Raton, 1993.
- [5] A. Taflove e M. E. Brodwin, "Numerical solution of steady-state electromagnetic scattering problems using the time-dependent Maxwell's equations", *IEEE Trans. Microwave Theory Tech.*, vol. MTT-23, pp. 623-630, agosto 1975.
- [6] K. L. Shlager, J. G. Maloney, S. L. Ray e A. F. Peterson, "Relative accuracy of several finite-difference time-domain methods in two and three dimensions", *IEEE Trans. Antennas and Propagat.*, vol. AP-41, pp. 1732-1737, dez. 1993.

- [7] A. C. Cangellaris, "Numerical stability and numerical dispersion of a compact 2D-FDTD method used for the dispersion analysis of waveguides", *IEEE Microwave Guided Wave Lett.* vol. 3, pp. 3-5, jan. 1993.
- [8] G. Mur, "Absorbing boundary conditions for the finite-difference approximation of the time-domain electromagnetic-field equations ", *IEEE Trans. Electromag. Compat.*, vol. EMC-23, pp. 377-382, nov. 1981.
- [9] D. H. Choi e W. J. R. Hoefer, "The finite-difference time-domain method and its application to eigenvalue problems", *IEEE Trans. Microwave Theory Tech.*, vol. MTT-34, pp. 1464-1470, dez. 1986.
- [10] P. J. Davies, "Methods of numerical integration", *Academic Press*, Cap.2, p.27, 1975.

Capítulo 4

Guias Dielétricos Contendo Plasma Isotrópico Ópticamente Controlado

4.1 Introdução

Na ausência de campo magnetostático, o plasma induzido pela incidência de luz sobre um material semiconductor comporta-se como um meio dispersivo, porém, isotrópico. Neste caso, a susceptibilidade elétrica, devido à sua simplicidade, permite incorporar os diversos tipos de portadores fotogerados em um semiconductor, sem alterar significativamente a complexidade do problema. Portanto, para as estruturas analisadas neste capítulo, todos os tipos de portadores envolvidos no processo de geração do plasma serão considerados. Também, são incorporados os efeitos devidos aos portadores de impurezas residuais ou intrínsecos. Como mencionado no Cap. 2, esses portadores são: elétrons intrínsecos e fotogerados, lacunas intrínsecas e fotogeradas tipos *light* e *heavy*.

A Fig. 4.1(a) mostra a seção transversal do guia dielétrico no qual o plasma é induzido pelo feixe óptico incidente sobre uma película semicondutora depositada sobre o núcleo do guia. Este núcleo pode ser de material dielétrico ou semiconductor de alta pureza. Neste caso, o *gap* de energia proibida do núcleo tem que ser maior que a energia do feixe óptico incidente. Isto é necessário para que o núcleo preserve sua característica dielétrica, do

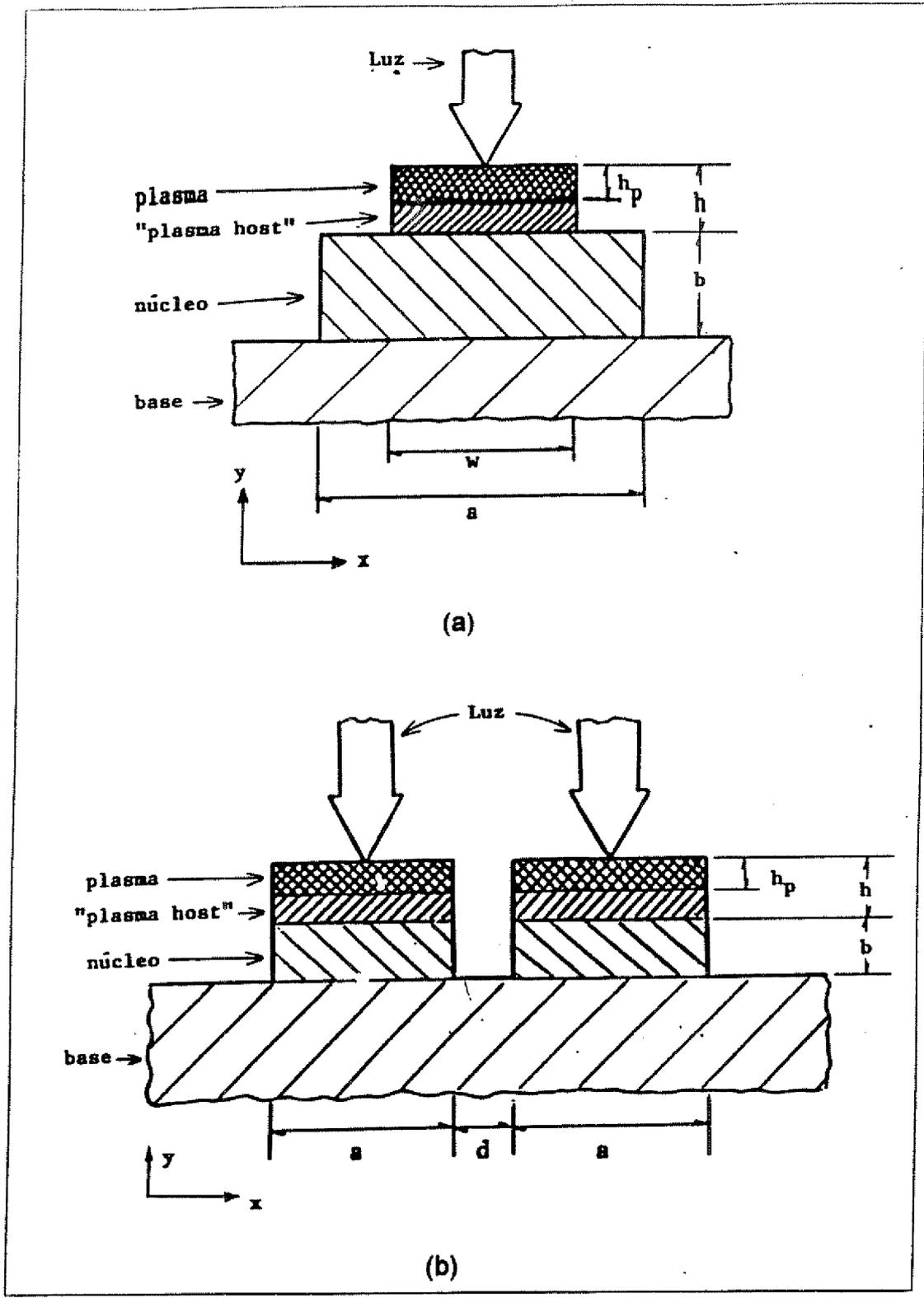


Fig. 4.1 - Guías dieléctricas ópticamente controladas: a) guía singular; b) guías acopladas.

ponto de vista de perdas, para os campos eletromagnéticos na banda milimétrica (campos de RF). Para completar a estrutura, tem-se um substrato dielétrico.

O contraste entre o índice de refração do núcleo e o índice de refração do semicondutor do plasma (*plasma host*) afeta consideravelmente as características de propagação do guia. Por esse motivo, dois casos são tratados separadamente:

- Guia com núcleo dielétrico de alto contraste.
- Guia com núcleo semicondutor de baixo contraste.

Para o segundo caso, uma opção importante para o núcleo do guia, é o uso da liga semicondutora ternária AlGaAs, visto que o *gap* de energia proibida desse material é maior do que a da liga binária GaAs, a qual será utilizada como *plasma host* neste trabalho. A utilização desses materiais deve-se ao amadurecimento da tecnologia de multicamadas, tanto para implementação de filtros e espelhos ópticos como para heteroestruturas usadas na confecção de lasers e LED's, dispositivos de poços quânticos múltiplos (MQW), etc.

Outra estrutura a ser analisada é mostrada na Fig 4.1(b). Trata-se de dois guias acoplados. Os materiais são os mesmos citados acima. Para o caso de estrutura de guias acoplados simétrica, utiliza-se o conceito de paredes elétrica e magnética para modos ímpar e par, respectivamente.

Os testes de convergência são aplicados ao guia de núcleo de baixo contraste, para cinco valores de incremento espacial mínimo, δ_{\min} . O perfil de compressão de malha é, aproximadamente, o mesmo para todos os casos. A convergência é analisada através de três tipos de resultados: curvas de dispersão, resposta espectral e distribuição espacial dos campos.

O guia de baixo contraste foi selecionado para os testes de convergência, porque a interação entre o plasma e o núcleo é maior do que nas outras estruturas. Isto deve-se ao menor grau de confinamento da energia de RF no núcleo do guia. Desta forma, é necessário um melhor refinamento da malha de discretização, no domínio numérico, de modo a obter resultados precisos pelo método FDTD.

4.2 Equações de Diferenças Finitas para Guias de Onda Contendo Plasma Fotoinduzido

A equação (3.24) permite a obtenção explícita da matriz campo magnético, $\overline{H}^{n+\frac{1}{2}}$, na forma compacta. A versão detalhada dessa equação é:

$$\begin{pmatrix} H_x^{n+\frac{1}{2}}(I, J + \frac{1}{2}) \\ H_y^{n+\frac{1}{2}}(I + \frac{1}{2}, J) \\ H_z^{n+\frac{1}{2}}(I + \frac{1}{2}, J + \frac{1}{2}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} H_x^{n-\frac{1}{2}}(I, J + \frac{1}{2}) \\ H_y^{n-\frac{1}{2}}(I + \frac{1}{2}, J) \\ H_z^{n-\frac{1}{2}}(I + \frac{1}{2}, J + \frac{1}{2}) \end{pmatrix} - \overline{R}_e^n(I, J), \quad (4.1)$$

onde $\overline{R}_e^n(I, J)$ é dada pela equação (3.79), a qual é reproduzida aqui:

$$\overline{R}_e^n(I, J) = \begin{pmatrix} +S_y[E_z^n(I, J+1) - E_z^n(I, J)] + S_z E_y^n(I, J + \frac{1}{2}) \\ -S_z E_x^n(I + \frac{1}{2}, J) - S_x[E_z^n(I+1, J) - E_z^n(I, J)] \\ +S_x[E_y^n(I+1, J + \frac{1}{2}) - E_y^n(I, J + \frac{1}{2})] - S_y[E_x^n(I + \frac{1}{2}, J+1) - E_x^n(I + \frac{1}{2}, J)] \end{pmatrix}, \quad (4.2)$$

onde

$$S_x = c\delta t/\delta x(I), S_y = c\delta t/\delta y(J)eS_z = jc\delta t\beta. \quad (4.3)$$

A equação de diferenças finitas para o campo elétrico, no caso mais geral, é dada pela equação (3.37), na forma compacta. Para o caso particular de plasma isotrópico o inverso do tensor $[\epsilon_s(I, J)\overline{I} + \overline{\chi}^o(I, J)]$ reduz-se a um escalar:

$$K^o \equiv K^o(I, J) = [\epsilon_s(I, J) + \chi^o(I, J)]^{-1}. \quad (4.4)$$

Tem-se, então, a equação de diferenças finitas para o campo elétrico:

$$\begin{pmatrix} E_x^{n+1}(I + \frac{1}{2}, J) \\ E_y^{n+1}(I, J + \frac{1}{2}) \\ E_z^{n+1}(I, J) \end{pmatrix} = K \circ \left[\begin{pmatrix} E_x^n(I + \frac{1}{2}, J) \\ E_y^n(I, J + \frac{1}{2}) \\ E_z^n(I, J) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \psi_x^n(I + \frac{1}{2}, J) \\ \psi_y^n(I, J + \frac{1}{2}) \\ \psi_z^n(I, J) \end{pmatrix} + \overline{R}_h^{n+\frac{1}{2}}(I, J) \right], \quad (4.5)$$

onde $\overline{R}_h^{n+\frac{1}{2}}(I, J)$ é dada pela equação (3.76), ou seja:

$$\overline{R}_h^{n+\frac{1}{2}}(I, J) = \begin{pmatrix} +S_y [H_z^{n+\frac{1}{2}}(I+\frac{1}{2}, J+\frac{1}{2}) - H_z^{n+\frac{1}{2}}(I+\frac{1}{2}, J-\frac{1}{2})] + S_z H_y^{n+\frac{1}{2}}(I+\frac{1}{2}, J) \\ -S_z H_x^{n+\frac{1}{2}}(I, J+\frac{1}{2}) - S_x [H_z^{n+\frac{1}{2}}(I+\frac{1}{2}, J+\frac{1}{2}) - H_z^{n+\frac{1}{2}}(I-\frac{1}{2}, J+\frac{1}{2})] \\ +S_x [H_y^{n+\frac{1}{2}}(I+\frac{1}{2}, J) - H_y^{n+\frac{1}{2}}(I-\frac{1}{2}, J)] - S_y [H_x^{n+\frac{1}{2}}(I, J+\frac{1}{2}) - H_x^{n+\frac{1}{2}}(I, J-\frac{1}{2})] \end{pmatrix}. \quad (4.6)$$

Foi mostrado no Cap. 3, através da equação (3.41), que um elemento genérico do tensor susceptibilidade elétrica tem a forma:

$$\chi(t) = \chi_s \left\{ 1 + K_1 e^{-\nu t} + [K_2 \cos(\omega_c t) + K_3 \text{sen}(\omega_c t)] e^{-\nu t} \right\} U(t).$$

Para o plasma isotrópico, a susceptibilidade elétrica adquire caráter escalar, dada pela equação (2.43), isto é, para um dado tipo de portador k :

$$\chi_k(t) = \chi_{s_k} (1 - e^{-\nu_k t}) U(t).$$

Comparando essas duas equações, obtém-se $K_1 = -1$ e $K_2 = K_3 = 0$. Levando estes valores às equações (3.55)-(3.57), resulta a forma matricial para o cálculo iterativo da

convolução diferença, $\bar{\psi}_k(I, J)$:

$$\begin{pmatrix} \psi_{x_k}^n(I + \frac{1}{2}, J) \\ \psi_{y_k}^n(I, J + \frac{1}{2}) \\ \psi_{z_k}^n(I, J) \end{pmatrix} = (\Delta\chi_k^o) \begin{pmatrix} E_x^n(I + \frac{1}{2}, J) \\ E_y^n(I, J + \frac{1}{2}) \\ E_z^n(I, J) \end{pmatrix} + e^{-\nu_k\delta t} \begin{pmatrix} \psi_{x_k}^{n-1}(I + \frac{1}{2}, J) \\ \psi_{y_k}^{n-1}(I, J + \frac{1}{2}) \\ \psi_{z_k}^{n-1}(I, J) \end{pmatrix}, \quad (4.7)$$

onde

$$\Delta\chi_k^o \equiv \Delta\chi_k^o(I, J) = -\frac{\chi_{s_k}(I, J)}{\nu_k(I, J)} [1 - e^{-\nu_k(I, J)\delta t}]^2. \quad (4.8)$$

Aqui foi colocada explicitamente a dependência espacial dos parâmetros do plasma. A convolução total, em combinação com as equações (4.7) e (4.8), é:

$$\begin{pmatrix} \psi_x^n(I + \frac{1}{2}, J) \\ \psi_y^n(I, J + \frac{1}{2}) \\ \psi_z^n(I, J) \end{pmatrix} = \sum_{k=1}^{N_k} \begin{pmatrix} \psi_{x_k}^n(I + \frac{1}{2}, J) \\ \psi_{y_k}^n(I, J + \frac{1}{2}) \\ \psi_{z_k}^n(I, J) \end{pmatrix}. \quad (4.9)$$

O plasma fotoinduzido em um semiconductor tem contribuição de cinco tipos de portadores ($N_k = 5$) cuja lista é repetida mais adiante.

O parâmetro $\chi^o(I, J)$ é obtido a partir da equação geral (3.49) e combinando os efeitos dos diversos tipos de portadores. Resulta, então:

$$\chi^o(I, J) = \sum_{k=1}^{N_k} \chi_{s_k}(I, J) \left\{ \delta t - \frac{[1 - e^{-\nu_k(I, J)\delta t}]}{\nu_k(I, J)} \right\}. \quad (4.10)$$

A condição inicial para as convoluções, dadas pelas equações (4.7) e (4.8), e considerando que a evolução temporal inicia no instante $t = n\delta t|_{n=1}$, é:

$$\bar{\psi}_k^{n-1}|_{k=1, \dots, N_k} = \bar{\psi}_k^o|_{k=1, \dots, N_k} = 0, \quad (4.11)$$

então

$$\bar{\psi}_k^n|_{k=1, \dots, N_k} = \bar{\psi}_k^1|_{k=1, \dots, N_k} = \Delta\chi_k^o E^1. \quad (4.12)$$

Para $n > 1$, utilizam-se as equações (4.7) e (4.8). Isto completa os requisitos básicos para o cálculo dos campos elétrico e magnético.

O algoritmo detalhado para a implementação da técnica FDTD, às estruturas tratadas neste capítulo, é descrito no Apêndice A.

4.3 Guia Contendo Núcleo Dielétrico de Alto Contraste em Relação ao Semicondutor do Plasma (*Plasma host*)

4.3.1 Introdução.

A estrutura a ser analisada neste item é ilustrada na Fig. 4.1(a). Neste guia a luz incide sobre uma camada semicondutora de largura w e altura h , depositada sobre o núcleo do guia, o qual é constituído de dielétrico com índice de refração elevado, com largura a e altura b . Este conjunto pode estar imerso em ar ou depositado sobre um substrato dielétrico, ou mesmo semicondutor.

A camada de plasma opticamente induzida tem espessura h_p . Este parâmetro depende basicamente do material semicondutor, da temperatura e da energia do feixe óptico. A espessura h_p é um valor efetivo, visto que a potência óptica, à medida que penetra no semicondutor, decresce exponencialmente com a distância. Portanto, a altura da camada do *plasma host*, h , deve ser suficiente maior do que h_p , tal que a potência óptica que atinge o núcleo do guia seja pequena. Desta forma, pode-se considerar que o plasma é uniforme com espessura h_p .

Nas simulações utiliza-se a relação $h = 2h_p$. Com isto, cerca de 90% da potência óptica que penetra no semicondutor é absorvida para a geração do plasma.

4.3.2 Graduação da malha do domínio numérico.

A Fig. 4.2 mostra a seção transversal do guia, na qual estão assinalados alguns pontos importantes. O ponto de referência, P , localizado no centro do núcleo do guia, é utilizado para colher os registros temporais das componentes de campo. As frequências modais são obtidas a partir da transformada de Fourier desses registros.

O domínio numérico é limitado por paredes absorventes. As dimensões desse domínio são L_x e L_y , ao longo do eixos x e y , respectivamente.

As distribuições espaciais dos campos, segundo as direções transversais x e y , são colhidas ao longo das linhas tracejadas, cuja interseção se dá no ponto de referência, P (Fig. 4.2). Essas linhas são designadas de eixos de referência horizontal e vertical, respectivamente.

Ao longo do eixo horizontal de referência estão assinalados os pontos 2, 3, 4 e 5. Estes pontos identificam planos de interface entre materiais, isto é, regiões que exigem maior refinamento de malha. Sem dúvida, são nessas interfaces que ocorrem as descontinuidades de algumas componentes de campo. Os pontos 1 e 6, nesse mesmo eixo, identificam os limites do domínio numérico (regiões que exigem menor refinamento).

A Fig. 4.3(a) mostra a evolução do tamanho do incremento espacial (ou largura da célula) δx , ao longo do eixo horizontal de referência. Nos pontos de interface (2 – 5), tem-se o menor valor para a largura da célula, isto é, $\delta x = \delta_{\min}$, iguais para cada lado da interface. Nos planos dos limites numéricos (1 e 6), tem-se o valor máximo para a largura da célula, ou seja, $\delta x = \delta x_{\max}$.

A evolução do tamanho do incremento espacial, δy , ou altura da célula, ao longo do eixo de referência vertical, é mostrado na Fig. 4.3(b). Na região do *plasma host*, fez-se uma discretização uniforme, com $\delta y = \delta_{\min}$, porque a altura do plasma tem a menor dimensão dentre os blocos que compõem a estrutura. Além disso, o *plasma host* contém a interface semiconductor-plasma. Nos extremos do domínio numérico (1 e 5), tem-se $\delta y = \delta y_{\max}$.

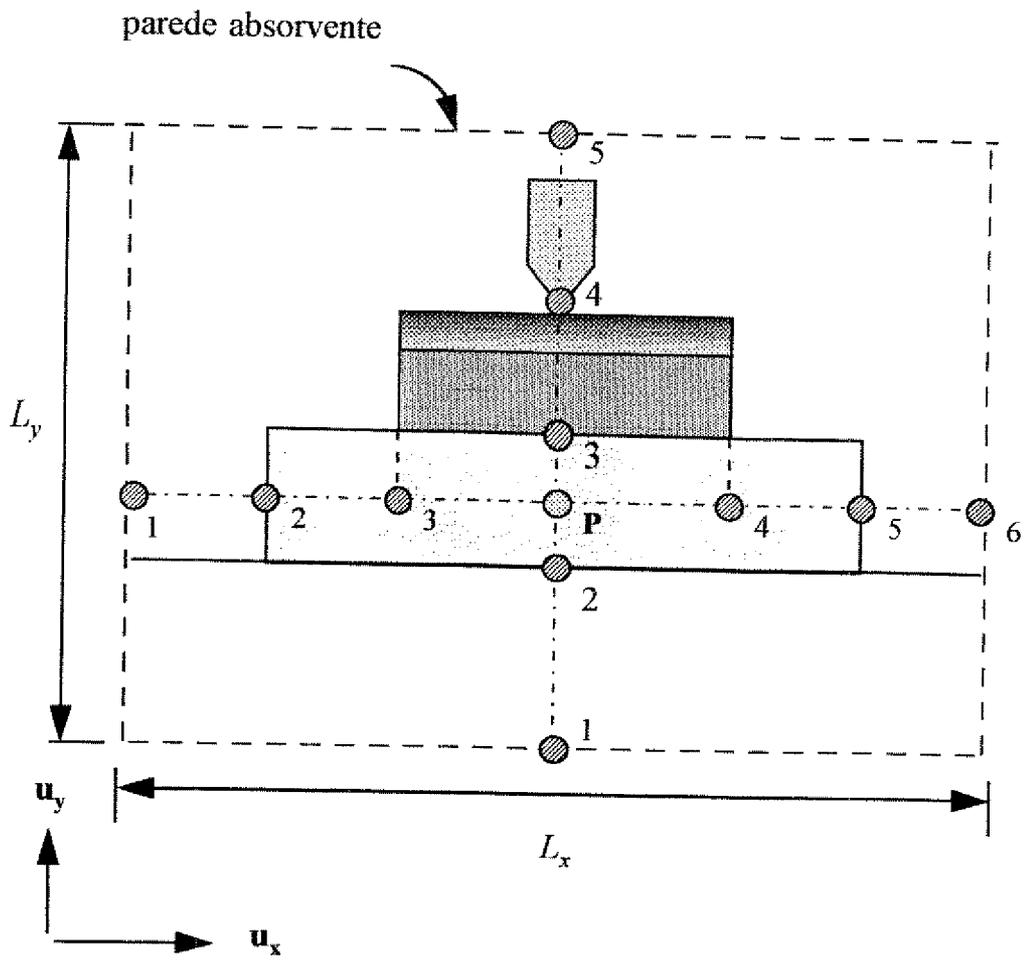


Fig. 4.2 - Seção transversal de guia opticamente controlado. Definições de: eixos de referência, limites do domínio numérico e planos de interface entre materiais dos quais o guia é constituído.

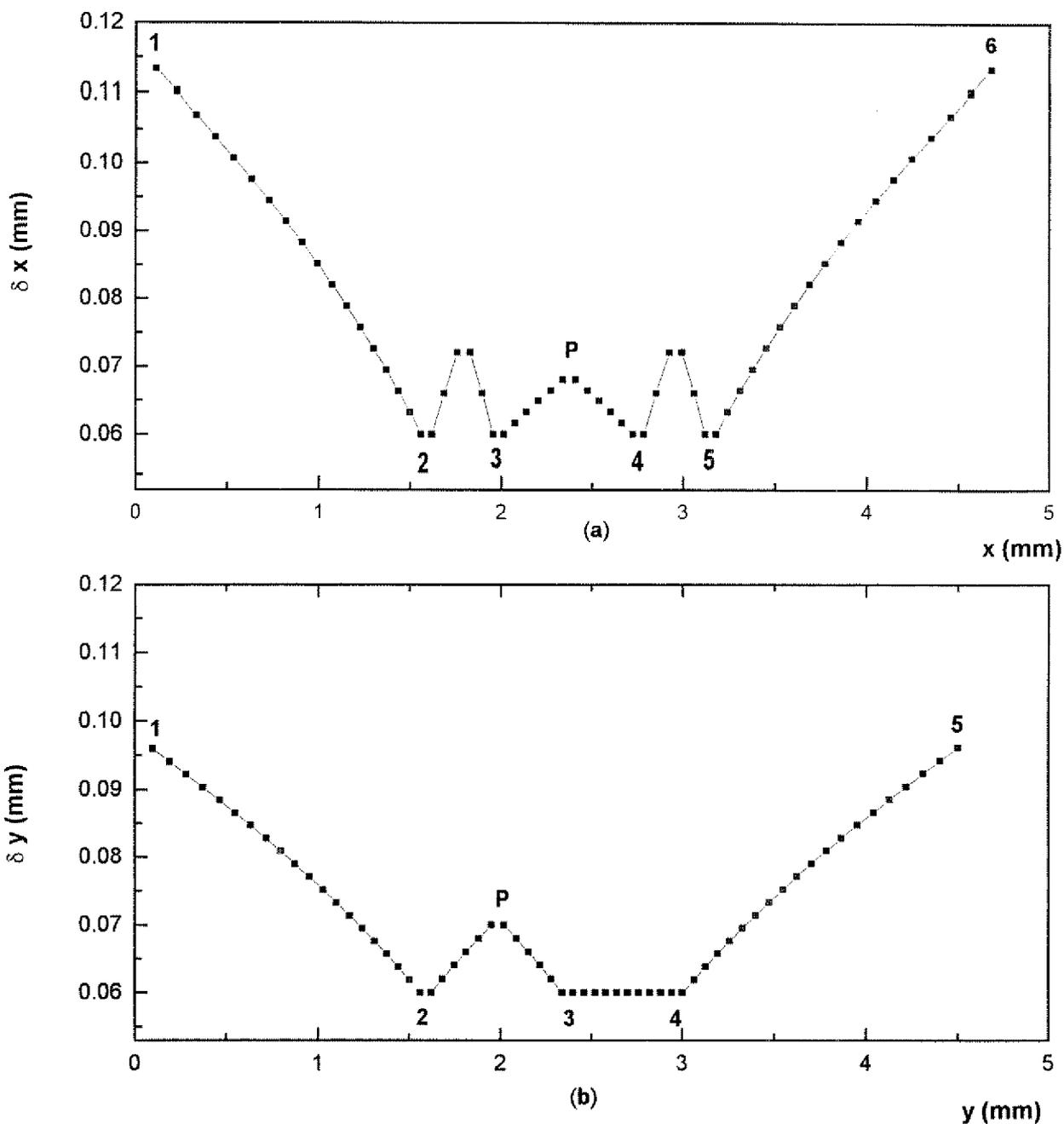


Fig. 4.3 - Graduação da malha do domínio numérico: (a) evolução da largura das células ao longo do eixo de horizontal de referência; (b) evolução da altura de célula ao longo do eixo de referência vertical.

4.3.3 Resultados da simulação.

Os parâmetros para GaAs, em 300 K, com leve dopagem tipo p , são os mesmos de Shen *et al.* [1]. Na Tabela 4.1 parte desses valores são reproduzidos.

Tabela 4.1 - Parâmetros do GaAs na temperatura de 300 K.

k	tipo de portador	m^*/m_o	$\mu_k \left(\frac{cm^2}{V.s} \right)$	$n_k (cm^{-3})$
1	lacunas intrínsecas	0,713	400	$1,1 \times 10^7$
2	elétrons intrínsecos	0,070	8500	$4,6 \times 10^5$
3	elétrons fotoinduzidos	0,070	8500	$N = 10^{12} - 10^{17}$
4	lacunas fotoinduzidas <i>light</i>	0,120	400	$0,13N$
5	lacunas fotoinduzidas <i>heavy</i>	0,680	400	$0,87N$

Onde m_k^* , μ_k e n_k são a massa efetiva, a mobilidade e a densidade do portador k , respectivamente. A densidade de elétrons fotoinduzidos, N , é proporcional à potência óptica incidente. O parâmetro $m_o = 9,11 \times 10^{-31} kg$ é a massa do elétron *em repouso*. A constante dielétrica do semicondutor, sem levar em conta os portadores livres (componente estática), é $\epsilon_s = 10,9$.

Para a geometria da estrutura da Fig. 4.1(a) utilizou-se os seguintes parâmetros:

- espessura do plasma, $h_p = 300 \mu m$,
- altura da região semicondutora (*plasma host*), $h = 600 \mu m$,
- largura da região semicondutora, $w = 768 \mu m$,
- altura do núcleo, $b = 780 \mu m$,
- largura do núcleo, $a = 1560 \mu m$.

A constante dielétrica do núcleo é igual a 29,1 [1]. Considerou-se a estrutura imersa em ar. Os parâmetros adicionais, necessários à implementação do método FDTD, são:

- largura do domínio numérico, $L_x = 4,68$ mm,
- altura do domínio numérico, $L_y = 2,94$ mm,
- dimensão mínima da célula de discretização espacial, $\delta_{\min} = 60 \mu\text{m}$,
- número de iterações no tempo $n_T = 2001$,
- largura (rms) do pulso de excitação (segundo direção x), $\sigma_x = 500 \mu\text{m}$,
- altura (rms) do pulso de excitação (segundo direção y), $\sigma_y = 250 \mu\text{m}$,
- largura espectral (rms) do pulso de excitação, $B_f = 50$ e 120 GHz,
- número de células segundo direção x , $n_x = 60$,
- número de células segundo direção y , $n_y = 42$.

O tempo de CPU requerido, t_{CPU} , foi cerca de 9,3 minutos (*IBM - 9021*), para cada valor da constante de fase β .

O valor de δ_{\min} e os detalhes de graduação de malha foram escolhidos a partir de testes de convergência, a serem descritos na Seção 4.5.

Dentre as 2520 células do domínio numérico, 120 contém plasma. Para o caso de 2001 iterações temporais, e tendo em vista que cada célula de plasma requer 15 elementos de convolução, chega-se a um total de $3,2 \times 10^6$ convoluções! Isto tudo para um único valor da constante de propagação, β . Tipicamente, são necessários de 10 a 15 valores de β nas características de dispersão.

Desses números, conclui-se que o cálculo iterativo das convoluções é estratégico para viabilizar a aplicação do método FDTD nessas estruturas complexas, utilizando-se recursos computacionais não muito exigentes (*workstations*, por exemplo).

A seguir, serão analisados os modos dominantes, com excitação do tipo E_{11}^y ou E_{11}^x gaussianos.

A Fig. 4.4(a) apresenta a evolução temporal da componente de campo E_y , para dois valores da densidade de elétrons fotoinduzidos: $N = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ (linha mais densa) e $N = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$. É nesta faixa de valores de densidade, aproximadamente, que o efeito do plasma se manifesta sobre os campos de RF, para estruturas e materiais tratados neste trabalho. A constante de propagação, β , é igual a 4 rad/mm . Para o caso de plasma intenso ($N = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$), no qual o efeito do plasma sobre sinais de RF satura, o campo sofre menor atenuação do que para plasma com baixa densidade ($N = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$). Isto deve-se ao efeito especular do plasma intenso, isto é, o plasma reflete fortemente o sinal de RF, como um espelho.

As transformadas de Fourier, para ambos os registros temporais, são mostradas na Fig. 4.4(b). Nesta figura também é incorporado o espectro para o caso de plasma residual, com $N = 10^{12} \text{ cm}^{-3}$. O plasma residual não afeta a propagação dos campos de RF. Observe, na Fig. 4.4(b), que o plasma com baixa densidade (linha mais densa) praticamente não apresenta alteração na frequência modal, indicada por setas, em relação ao plasma residual (linha pontilhada), apesar da atenuação significativa observada no registro temporal. Isto é, para um aumento gradual da densidade do plasma, primeiramente se observa o efeito sobre a atenuação do sinal; o efeito sobre a fase só é significativo para densidades maiores. Este tipo de comportamento foi observado por Lee *et al.* [2], os quais analisaram um guia fotocontrolado, constituído de uma lâmina de silício. A variação da frequência modal para o plasma intenso deve-se ao efeito especular. Este efeito pode aumentar consideravelmente a altura efetiva do guia (*efeito guia imagem*), e depende, fundamentalmente, da polarização e da frequência do modo propagante, e do contraste do índice de refração entre *plasma host* e núcleo do guia.

As distribuições espaciais da componente de campo elétrico, E_y , para densidades baixa ($N=10^{15} \text{ cm}^{-3}$) e alta ($N=10^{17} \text{ cm}^{-3}$) são mostradas na Fig. 4.5(a). O eixo das abcissas fornece a distância, em mm , ao longo do eixo horizontal de referência, tendo, como origem, o limite do domínio numérico. O eixo das ordenadas fornece os valores da componente E_y , em escala arbitrária. Nesta situação, a componente E_y não apresenta

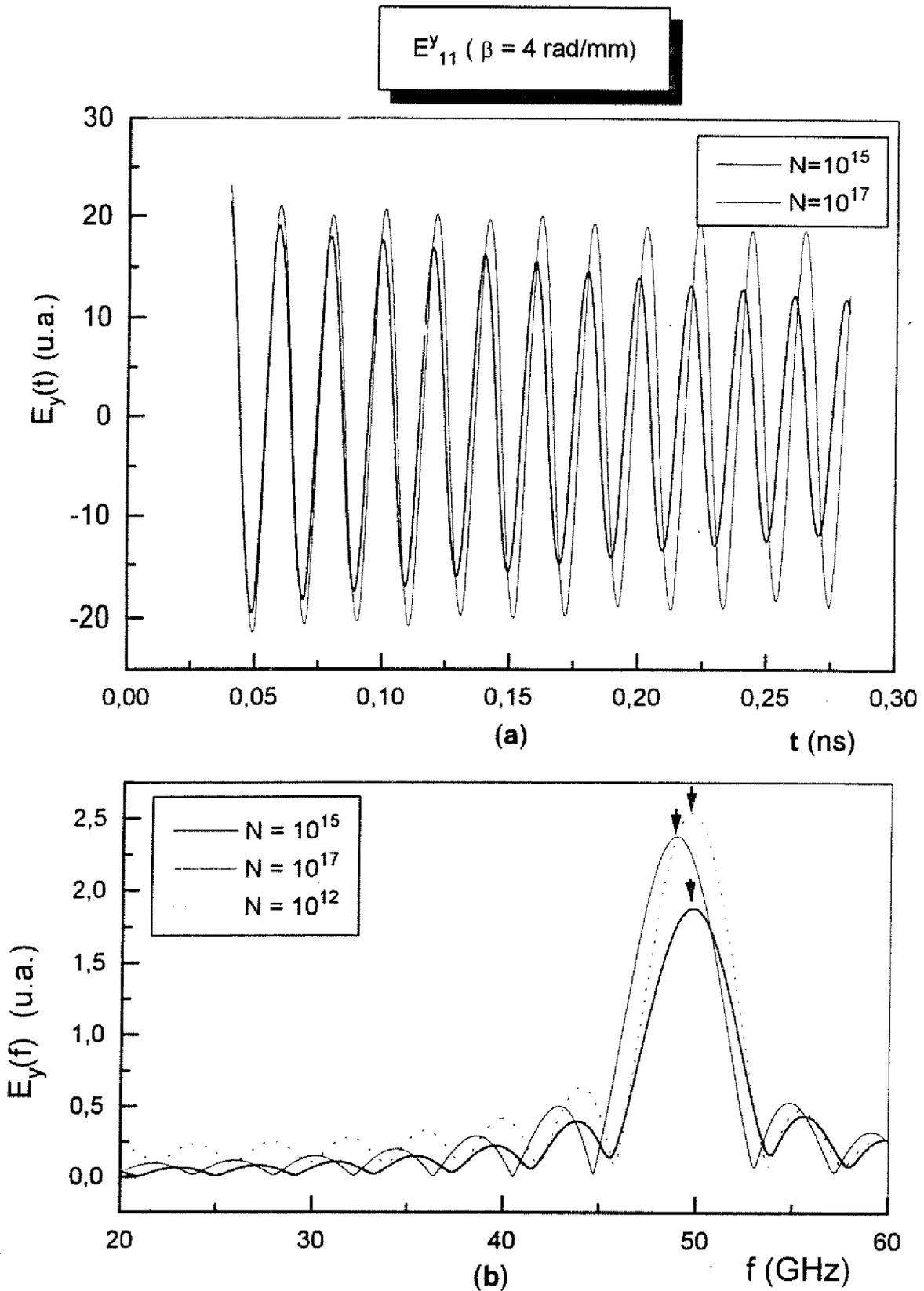


Fig. 4.4 - Comportamento do campo E_y , para alguns valores de densidade do plasma induzido, N , em cm^{-3} : a) evolução temporal; b) espectros correspondentes aos registros em (a) e o espectro para o plasma residual.

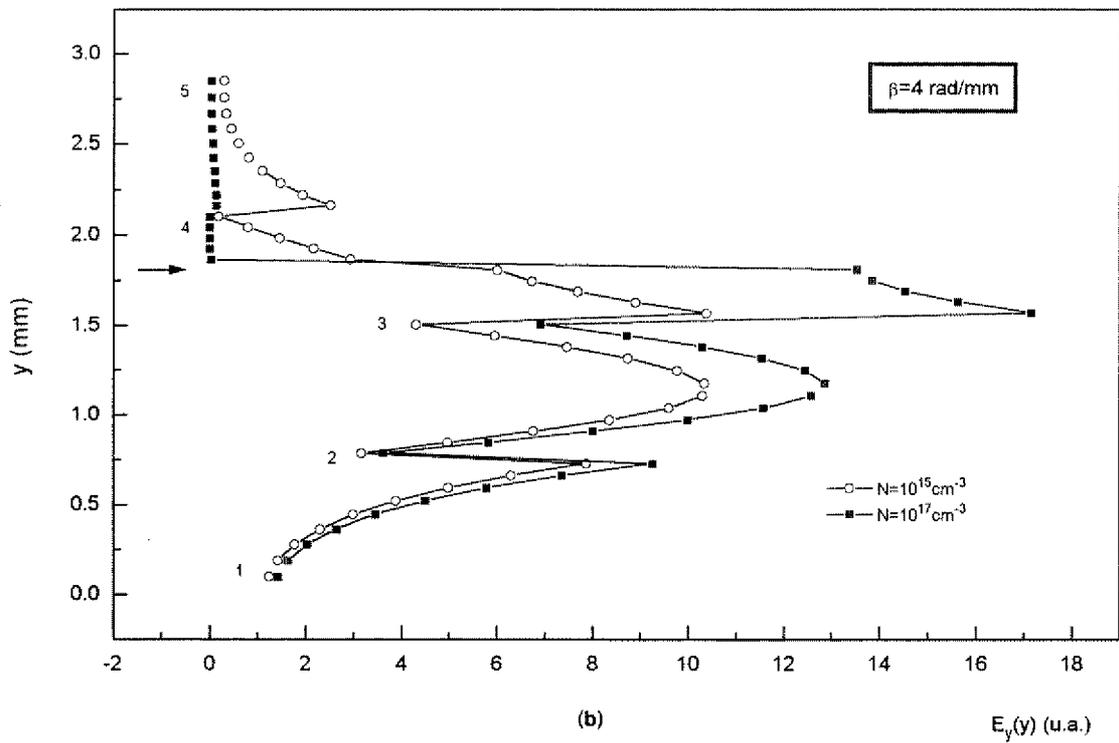
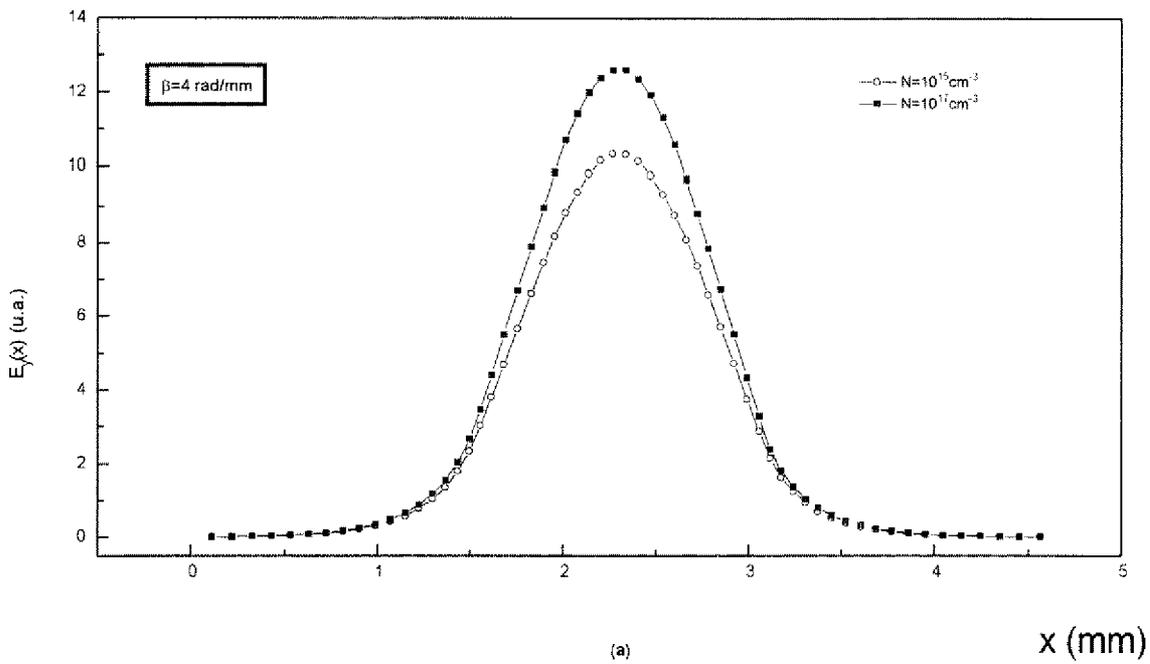


Fig. 4.5 - Distribuição espacial da componente de campo elétrico, E_y ao longo dos eixos de referência, para dois valores de densidade do plasma: a) E_y versus x ; b) y (eixo vertical) versus E_y .

descontinuidades nas interfaces do núcleo.

A Fig. 4.5(b) mostra o comportamento da componente E_y ao longo do eixo de referência vertical. Nessa figura, entretanto, o eixo das abcissas fornece os valores de campo, enquanto que o eixo das ordenadas representa a distância vertical, a partir o limite inferior do domínio numérico. Este procedimento tem a finalidade de apresentar o comportamento do campo de uma forma mais natural, quando acompanhado com a estrutura da Fig. 4.2.

Em torno de $y = 2,0\text{ mm}$, da Fig. 4.5(b), observa-se uma diferença importante entre os modos dominantes para os dois valores de densidade de plasma. Para $N = 10^{17}\text{ cm}^{-3}$, o modo praticamente não penetra no plasma, cuja interface é indicada pela seta. Isto é, o campo é praticamente curto-circuitado pelo plasma. Para $N = 10^{15}\text{ cm}^{-3}$, entretanto, o campo penetra no plasma e com isto, interage mais fortemente. Como consequência, o modo sofre maior atenuação. As demais descontinuidades observadas na distribuição espacial são devidas às interfaces entre materiais.

Uma forma mais abrangente de visualizar os efeitos do plasma sobre a propagação dos modos é através das características de dispersão. A Fig. 4.6 mostra o comportamento do índice de refração efetivo, $n_{eff} = \beta/k_o$, como função da frequência modal, para os modos dominantes E_{11}^y e E_{11}^x , e para diversos valores da densidade do plasma, N . Foram atribuídos os seguintes valores para β , em rad/mm : 1,7; 2; 3; 4;...; 14 . Para valores de β abaixo de 1,7 rad/mm , o modo dominante é fortemente atenuado. Neste caso, os modos superiores afetam os dados obtidos para o modo dominante.

Como pode ser visto nessa figura, o plasma afeta a propagação dos modos em frequências abaixo de 60 GHz, aproximadamente. O efeito sobre E_{11}^x é pequeno, porque o plasma apenas diminui ligeiramente a altura do guia, como será explicado mais adiante. Entretanto, o efeito sobre E_{11}^y , para plasma de alta densidade ($N \approx 10^{16}$ a 10^{17} cm^{-3}), é muito mais pronunciado, por causa do efeito especular do plasma sobre esse modo.

A Fig 4.6 também permite observar que a operação em modo único de propagação é limitado, por causa do cruzamento das características de propagação dos modo E_{11}^x e E_{11}^y

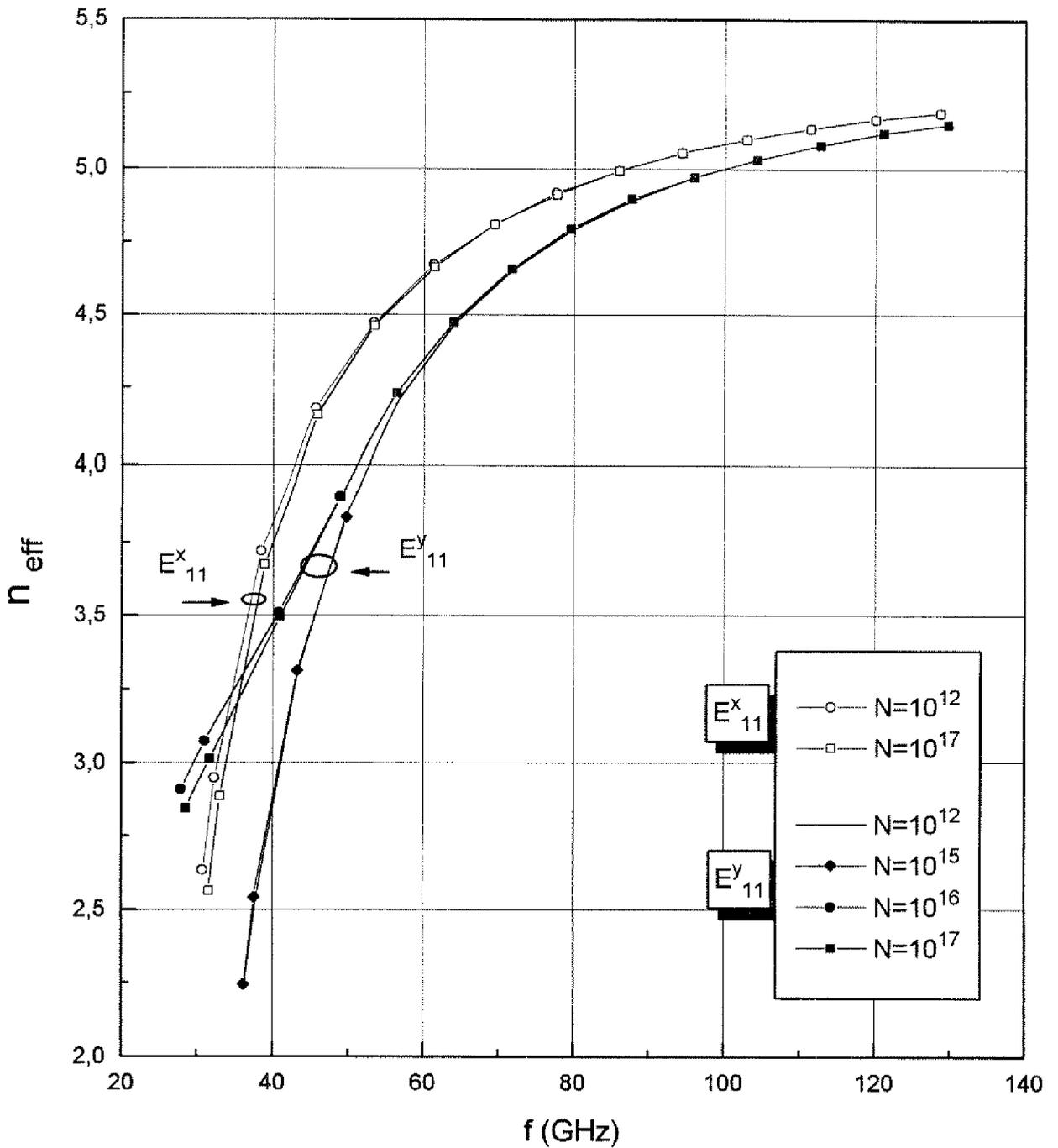


Fig. 4.6 - Características de fase dos modos dominantes, E^x_{11} e E^y_{11} , para guia com núcleo de alto contraste. Os resultados são apresentados para diversos valores da densidade do plasma, N , em cm^{-3} .

nas proximidades das frequências de corte.

4.4 Guia Contendo Núcleo Semicondutor com Índice de Refração de Baixo Contraste

A forma geométrica do guia com índice de refração de baixo contraste é a mesma do caso estudado no item anterior, exceto que o material que constitui o núcleo é uma liga semicondutora, por exemplo, tipo AlGaAs de alta pureza. Esta liga tem índice de refração ligeiramente menor que do *plasma host*, GaAs. O importante é que esse material tem *gap* de energia proibida maior do que o GaAs. Desta forma, é possível controlar o guia opticamente, sem induzir plasma no núcleo. Para tanto, é necessário que a energia do feixe, hf_{opt} , seja tal que:

$$\mathcal{E}_g|_{GaAs} < hf_{opt} < \mathcal{E}_g|_{AlGaAs}$$

onde \mathcal{E}_g é o *gap* de energia proibida.

As dimensões do guia, assim como alguns outros dados usados na presente simulação, são os seguintes:

- espessura do plasma, $h_p = 200 \mu m$,
- altura da região semicondutora (*plasma host*), $h = 400 \mu m$,
- largura da região semicondutora, $w = 512 \mu m$,
- altura do núcleo, $b = 520 \mu m$,
- largura do núcleo, $a = 1040 \mu m$.

A constante dielétrica do núcleo é igual a 10,0 e do plasma host 10,9 [1]. Considerou-se a estrutura imersa em ar. Os parâmetros adicionais são:

- largura do domínio numérico, $L_x = 3,12$ mm,
- altura do domínio numérico, $L_y = 2,76$ mm,
- dimensão mínima da célula de discretização espacial, $\delta_{\min} = 40$ μm ,
- número de iterações no tempo $n_T = 1001$ ou 1501 ,
- largura (rms) do pulso de excitação (segundo direção x), $\sigma_x = 340$ μm ,
- altura (rms) do pulso de excitação (segundo direção y), $\sigma_y = 170$ μm ,
- largura espectral (rms) do pulso de excitação, $B_f = 120$ e 180 GHz,
- número de células segundo direção x , $n_x = 56$,
- número de células segundo direção y , $n_y = 50$.

O tempo de CPU (IBM-9021) necessário foi , $t_{CPU} \approx 9,2$ minutos, para cada valor de β .

Para melhor esclarecer o efeito diferenciado do plasma sobre os modos E_{11}^y e E_{11}^x , utiliza-se a distribuição espacial ao longo do eixo vertical de referência, para esses modos, com valores extremos da densidade de plasma. A Fig. 4.7 mostra essa situação para plasmas de alta densidade e residual, para ambos os modos. As linhas assinaladas com símbolos em negrito correspondem ao plasma de alta densidade, enquanto que as linhas finas representam o plasma residual. Como pode ser observado dessa figura, a componente de campo E_y do modo E_{11}^y é curtocircuitada pelo plasma, a partir de seu valor de pico. Isto implica que a estrutura equivalente é uma guia dielétrica (sem plasma) simétrica em relação ao plano do espelho (interface do plasma); conseqüentemente, a frequência modal diminui, para um dado valor da constante de propagação do modo. Quanto ao modo E_{11}^x , como pode ser observado da distribuição espacial, há uma pequena diminuição na altura efetiva do guia original. É como se uma porção, aproximadamente igual à espessura

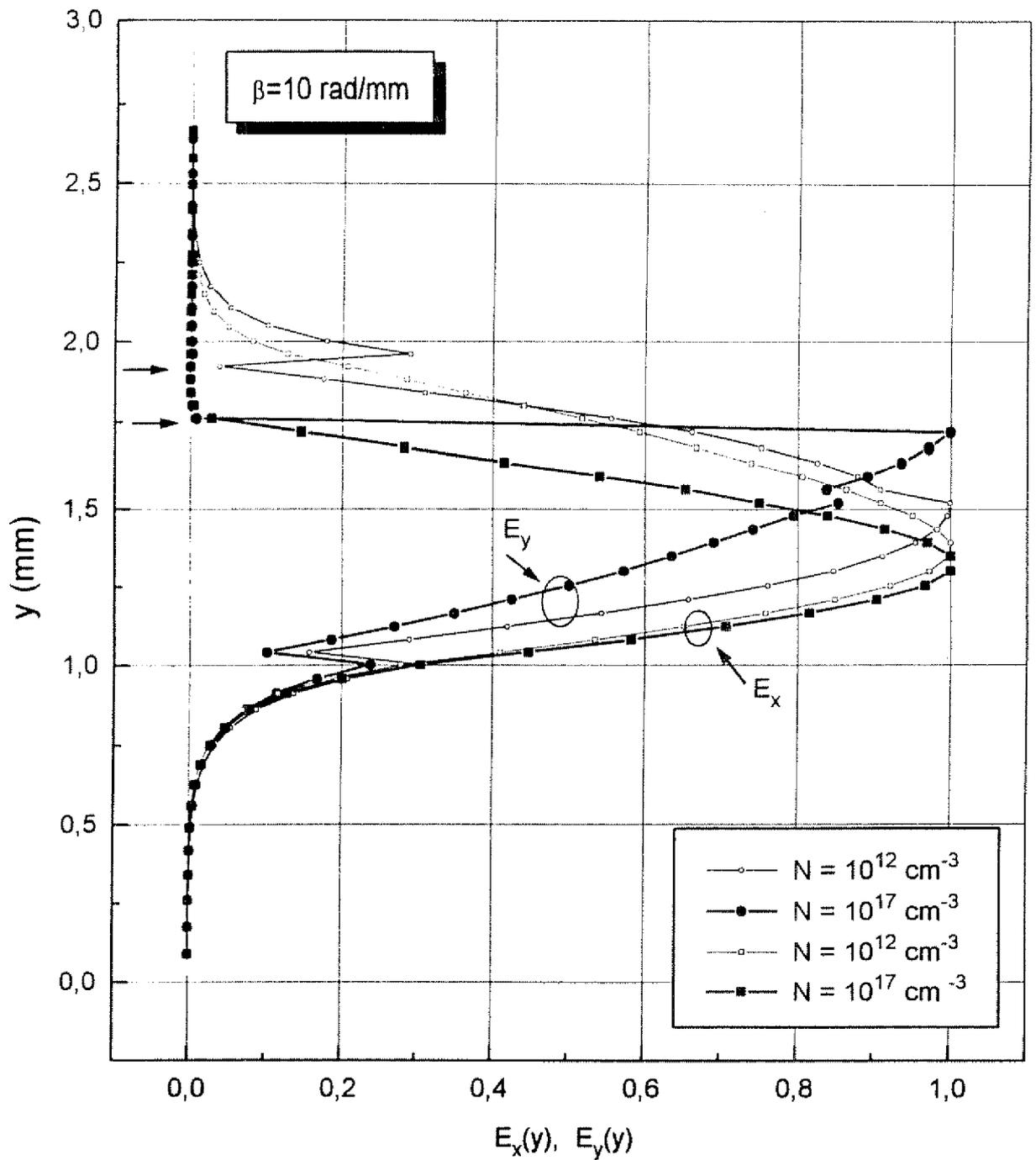


Fig. 4.7 - Distribuição espacial das componentes de campo elétrico, para os modos dominantes E_{11}^x e E_{11}^y , ao longo do eixo vertical de referência. São considerados plasmas residual ($N=10^{12} \text{ cm}^{-3}$) e de alta densidade ($N=10^{17} \text{ cm}^{-3}$).

do plasma, indicada pelas setas, fosse retirada do guia. Isto provoca um aumento na frequência modal, para um dado valor da constante de propagação do modo.

O grau com que esses efeitos afetam a propagação dos modos é melhor observado através das características de dispersão do guia, para os valores extremos da densidade do plasma. A Fig. 4.8 expõe isso com bastante clareza. Nesta figura as características de dispersão, em termos de índice de refração efetivo ($n_{eff} = \beta/k_0$) versus frequência, mostram que, para o modo E_{11}^y , o efeito é muito pronunciado, principalmente nas baixas frequências. Entretanto, os efeitos sobre o modo E_{11}^x são modestos.

Um aspecto importante, identificado nessa figura, é que o modo E_{11}^y pode operar sem a interferência do modo E_{11}^x , em contraste com o guia de núcleo com índice de refração elevado. Isto é, a figura sugere uma faixa ampla para propagação em modo único, a qual pode ser controlada pelo feixe óptico do plasma intenso. Alternativamente, esses resultados mostram a possibilidade do controle efetivo de fase do guia de forma dinâmica através de feixe óptico, sem a interferência de outros modos. Entretanto, é necessário usar materiais com alto grau de pureza na confecção do guia, a fim de reduzir a atenuação do sinal de RF a níveis aceitáveis. Por exemplo, o uso de semicondutores de alta qualidade é fundamental para reduzir as perdas no plasma.

Uma análise mais detida, feita através das características de dispersão do modo E_{11}^y , para diversos valores da densidade do plasma, N , revela alguns efeitos interessantes, os quais são comuns, com maior ou menor grau, aos guias estudados neste capítulo.

A Fig. 4.9 apresenta uma família dessas curvas, para valores da densidade de plasma, N , desde o plasma residual (o qual tomaremos como referência, pelo fato de não afetar os campos de RF), com $N = 10^{12} \text{ cm}^{-3}$, até plasma intenso, passando por diversos valores intermediários. O plasma de baixa densidade, com $N = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$, identificado por losangos, quase não apresenta diferença em sua característica, quando comparado com o plasma de referência.

A característica de fase para $N = 5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ (curva com círculos cheios) mostra a transição gradual entre os dois efeitos predominantes na propagação no guia. Para

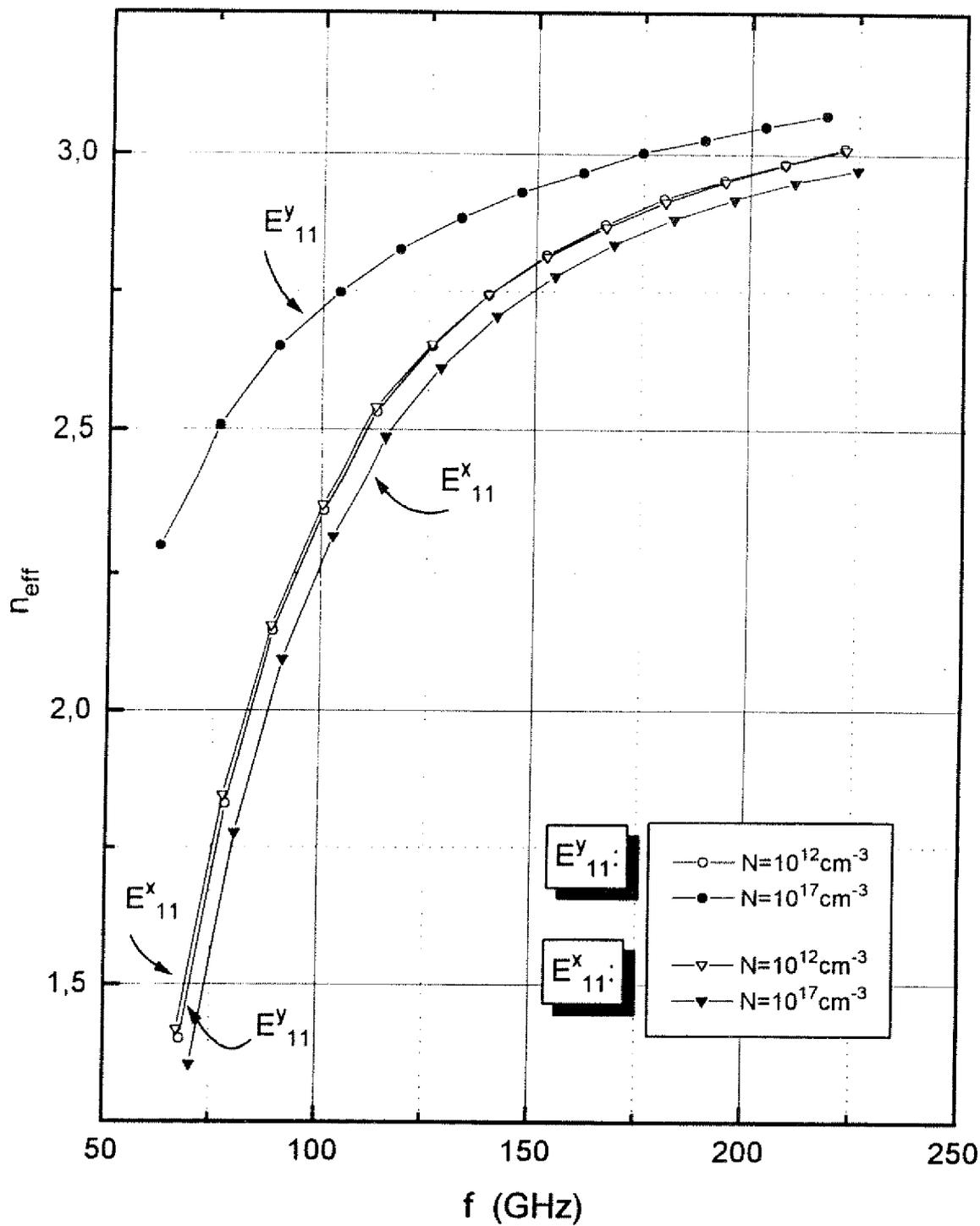


Fig. 4.8 - Características de fase dos modos E^y_{11} e E^x_{11} , para valores extremos da densidade do plasma, N .

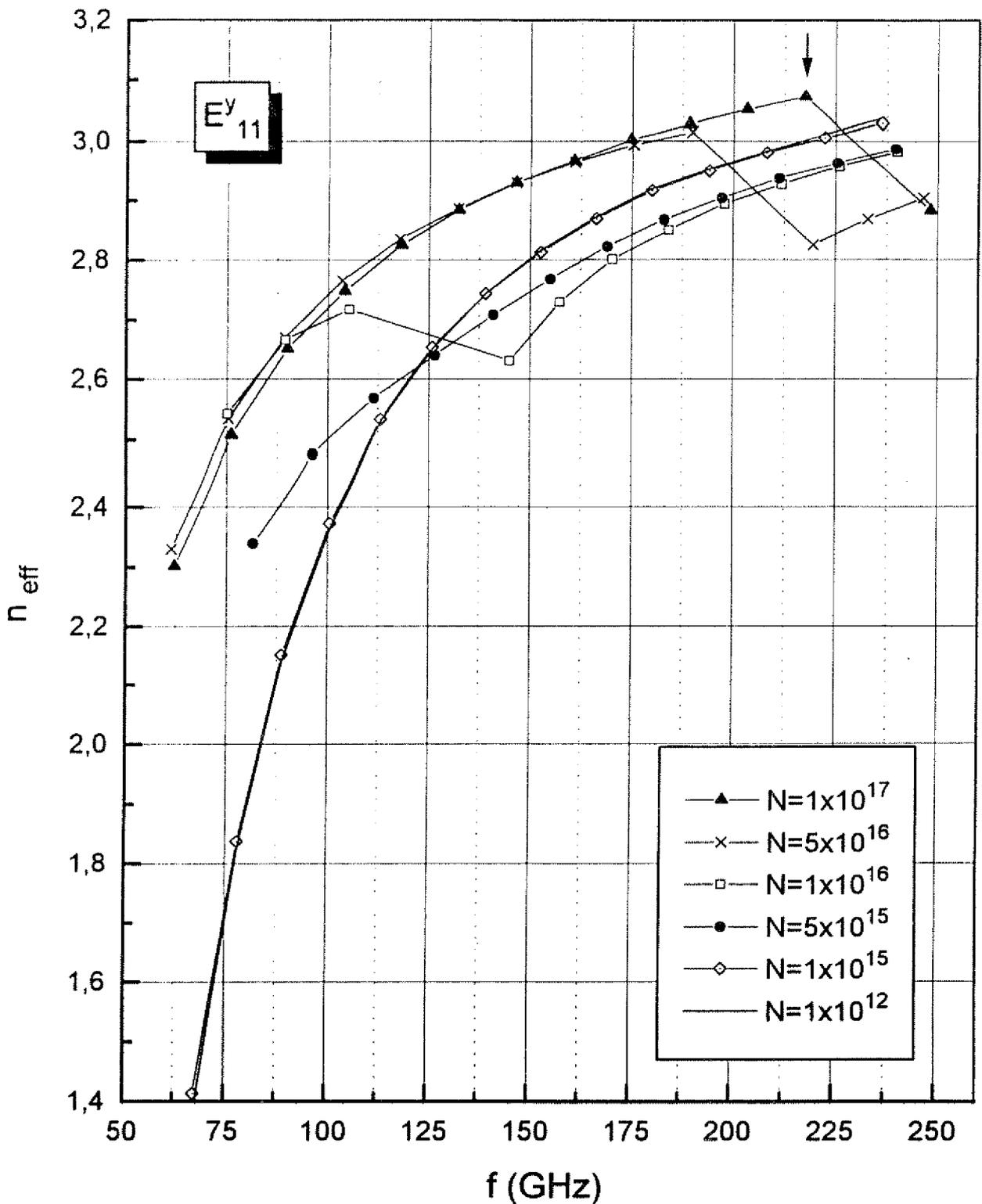


Fig. 4.9 - Características de dispersão do modo E_{11}^y , parametrizadas em termos da densidade do plasma, N (cm^{-3}).

freqüências abaixo de cerca de 125 GHz o efeito especular predomina. Acima desse valor os campos passam a interagir com mais intensidade com o plasma. O efeito disto é a redução da altura efetiva do guia, com o conseqüente aumento na freqüência modal. De maneira similar à propagação de ondas eletromagnéticas na ionosfera, quanto maior a densidade do plasma, maior será a freqüência de transição entre os dois efeitos.

O aumento da densidade do plasma também provoca transição mais brusca. Por exemplo, para o plasma com densidade $N = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, com curva característica sinalizada com quadrados na Fig. 4.9, a transição se processa numa faixa de freqüência relativamente pequena. Para o plasma mais intenso, com $N = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ (curva marcada por triângulos), a transição é mais brusca ainda e ocorre em torno de uma freqüência bem mais alta (aproximadamente 230 GHz). Nesses casos, a transição se processa através de uma disputa de modos provocados por esses dois efeitos; desta forma, os modos propagam-se simultaneamente em uma faixa de freqüência até que um deles desapareça. Este efeito não está explícito na Fig. 4.9. Aqui apenas o modo que se impõe pela sua magnitude é mostrado.

Para mostrar esse e outros efeitos, a Fig. 4.10 apresenta os registros temporais da componente E_y , para três valores da densidade de plasma e $\beta = 10 \text{ rad/mm}$. Para a densidade $N = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, representado pela curva de espessura média, há claramente uma forte composição ou disputa de modos. Esta situação, como indicada pela seta na Fig. 4.9, situa-se na região de transição de modos.

Para a densidade $N = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ (curva mais espessa), não há disputa de modo, pois a freqüência de transição encontra-se bem mais abaixo. Há, entretanto, uma forte atenuação do modo. Em geral, a atenuação do modo é sempre mais intensa para plasmas com densidades intermediárias. Isto deve-se à transição mais gradual e, conseqüentemente, à maior interação com o plasma. Próximo ao corte, entretanto, a interação é provocada pelo menor grau de confinamento da energia de RF no núcleo do guia.

A Fig. 4.10 apresenta, também, o registro temporal para o plasma de baixa densidade

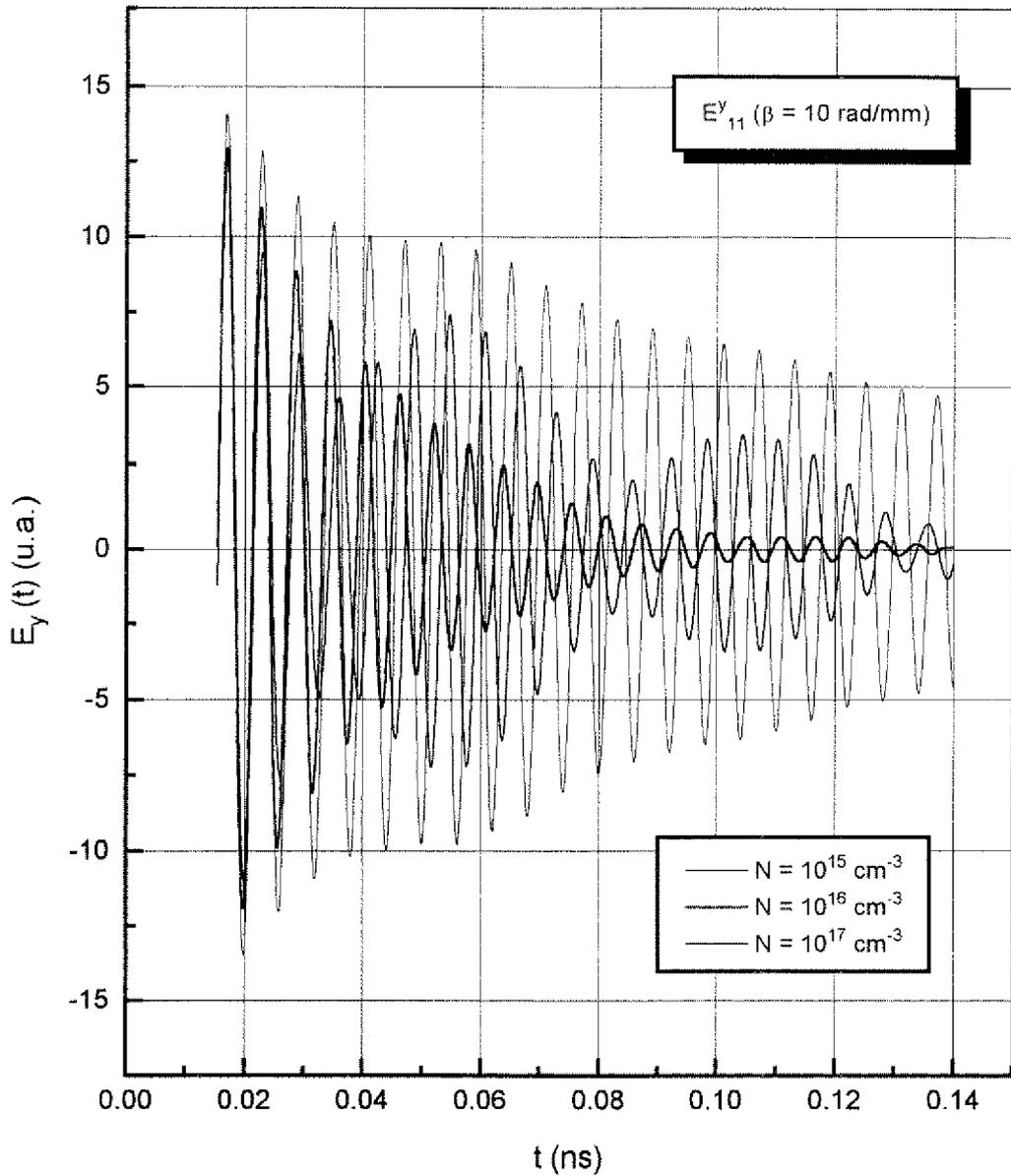


Fig. 4.10 - Evolução da componente de campo E_y para três densidades de plasma. São observados três efeitos:

- (1) alta atenuação ($N = 10^{16}$);
- (2) atenuação moderada com disputa de modos ($N = 10^{17}$);
- (3) baixa atenuação, com leve combinação modal ($N = 10^{15}$).

(curva com traço mais fino), com $N = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$. Neste caso a leve interferência observada através de sua envoltória, deve-se à presença de modo superior do guia, e não de disputa modal.

4.5 Teste de Convergência.

4.5.1 Introdução

O guia de onda analisado no item anterior, o qual contém um núcleo com baixo contraste de índice de refração relativo ao *plasma host*, será considerado como protótipo para os testes de convergência. Nesse tipo de guia os campos de RF possuem um maior grau de acoplamento com o plasma. Esta situação exige um maior refinamento de malha a fim de que o método FDTD apresente resultados aceitáveis.

Os testes de convergência serão feitos para diferentes densidades de plasma e considerando cinco graus de refinamento de malha. Para analisar a convergência, serão considerados três tipos de informações, a saber:

- Características de dispersão.
- Distribuição espacial do campo elétrico ao longo do eixo de referência, no qual ocorrem as descontinuidades.
- Resposta espectral.

Para obter os diversos graus de refinamento espacial, é utilizado o método de graduação de malha, como explicado no item 4.3.2. O domínio numérico é dividido em diversas regiões, com diferentes graus de compressão de células. Essas regiões são delimitadas utilizando-se os eixos horizontal e vertical de referência. A segmentação é apresentada na Tabela 4.2 .

Esta tabela deve ser interpretada de acordo com as Figs. 4.2 e 4.3. O parâmetro x_{ij} representa a distância entre os pontos i e j do eixo horizontal de referência, enquanto

que L_x é a largura total do domínio numérico. Analogamente, tem-se os parâmetros y_{ij} e L_y , respectivamente, para o eixo vertical de referência. Esses valores estão normalizados em relação à altura da camada de *plasma host*, h .

Tabela 4.2 - Segmentação do domínio numérico.

x_{12}	x_{23}	x_{34}	x_{45}	x_{56}	L_x	y_{12}	y_{23}	y_{34}	y_{45}	L_y
2,60	0,66	1,28	0,66	2,60	7,80	2,60	1,30	1,00	2,00	6,90

O número de células atribuídas a cada segmento, para cinco tipos de grau de refinamento, são dados na Tabela 4.3. As letras **a**, **b**, **c**, **d** e **e** designam as diversas opções.

Tabela 4.3 - Distribuição das células no domínio segmentado

	$n_{x_{12}}$	$n_{x_{23}}$	$n_{x_{34}}$	$n_{x_{45}}$	$n_{x_{56}}$	n_x	h/δ_{min}	$n_{y_{12}}$	$n_{y_{23}}$	$n_{y_{34}}$	$n_{y_{45}}$	n_y
a	6	2	4	2	6	20	4	6	4	4	4	18
b	9	4	6	4	9	32	6	9	8	6	7	30
c	12	4	9	4	12	41	8	12	9	8	9	38
d	16	6	12	6	16	56	10	16	12	10	12	50
e	19	6	14	6	19	64	12	19	14	12	14	59

Os parâmetros $n_{x_{ij}}$ e $n_{y_{ij}}$ representam o número de células ao longo dos segmentos x_{ij} e y_{ij} , respectivamente. O número total de células ao longo dos eixos horizontal e vertical de referência são n_x e n_y , respectivamente. Também, nessa tabela, é fornecido, para cada opção, o número de células para discretização da altura do *plasma host*, h/δ_{min} , tomado aqui como parâmetro de referência.

4.5.2 Teste de convergência através das características de dispersão.

A Fig. 4.11 apresenta as características de dispersão para um plasma de baixa densidade ($N = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$) e para as cinco versões de malha. Apenas a versão **a** (20 x 18), isto é, aquela com 20 e 18 células ao longo dos eixos de referência horizontal e vertical, respectivamente, apresenta uma diferença significativa. As versões **d** (56 x 50), com curva marcada com círculos cheios, e **e** (64 x 59), curva com pequenos losangos, virtualmente coincidem. As versões **b**, **c** e **d** tendem a convergir para **d** e **e**. Este tipo de comportamento se modifica para o caso de plasma intenso.

A Fig. 4.12 apresenta as características de dispersão do plasma de alta densidade, com $N = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$. Neste exemplo, a malha com maior refinamento **e** (curva marcada com símbolos "o"), tende a alinhar-se com a versão *mais pobre*, **a** (curva assinalada com "x"), em quase todos os *pontos modais*. Este tipo de comportamento pode indicar erro numérico, possivelmente por causa da excessiva redução do tamanho efetivo da célula. Deve-se, então, aplicar outros tipos de testes em tais situações.

As opções **b** e **c** tendem a convergir para a malha tipo **d** (curva com círculos em negrito). É justamente para esta opção que as soluções convergem próximo à frequência de corte do guia.

4.5.3 Teste de convergência através de respostas espectrais

Para análise mais específica de convergência, útil principalmente para plasma com densidade média, cuja convergência é mais difícil, utilizou-se a resposta espectral dos campos em ponto modal definido pelo valor da constante de propagação, β .

Para efeito de comparação, foram obtidos os espectros da componente de campo E_y , para plasmas com densidades baixa ($N = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$) e média ($N = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$). Para a constante de fase utilizou-se $\beta = 10 \text{ rad/mm}$. Esses resultados são apresentados nas Figs. 4.13 e 4.14, respectivamente.

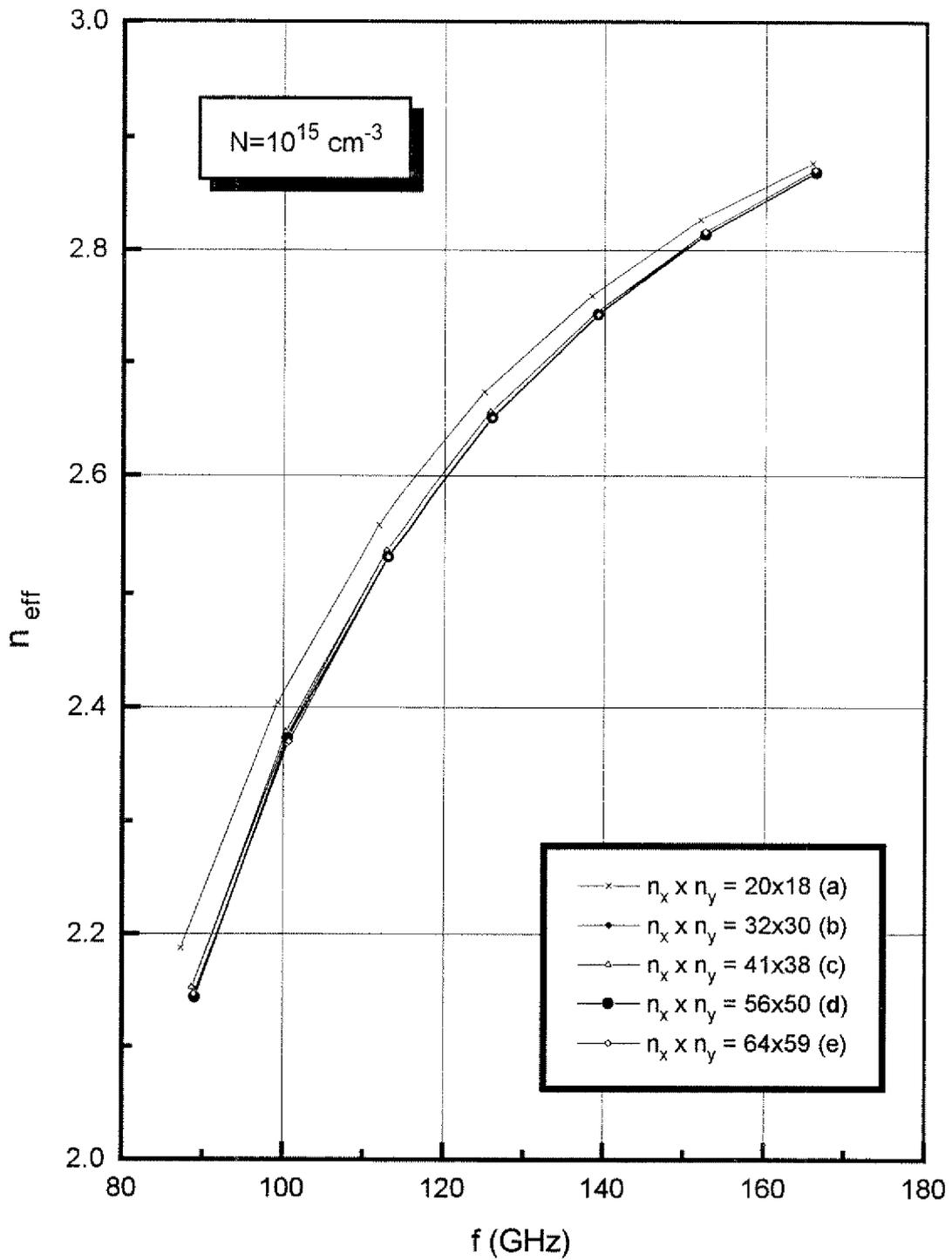


Fig. 4.11 - Características de fase do modo E_{11}^y : teste de convergência para densidade de plasma igual a $N=10^{15} \text{ cm}^{-3}$, para diversos graus de refinamento da malha.

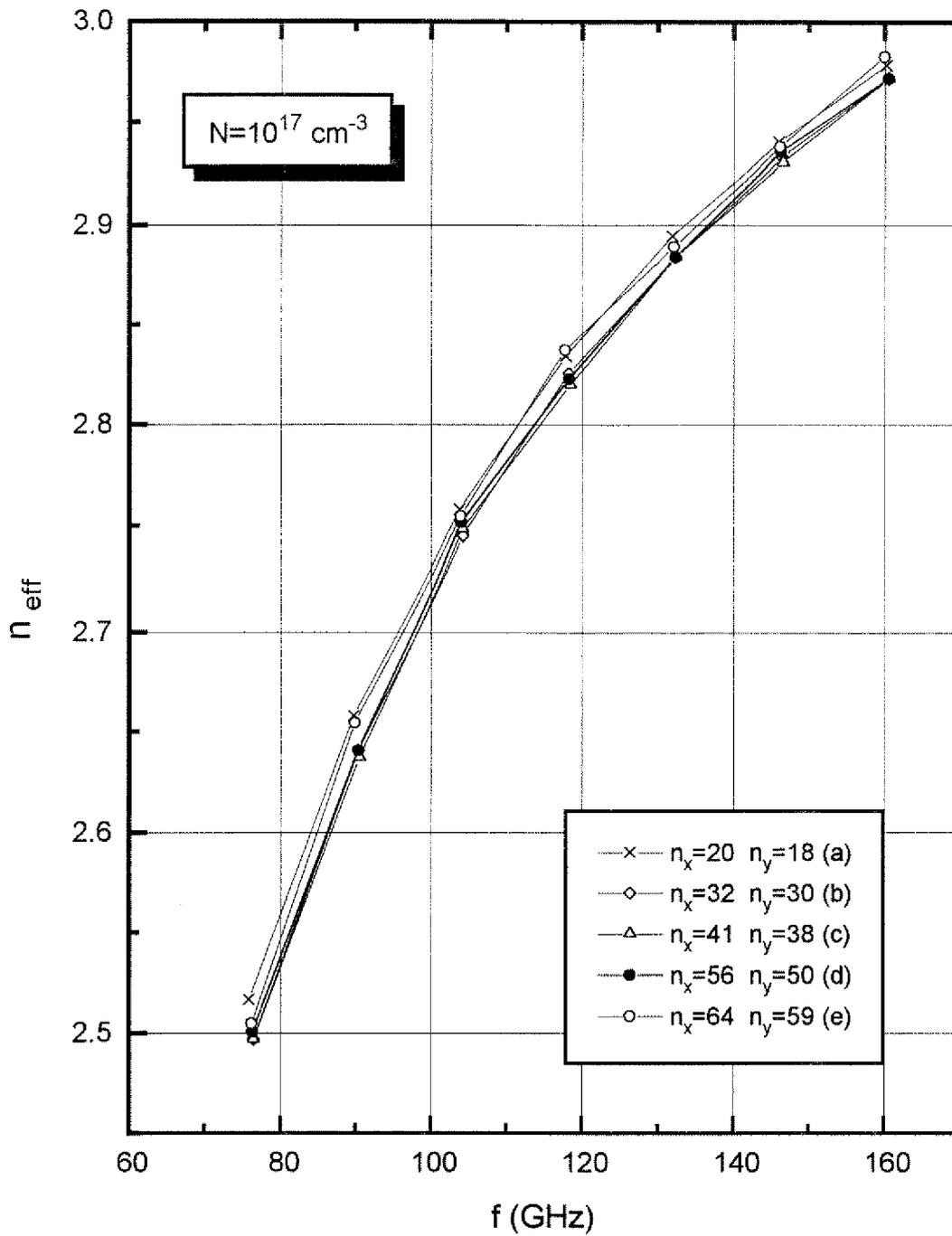


Fig. 4.12 - Características de fase do modo E^y_{11} : teste de convergência para densidade $N=10^{17} \text{ cm}^{-3}$, para diversos graus de refinamento de malha.

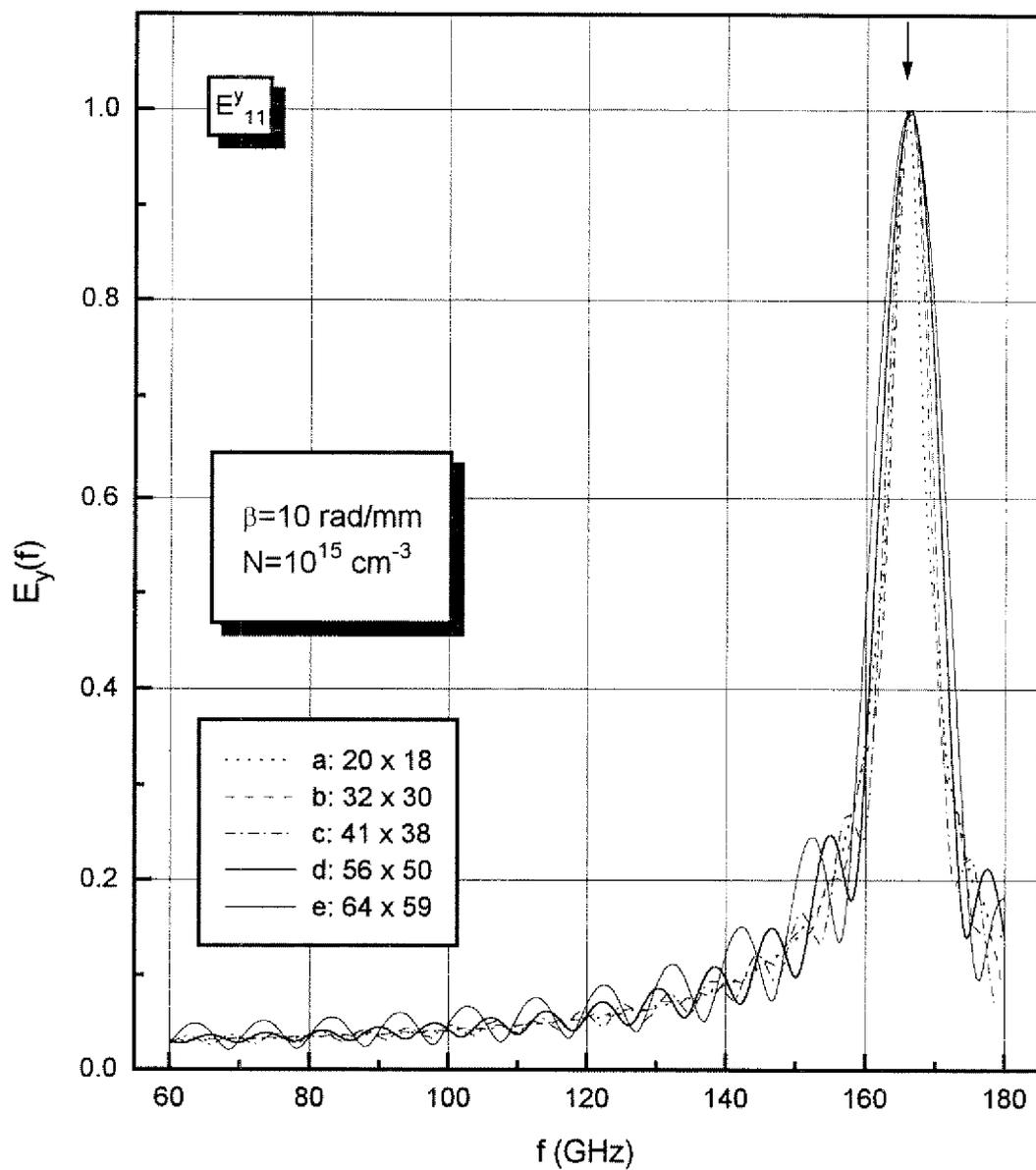


Fig. 4.13 - Espectros da componente E_y para plasma com densidade $N=10^{15} \text{ cm}^{-3}$. São considerados cinco graus de refinamento da malha (a, b, c, d, e e). A constante de propagação é $\beta= 10 \text{ rad/mm}$.

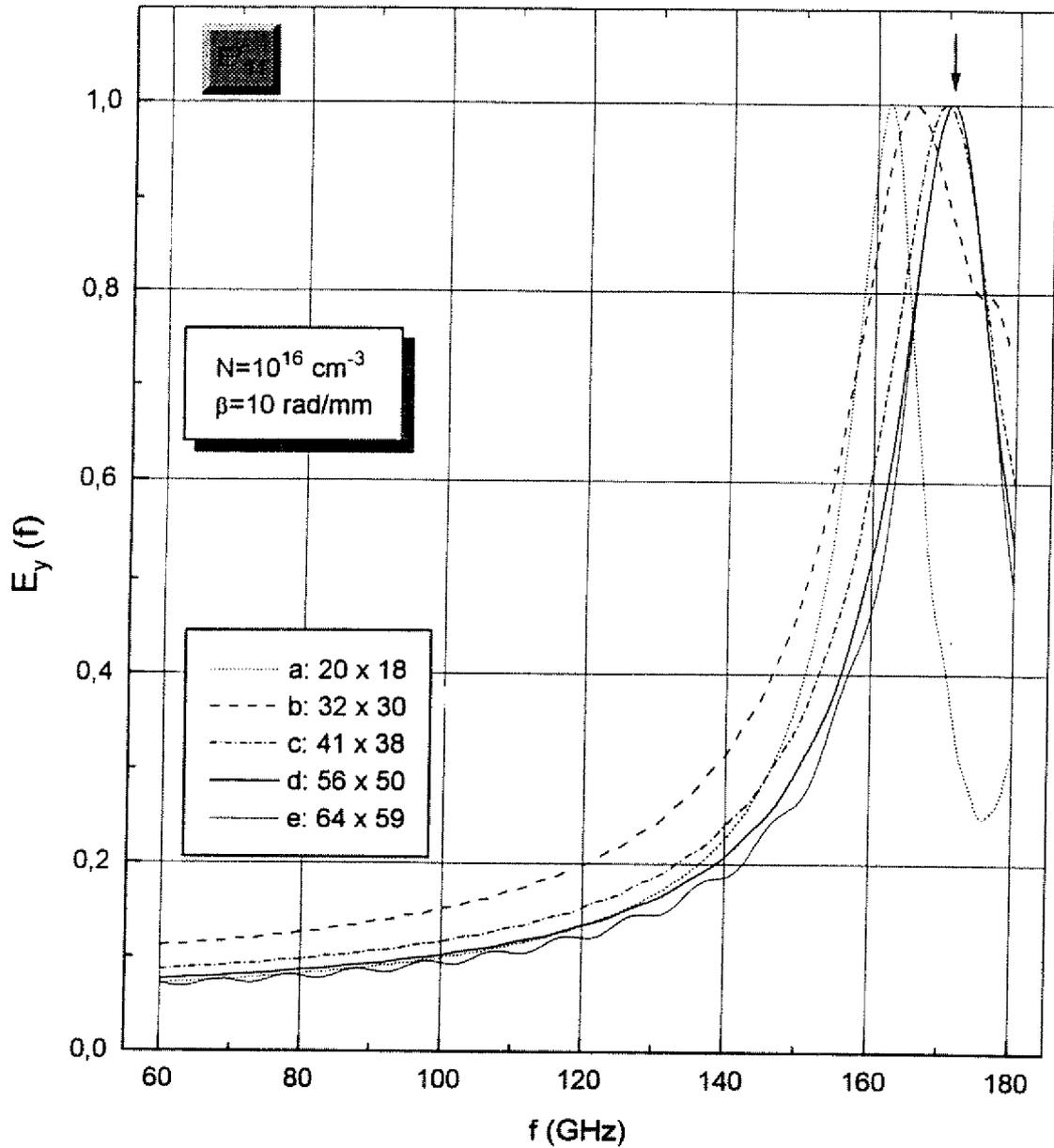


Fig. 4.14 - Espectros da componente E_y em guia com plasma de média intensidade ($N=10^{16} \text{ cm}^{-3}$). A constante de propagação é $\beta = 10 \text{ rad/mm}$. Esses resultados são para cinco graus de refinamentos de discretização do domínio numérico: a, b, c, d e e.

Para o plasma de baixa densidade (Fig. 4.13), quase não se percebe discrepância no valor da frequência modal (indicada por uma seta), para os diversos tipos de versões de malha. Entretanto, para o plasma de média densidade (Fig. 4.14) a convergência é mais difícil. Há uma diferença muito grande entre a solução obtida pela versão **a** (curva pontilhada) e o ponto de convergência indicado pela seta. Neste caso particular, as versões **d** e **e** (representadas por linhas contínuas) fornecem praticamente a mesma solução, no ponto de convergência.

4.5.4 Teste de convergência usando distribuição espacial de campo.

Para concluir os testes de convergência, foram analisados os perfís espaciais da componente de campo elétrico, E_y , ao longo do eixo vertical de referência. O valor da constante de fase utilizado é igual a 10 rad/mm.

Na Fig. 4.15 estão os resultados obtidos para o plasma de baixa densidade. Na análise de convergência através de distribuição de campo, os pontos a serem observados são as interfaces entre materiais, isto é, os pontos de descontinuidade do campo E_y , neste caso particular. Isto identifica a capacidade da malha de ter *sensibilidade* para detectar a posição correta dos contornos e, conseqüentemente, a frequência modal. Nessa figura as setas indicam tais *pontos de observação*. Observa-se, nesse exemplo, novamente a boa coincidência de resultados entre as opções **d** (curva sinalizada com círculo cheio) e **e** (curva com pequenos losangos), para as quais a solução converge. O ponto mais importante a ser analisado, por ser mais crítico, é a interface entre o plasma e o ar, indicado pela letra Q.

Para o valor da constante de fase usado aqui, isto é, $\beta = 10$ rad/mm, e uma densidade intermediária, $N = 10^{16}$ cm⁻³, tem-se uma situação em que há disputa de modos. A Fig. 4.16 mostra essa situação e a capacidade da malha de *sentir* essa disputa. O grau com que o efeito especular atua é indicado pela *profundidade* de descontinuidade do campo na interface do plasma, enquanto que o modo de interação se caracteriza pelo pico da distribuição próximo ao centro do núcleo do guia.

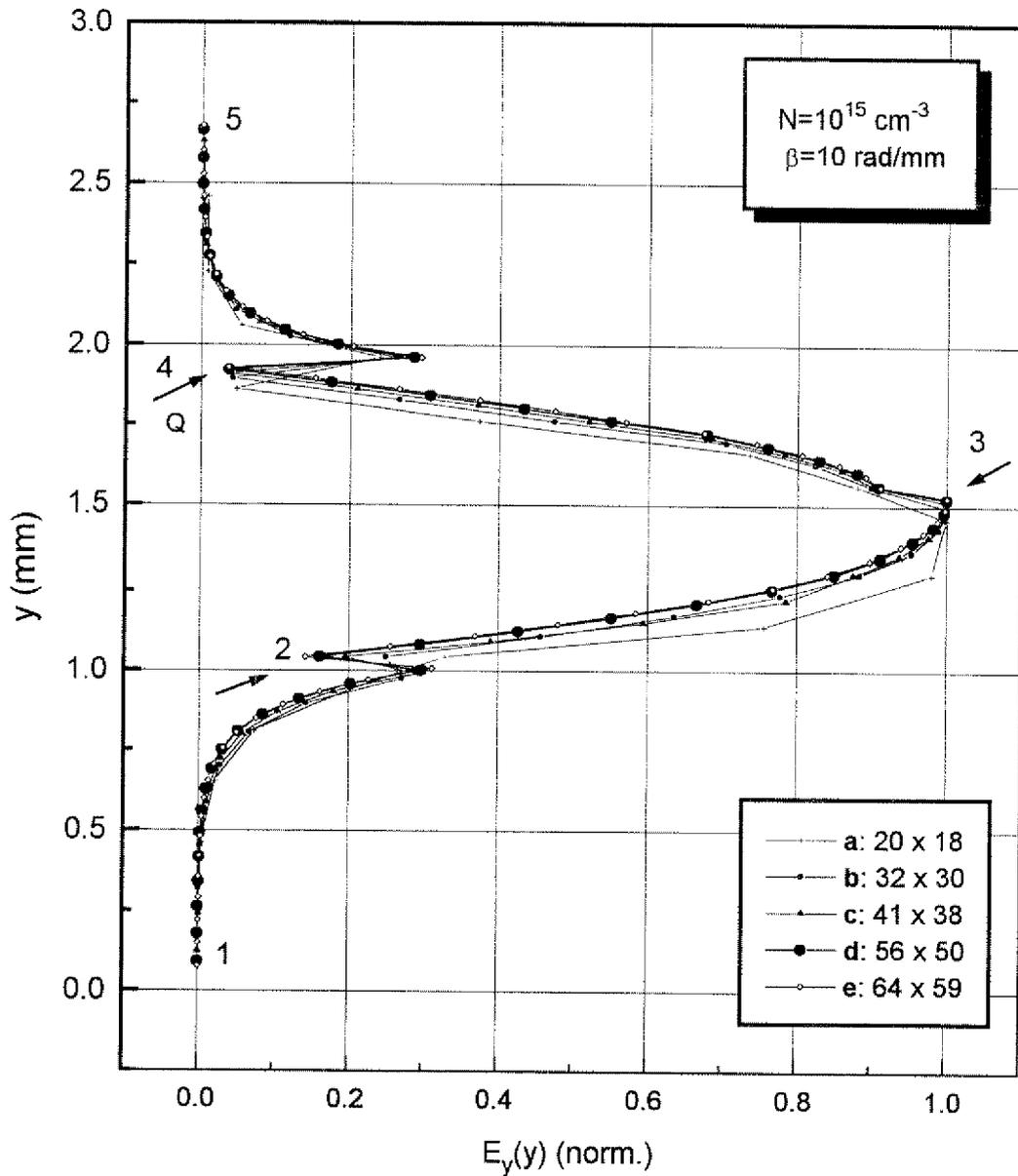


fig 4.15 - Distribuição espacial do campo elétrico ao longo do eixo vertical de referência: teste de convergência usando cinco graus de refinamento, designados por a, b, c, d e e, respectivamente.

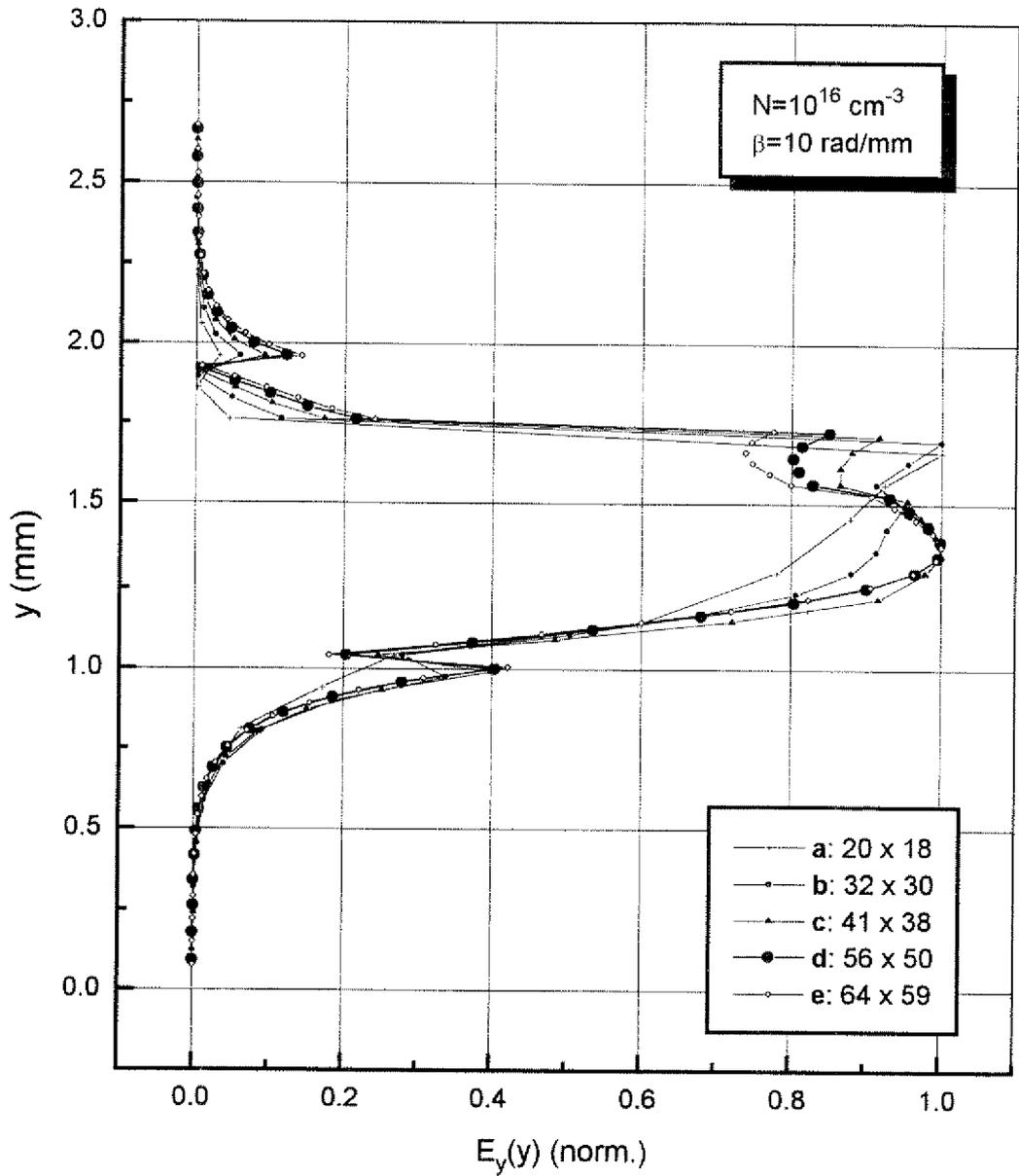


Fig. 4.16 - Distribuição espacial da componente E_y , ao longo do eixo de referência vertical, para $N=10^{16} \text{ cm}^{-3}$ (densidade intermediária) e $\beta=10 \text{ rad/mm}$. São apresentados cinco graus de refinamento, de malha, como na Fig. 4.15.

Observe que a malha tipo **a** (curva marcada com "+") praticamente só percebe o efeito especular. As versões **d** e **e** são mais sensíveis aos dois tipos de efeitos; além disso, convergem melhor, com respeito à frequência modal.

Para a escolha da malha mais adequada é necessário, além dos testes acima, monitorar o tempo de CPU. Os valores comparativos do tempo de processamento necessário para a implementação do método FDTD, relativo ao tempo requerido pela malha **d**, foram os seguintes: **a** (15%), **b**(37%), **c**(58%), **d**(100%) e **e**(132%). Estes dados são para o computador IBM 9021.

Da análise dessas informações, chegou-se à escolha da malha tipo **d**(56x50), para servir de perfil para a discretização do domínio computacional dos dispositivos analisados neste trabalho.

4.6 Guias Acoplados

A estrutura analisada neste item é mostrada na Fig. 4.1(b). Trata-se de uma estrutura simétrica composta de guias acoplados, constituídos de materiais idênticos ao do guia singelo, analisado na seção 4.4, exceto que os guias acoplados repousam sobre uma base dielétrica. O guia básico da estrutura acoplada é mais simples do que o guia singelo, visto que a largura da região do *plasma host* e do núcleo do guia são iguais ($w = a$). Isto permite melhorar a discretização do domínio numérico, através de maior refinamento na região entre os guias, cuja distância, d , é normalmente menor do que as dimensões dos outros elementos que compõem a estrutura.

O uso do conceito de paredes elétrica e magnética, para modos ímpar e par, respectivamente, aliado à simplicidade da geometria, permite reduzir consideravelmente o tempo de processamento requerido pelo algoritmo FDTD. Por exemplo, o tempo de CPU requerido com esses recursos é de apenas 39% (IBM 9021), quando comparado com o tempo necessário para implementar o método no guia singelo da Fig. 4.1(a).

A maioria dos parâmetros usados aqui são os mesmos da seção 4.4. Os valores

diferentes são os seguintes:

- constante dielétrica do material da base ou substrato, $\epsilon_{sub} = 2,25$,
- distância entre guias acoplados, $d = 160 \mu m$,
- largura do domínio numérico, $L_x = 2,16 mm$,
- altura do domínio numérico, $L_y = 3,00 mm$,
- dimensão mínima da célula de discretização espacial, $\delta_{min} = 60 \mu m$,
- largura espectral do pulso de excitação, $B_f = 150 GHz$,
- número de células segundo eixo horizontal de referência, $n_x = 40$,
- número de células segundo eixo vertical de referência, $n_y = 58$.

O valor de δ_{min} , assim como a segmentação espacial, seguem o perfil do padrão **d**, estabelecido pela análise de convergência.

A Fig. 4.17 mostra as distribuições espaciais da componente de campo elétrico E_y , ao longo do eixo horizontal de referência, para os modos dominantes par (marcadas com círculos) e ímpar (linha mais densa). O eixo das abscissas representa a posição relativa ao eixo de simetria da estrutura. A constante de propagação é igual a $10 rad/mm$. Para o modo par são mostradas duas curvas: uma delas, marcada com pequenos círculos, para plasma de baixa densidade ($N = 10^{15} cm^{-3}$), na qual se observa menor grau de atenuação. A distribuição assinalada com círculos maiores corresponde a plasma de densidade média ($N = 5 \times 10^{16} cm^{-3}$) e, portanto, com maior atenuação.

As distribuições de campo ao longo do eixo vertical de referência são semelhantes às do guia singelo e, por isso, não serão mostradas aqui.

Melhores informações sobre o guia, são fornecidas pelas características de dispersão para modos par e ímpar dominantes, polarizados segundo a direção y .

A Fig. 4.18 apresenta as características de dispersão para o modo E_{11}^y par, considerando-se plasmas de diferentes densidades, N , em cm^{-3} . A curva mais densa, correspondente

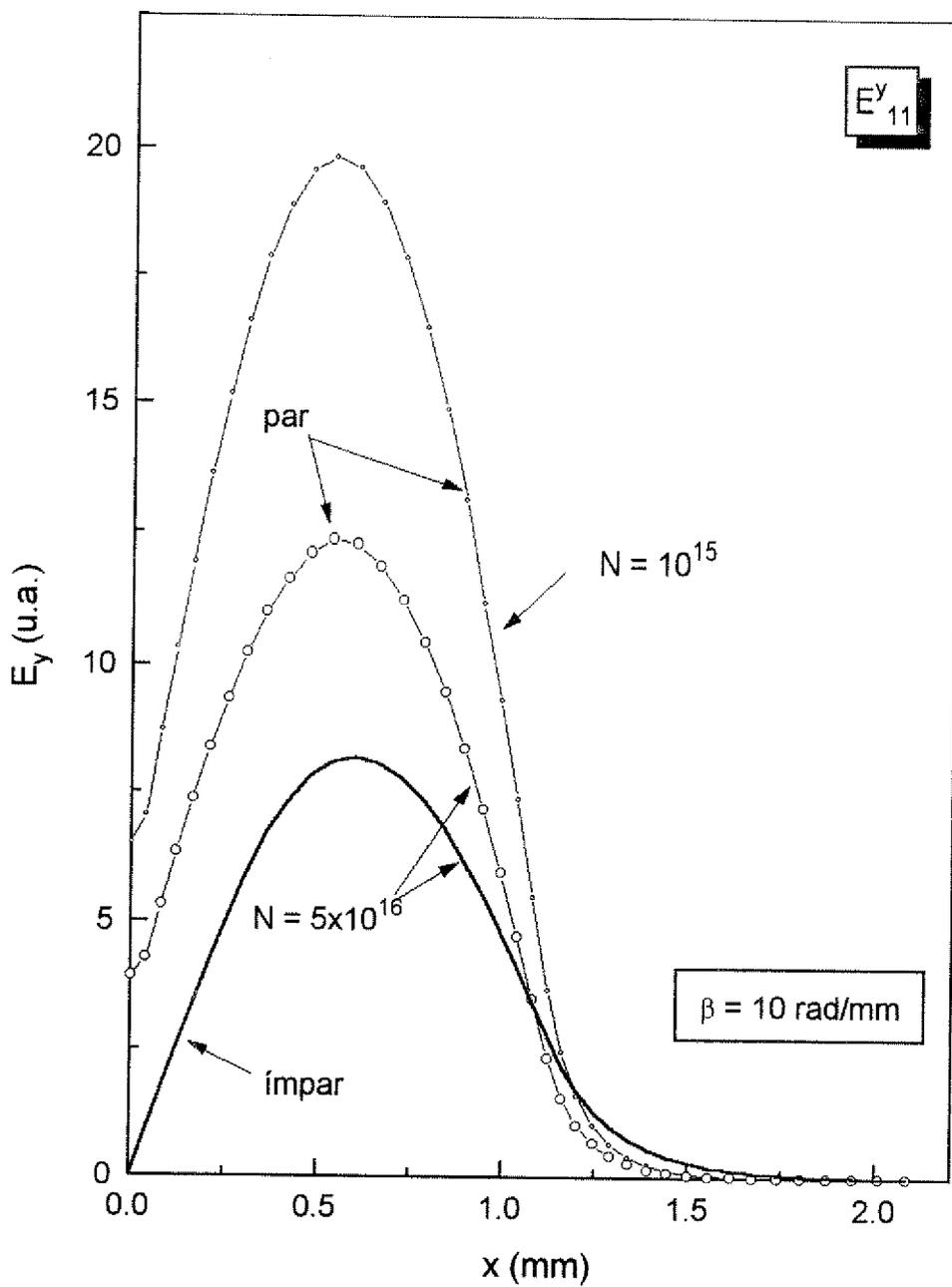


Fig. 4.17 - Distribuição espacial do campo E_y ao longo do eixo horizontal de referência, para modos par e ímpar. A densidade, N , é dada em cm^{-3} .

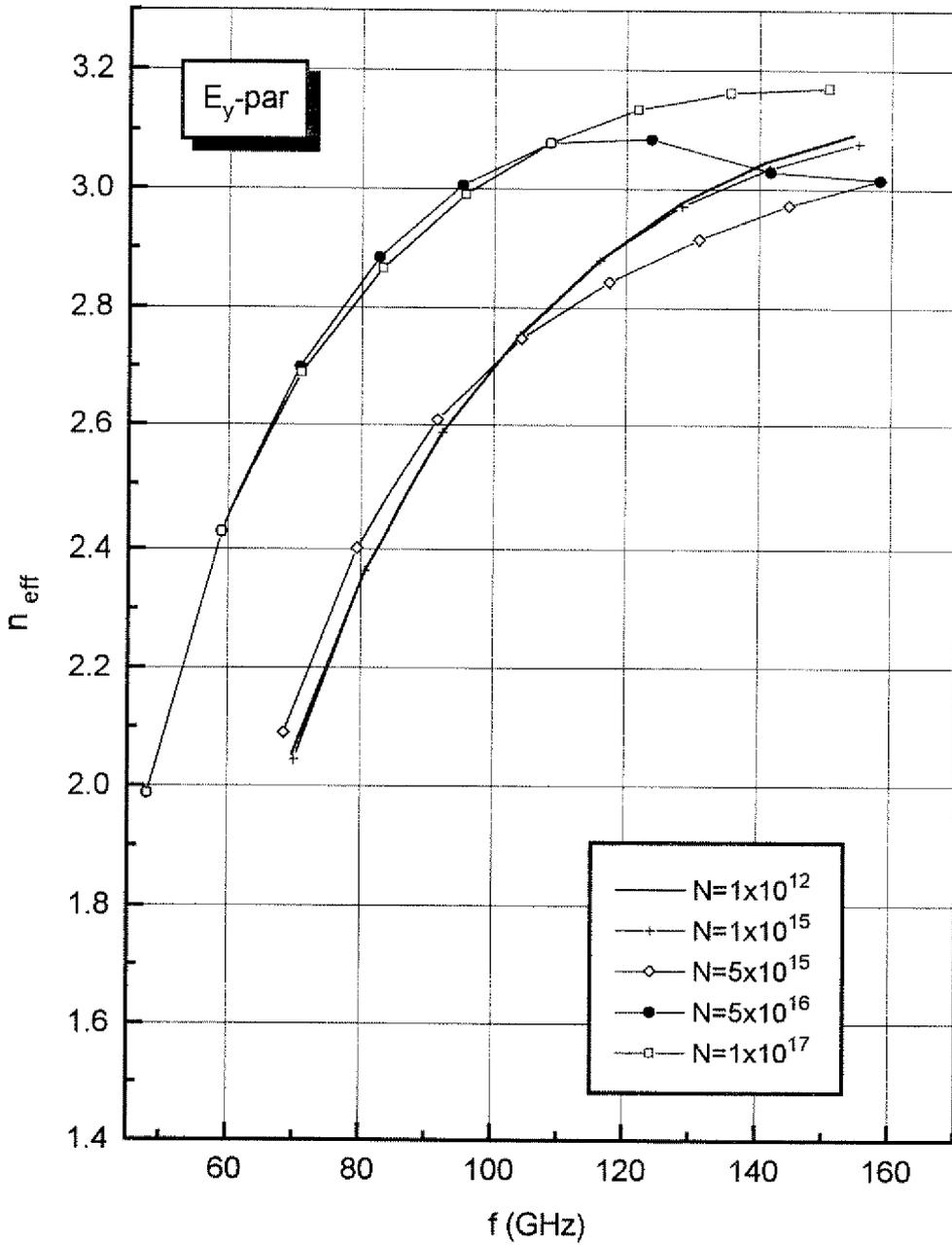


Fig. 4.18 - Características de dispersão do modo E_y^1 par, tomando como parâmetro a densidade do plasma, N , em cm^{-3} .

ao plasma residual, o qual não afeta os campos de RF, é tomada como referência. Os efeitos do plasma sobre as características de propagação só começam a se manifestar em densidades da ordem de $N = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ (curva marcada com símbolo "+").

A transição gradual entre os efeitos especular e *iterativo* (interação provocada pela penetração do campo de RF no plasma), é bem definida na curva assinaladas com losangos, cuja densidade correspondente é de $N = 5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$. Neste caso particular, a transição do domínio entre os efeitos citados acima ocorre em torno de 100 GHz . À medida que a densidade do plasma aumenta, mais brusca se torna a transição e maior é a frequência na qual esta ocorre, como pode ser visto na característica identificada com círculos em negrito. A densidade neste caso é de $N = 5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ e a frequência de transição se verifica em 140 GHz , aproximadamente. Observe que o efeito do plasma sobre a fase (ou n_{eff}) é considerável, principalmente próximo à frequência de corte.

A Fig. 4.19 apresenta o comportamento da característica de dispersão do modo E_{11}^y ímpar, para diversos níveis de plasma (ou excitação óptica). Os valores da densidade, N , são os mesmos utilizados para o modo par. Nessa figura são indicados, através de setas e valores correspondentes da constante de fase, três pontos modais na região de transição. Mais adiante será feita uma análise espectral e temporal do comportamento do campo elétrico nessa região.

Comparando-se as Figs. 4.18 e 4.19, vê-se que o efeito do plasma sobre os dois tipos de modos são semelhantes, exceto por um ligeiro desvio das curvas, equivalente a uma diminuição no tamanho efetivo do guia, para o modo ímpar. Este detalhe é melhor observado expondo-se as características de ambos os modos num mesmo gráfico e para valores extremos da densidade do plasma. Isto é feito na Fig. 4.20.

Nesta figura, as curvas com símbolos representam o modo ímpar. O grau de excitação do plasma é indicado pela espessura das curvas: as curvas finas indicam plasma residual ($N \leq 10^{12} \text{ cm}^{-3}$), enquanto que as curvas espessas são os resultados obtidos para plasma denso ($N = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$). É importante observar a diferença de fase (ou n_{eff}) entre os modos par e ímpar, para uma dada frequência e níveis de excitação extremos. Por

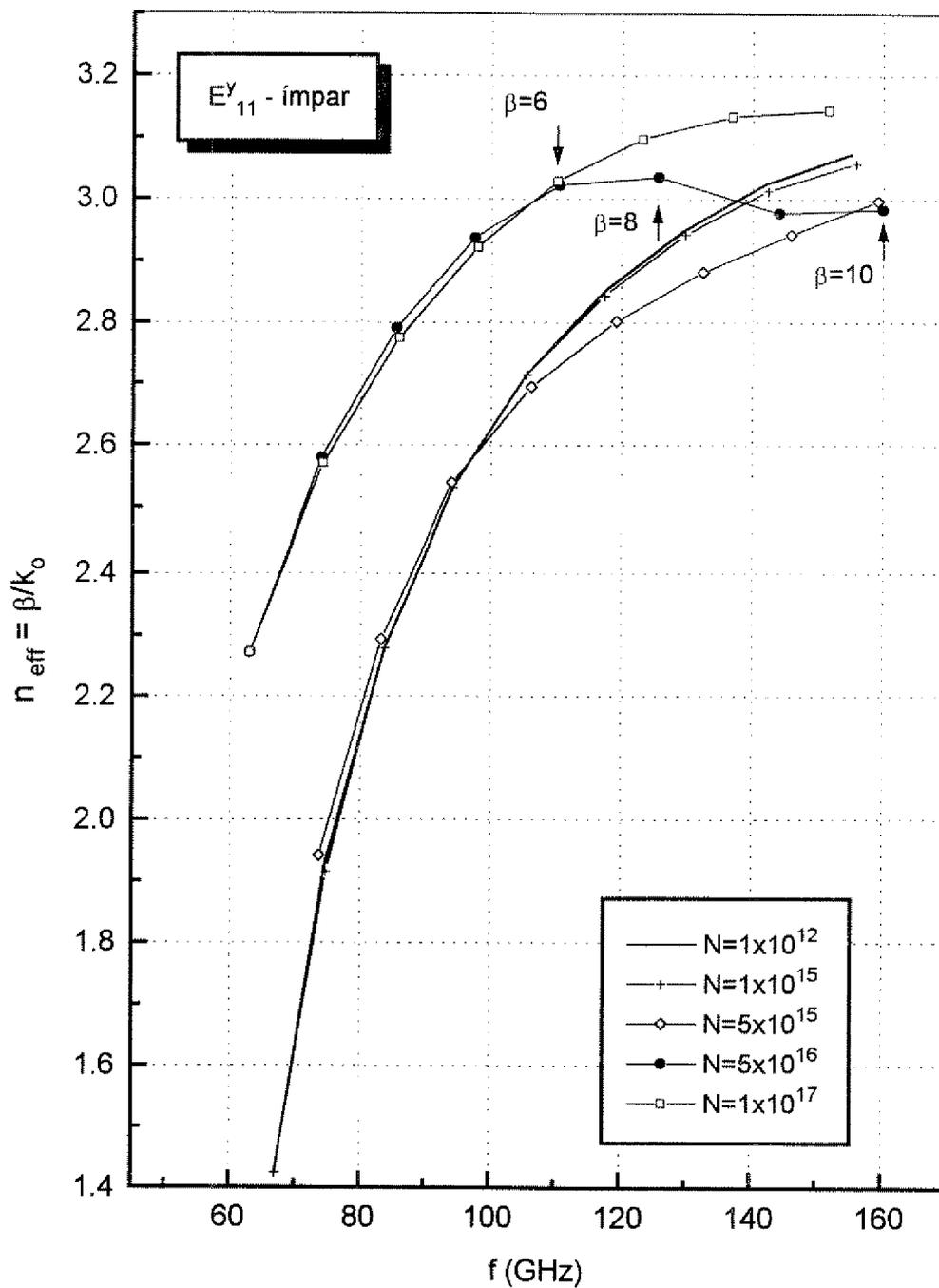


Fig. 4.19 - Características de dispersão do modo E^y_{11} ímpar, para diversos valores da densidade do plasma, N , em cm^{-3} . As setas indicam pontos modais na região de transição, com a constante de propagação, β , em rad/mm.

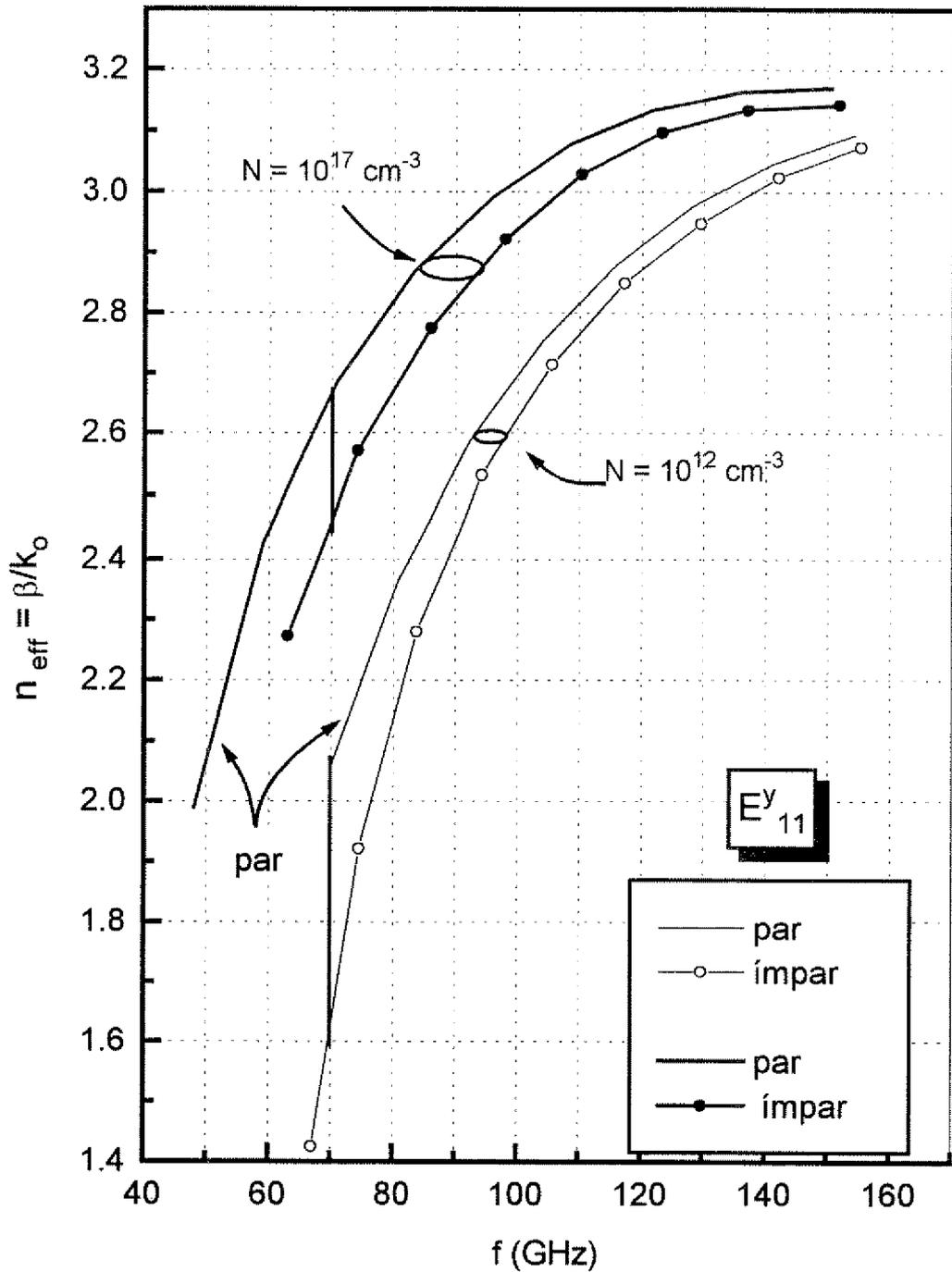


Fig. 4.20 - Características de dispersão dos modos par e ímpar, com níveis de excitação óptico forte ($N = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$) e residual ($N = 10^{12} \text{ cm}^{-3}$).

exemplo, na frequência de 70 GHz (Fig. 4.20) é observado que a diferença de índice efetivo entre os modos (indicados pelos traços verticais) decresce quando a excitação evolui do nível baixo para o nível alto. Isto sugere que o acoplamento em uma estrutura desse tipo, com um dado dimensionamento físico, pode ser dinamicamente controlado através da densidade do plasma, ou seja, pela variação da intensidade do feixe óptico incidente. Há, entretanto, o problema da atenuação induzida pelo plasma, a qual é pequena para densidades baixa e alta (efeito especular), porém, é intensa para densidades intermediárias.

Uma possível solução para o problema de atenuação, parece ser a operação do dispositivo no modo *chaveado*, isto é, entre níveis de excitação alto e baixo.

O comportamento espectral do campo em torno da região de transição é mostrado na Fig. 4.21, para a componente de campo elétrico E_y e para três valores da constante de fase, β , iguais a 6, 8 e 10 rad/mm . Os pontos modais correspondentes são indicados por setas na característica de dispersão da Fig.4.19, para $N = 5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$.

Observe, na Fig. 4.21, a coexistência simultânea de dois modos, os quais estão associados aos efeitos especular (indicado pela seta maior) e de *interação* (seta menor). Para o traçado da curva de dispersão, seleciona-se o modo de maior magnitude. A proximidade das frequências modais correspondentes, impede a obtenção confiável da constante de atenuação modal pelo método FDTD, em situações como essas. Os registros temporais para os valores de β iguais a 6 e 10 rad/mm são mostrados na Fig. 4.22. Vê-se, claramente, que é inviável tentar obter o coeficiente de absorção modal através da envoltória desses registros.

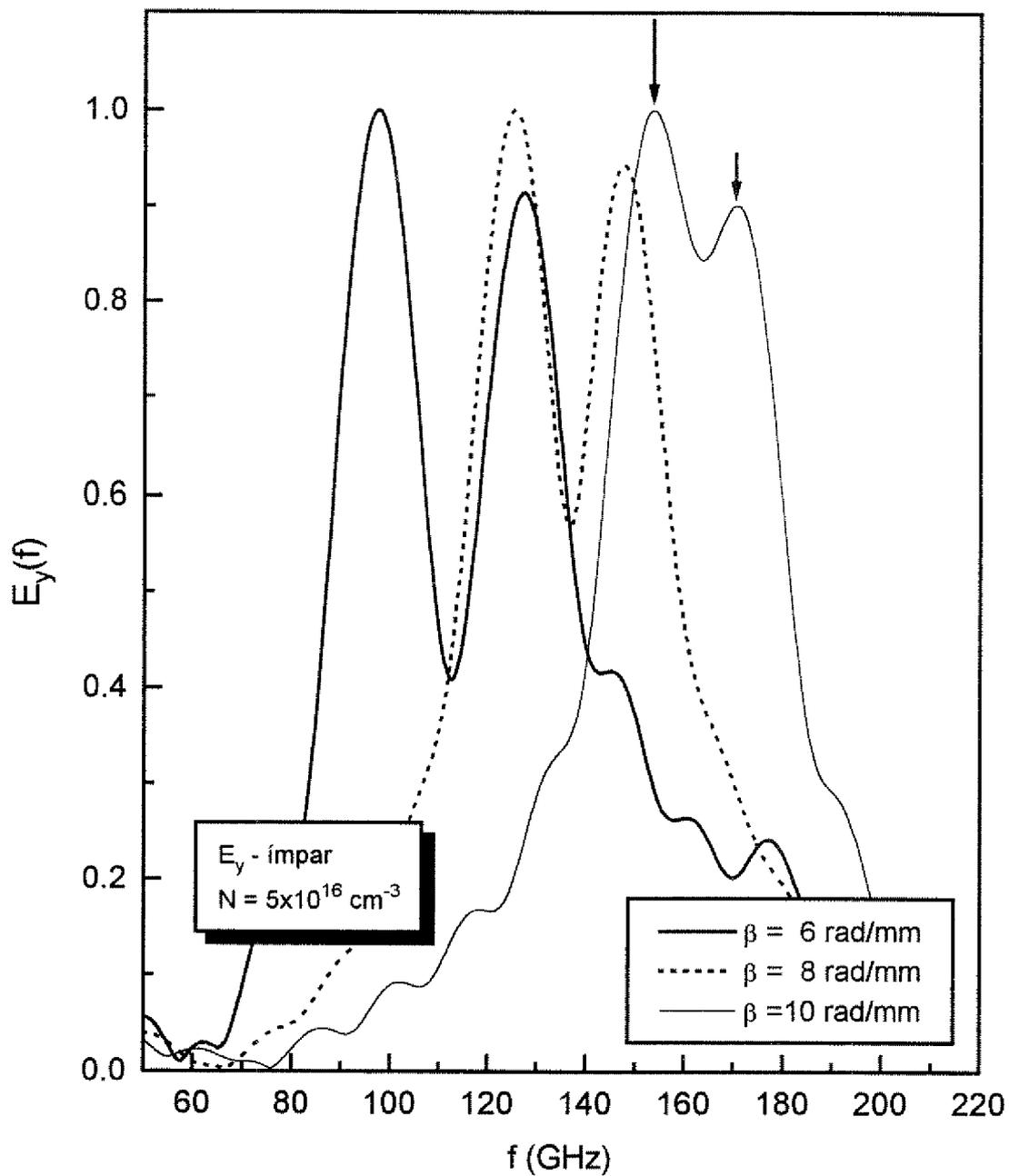


Fig. 4.21 - Evolução espectral quando o modo E_{11}^y ímpar é excitado em um plasma com densidade intermediária, $N = 5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, para três valores da constante de fase, em torno da região de transição de modos.

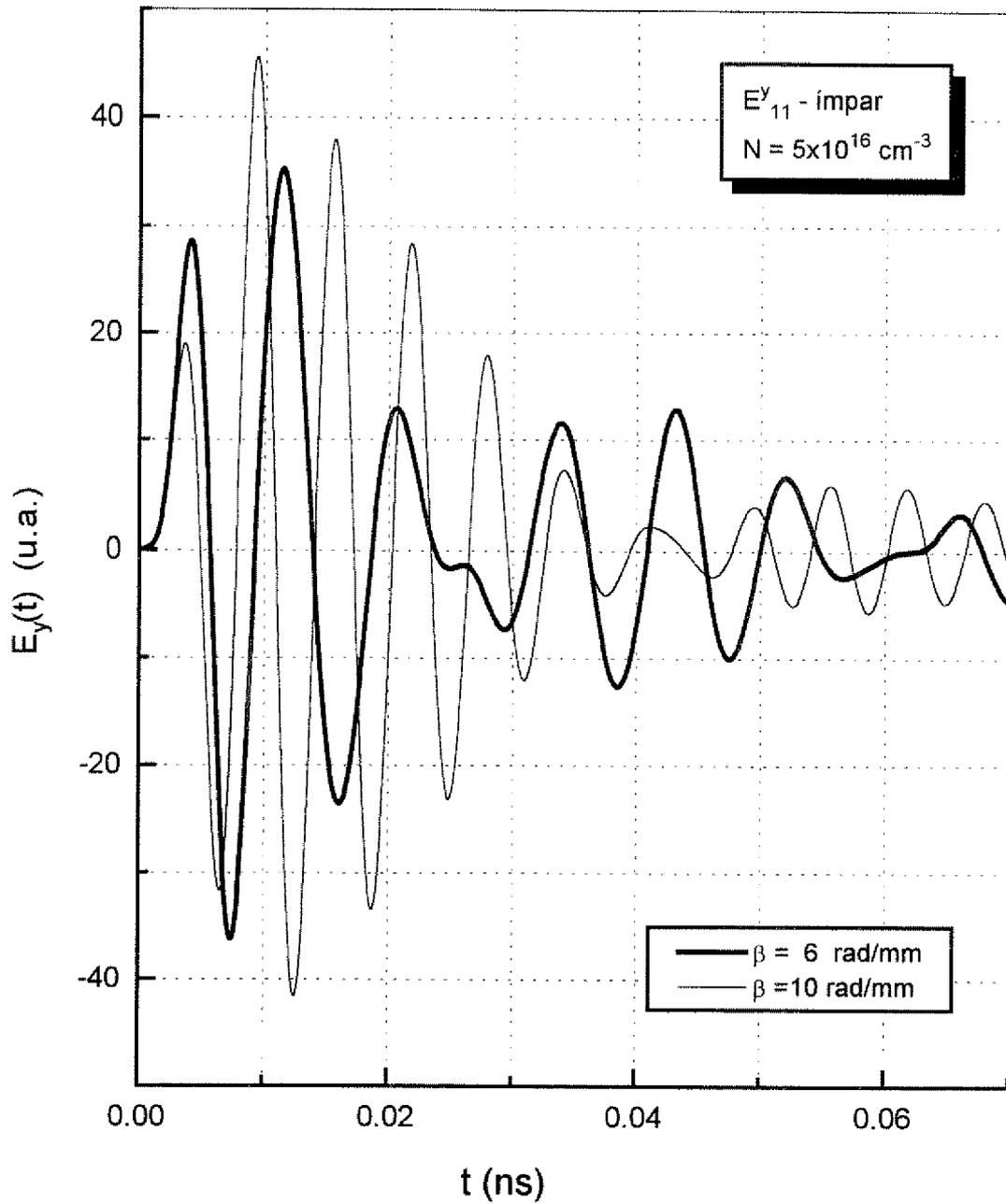


Fig. 4.22 - Evolução temporal da componente de campo E_y , em plasma de densidade intermediária, no qual se verifica disputa de modos, para dois valores da constante de fase, β .

Referências

- [1] Y. Shen, K. Nickerson e J. Litva, "Frequency-dependent FDTD modelling of optically-controlled dielectric resonators", *IEEE Trans. Microwave Theory and Tech.*, vol. MTT-41, pp. 1005-1010, Jun/Julho 1993.
- [2] C. H. Lee, P. S. Mak e A. P. DeFonzo, "Optical control of millimeter-wave propagation in dielectric waveguides", *IEEE J. Quantum Electr.*, vol. QE-16, pp. 277-288, março 1980.

Capítulo 5

Guias Dielétricos Contendo Plasma Controlado por Campo Magnetostático (*Magnetoplasma*)

5.1 Introdução

Os dispositivos a serem analisados neste capítulo contém plasma em semicondutor dopado, polarizado com campo magnetostático. Este campo é orientado arbitrariamente em relação ao eixo do guia de onda. Tais condições levam a uma complexidade considerável na análise de propagação de campos de RF, por causa do tensor susceptibilidade elétrica, cujos elementos apresentam a forma geral dada pela equação (3.40). Neste caso, cada elemento do tensor apresenta polos dos tipos Debye e Lorentz, simultaneamente. Além disso, todos os elementos podem ter valores não nulos. Isto significa considerar nove elementos para o tensor susceptibilidade elétrica. Entretanto, aqui só será considerado um tipo de portador. Isto é adequado, porque o núcleo das estruturas contém semicondutor dopado, de modo que apenas um tipo de portador contribui efetivamente para a dispersão do tensor susceptibilidade. O nível de dopagem do semicondutor tem que ser suficientemente brando a fim de manter as perdas em níveis aceitáveis.

A situação aqui é bem diferente daquela considerada no Capítulo 4, onde o plasma não estava contido no núcleo e, desta forma, podia ser intensificado a valores de densidade de portadores (ou frequência de plasma) bem elevados.

Os dois tipos de estruturas selecionadas para análise são mostradas nas Figs. 5.1 e 5.2.

A primeira delas é um guia canal com núcleo semiconductor dopado e polarizado com um campo magnetostático, \mathbf{B}_0 , segundo uma direção arbitrária definida pelo versor \mathbf{u} . O substrato pode ser dielétrico ou semiconductor não dopado e de alta pureza. A Fig. 5.2 apresenta uma estrutura de guias canais acoplados, cujos materiais são os mesmos do guia singelo. Com a finalidade de agilizar os cálculos, essa estrutura será considerada simétrica, de modo a permitir o uso do conceito de paredes elétrica e magnética, para obtenção dos modos ímpar e par, respectivamente. Desta forma o domínio computacional fica reduzido à metade. Isto é muito importante, porque os núcleos estão completamente cheios de plasma e o tratamento deste é bastante complexo.

5.2 Equações de Diferenças Finitas para Magneto-plasma

O campo elétrico para o magnetoplasma pode ser obtido explicitamente pela equação (3.37), cuja forma vetorial é

$$\mathbf{E}^{n+1} = \left(\epsilon_s \overleftrightarrow{\mathbf{I}} + \overleftrightarrow{\boldsymbol{\chi}}^o \right)^{-1} \left(\epsilon_s \mathbf{E}^n + \boldsymbol{\Psi}^n + \mathbf{R}_h^{n+\frac{1}{2}} \right). \quad (5.1)$$

Para simplificar as fórmulas, na forma de diferenças finitas, define-se o tensor associado aos parâmetros do plasma, $\overleftrightarrow{\mathbf{K}}^o$, por:

$$\overleftrightarrow{\mathbf{K}}^o = \left(\epsilon_s \overleftrightarrow{\mathbf{I}} + \overleftrightarrow{\boldsymbol{\chi}}^o \right)^{-1} \quad (5.2)$$

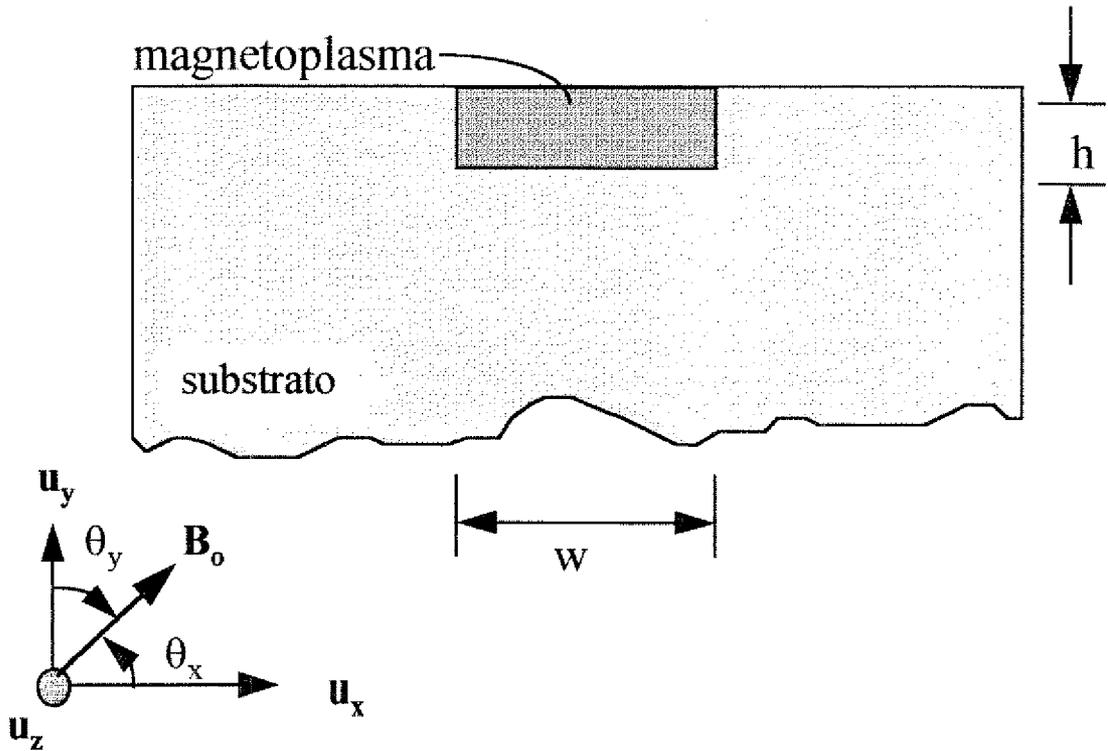


Fig. 5.1 - Guia canal com núcleo contendo magnetoplasma.

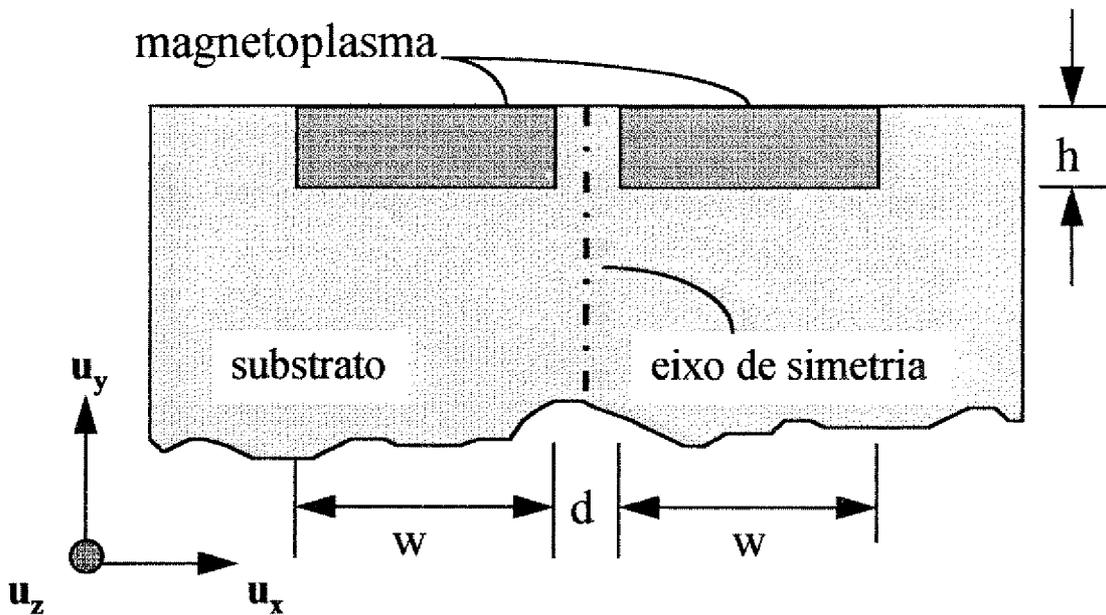


Fig. 5.2 - Guias acoplados com núcleos contendo magnetoplasma. O conceito de paredes elétrica e magnética é aplicada ao eixo de simetria, na versão bidimensional do FDTD.

Expressando \vec{K}^o na forma matricial, a partir da inversão da matriz indicada na equação (5.2), tem-se:

$$\vec{K}^o = \begin{pmatrix} K_{xx}^o & K_{xy}^o & K_{xz}^o \\ K_{yx}^o & K_{yy}^o & K_{yz}^o \\ K_{zx}^o & K_{zy}^o & K_{zz}^o \end{pmatrix},$$

onde os elementos K_{ij}^o , para $ij = x, y, z$, em termos dos parâmetros χ_{uv}^o do plasma, são dados por:

$$K_{xx}^o = \frac{(\epsilon_s + \chi_{yy}^o)(\epsilon_s + \chi_{zz}^o) - \chi_{yz}^o \chi_{zy}^o}{\Delta K}, \quad (5.3)$$

$$K_{xy}^o = \frac{\chi_{xz}^o \chi_{zy}^o - \chi_{xy}^o (\epsilon_s + \chi_{zz}^o)}{\Delta K}, \quad (5.4)$$

$$K_{xz}^o = \frac{\chi_{xy}^o \chi_{yz}^o - \chi_{xz}^o (\epsilon_s + \chi_{yy}^o)}{\Delta K}, \quad (5.5)$$

$$K_{yx}^o = \frac{\chi_{yz}^o \chi_{zx}^o - \chi_{yx}^o (\epsilon_s + \chi_{zz}^o)}{\Delta K}, \quad (5.6)$$

$$K_{yy}^o = \frac{(\epsilon_s + \chi_{xx}^o)(\epsilon_s + \chi_{zz}^o) - \chi_{xz}^o \chi_{zx}^o}{\Delta K}, \quad (5.7)$$

$$K_{yz}^o = \frac{\chi_{xz}^o \chi_{yx}^o - \chi_{yz}^o (\epsilon_s + \chi_{xx}^o)}{\Delta K}, \quad (5.8)$$

$$K_{zx}^o = \frac{\chi_{yx}^o \chi_{zy}^o - \chi_{zx}^o (\epsilon_s + \chi_{yy}^o)}{\Delta K}, \quad (5.9)$$

$$K_{zy}^o = \frac{\chi_{xy}^o \chi_{zx}^o - \chi_{zy}^o (\epsilon_s + \chi_{xx}^o)}{\Delta K}, \quad (5.10)$$

$$K_{zz}^o = \frac{(\epsilon_s + \chi_{xx}^o)(\epsilon_s + \chi_{yy}^o) - \chi_{xy}^o \chi_{yx}^o}{\Delta K}, \quad (5.11)$$

onde

$$\begin{aligned} \Delta K = & \chi_{xx}^o [(\epsilon_s + \chi_{yy}^o)(\epsilon_s + \chi_{zz}^o) - \chi_{yz}^o \chi_{zy}^o] + \chi_{yx}^o [\chi_{xz}^o \chi_{zy}^o - \chi_{xy}^o (\epsilon_s + \chi_{zz}^o)] \\ & + \chi_{zx}^o [\chi_{xy}^o \chi_{yz}^o - \chi_{xz}^o (\epsilon_s + \chi_{yy}^o)]. \end{aligned} \quad (5.12)$$

Os parâmetros χ_{uv}^o são dados pela expressão geral (3.49), ou seja

$$\chi_{uv}^o \Big|_{\substack{u=x,y,z \\ v=x,y,z}} = \mathcal{R} \left\{ \hat{\chi}_{uv}^o \Big|_{\substack{u=x,y,z \\ v=x,y,z}} \right\},$$

onde

$$\hat{\chi}_{uv}^o \Big|_{\substack{u=x,y,z \\ v=x,y,z}} = \chi_{s_{uv}} \left[\delta t + \frac{K_{1uv}}{\nu} (1 - e^{-\nu \delta t}) + \frac{K_{2uv} + jK_{3uv}}{\hat{\gamma}} (1 - e^{-\hat{\gamma} \delta t}) \right]. \quad (5.13)$$

Os parâmetros $\chi_{s_{uv}}$, K_{1uv} , K_{2uv} e K_{3uv} , em termos dos parâmetros básicos do magnetoplasma (ν , ϵ_s , ω_c e ω_p), foram obtidos no Capítulo 2, equações (2.26)-(2.29) e (2.32)-(2.35).

Define-se, também, a matriz auxiliar $\bar{V}^{n+\frac{1}{2}}$, dada pelo segundo fator do segundo membro da equação (5.1), cuja forma matricial é

$$\begin{pmatrix} V_x^{n+\frac{1}{2}}(I + \frac{1}{2}, J) \\ V_y^{n+\frac{1}{2}}(I, J + \frac{1}{2}) \\ V_z^{n+\frac{1}{2}}(I, J) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_x^n(I + \frac{1}{2}, J) + \Psi^n(I, J)|_x + \mathbf{R}_h^{n+\frac{1}{2}}(I, J)|_x \\ E_y^n(I, J + \frac{1}{2}) + \Psi^n(I, J)|_y + \mathbf{R}_h^{n+\frac{1}{2}}(I, J)|_y \\ E_z^n(I, J) + \Psi^n(I, J)|_z + \mathbf{R}_h^{n+\frac{1}{2}}(I, J)|_z \end{pmatrix}, \quad (5.14)$$

onde as componentes do vetor $\mathbf{R}_h^{n+\frac{1}{2}}(I, J)$, são dados pela equação (3.80) ou (4.6).

As componentes do vetor convolução diferença, Ψ^n , são obtidas pelas equações (3.55) até (3.62), as quais serão apresentadas aqui na versão particular de plasma com um portador livre intervindo no processo de dispersão do tensor susceptibilidade elétrica.

A componente da convolução diferença $\psi^n|_x$ é dado por:

$$\psi^n|_x = \psi_{R_{xx}}^n + \psi_{R_{xy}}^n + \psi_{R_{xz}}^n + \mathcal{R} \left\{ \hat{\psi}_{C_{xx}}^n + \hat{\psi}_{C_{xy}}^n + \hat{\psi}_{C_{xz}}^n \right\}, \quad (5.15)$$

onde os elementos de convoluções $\psi_{R_{uv}}^n$ e $\hat{\psi}_{C_{uv}}^n$, para $v = x, y, z$, são obtidos iterativamente

usando-se as seguintes expressões:

$$\begin{aligned}\psi_{R_{xx}}^n &= \chi_{s_{xx}} \left[\frac{K_{1xx}}{\nu} (1 - e^{-\nu\delta t})^2 \right] E_x^n + e^{-\nu\delta t} \psi_{R_{xx}}^{n-1}, \\ \psi_{R_{yy}}^n &= \chi_{s_{yy}} \left[\frac{K_{1yy}}{\nu} (1 - e^{-\nu\delta t})^2 \right] E_y^n + e^{-\nu\delta t} \psi_{R_{yy}}^{n-1}, \\ \psi_{R_{zz}}^n &= \chi_{s_{zz}} \left[\frac{K_{1zz}}{\nu} (1 - e^{-\nu\delta t})^2 \right] E_z^n + e^{-\nu\delta t} \psi_{R_{zz}}^{n-1}, \\ \hat{\psi}_{C_{xx}}^n &= \chi_{s_{xx}} \left[\frac{K_{2xx} + jK_{3xx}}{\hat{\gamma}} (1 - e^{-\hat{\gamma}\delta t})^2 \right] E_x^n + e^{-\hat{\gamma}\delta t} \hat{\psi}_{C_{xx}}^{n-1}, \\ \hat{\psi}_{C_{yy}}^n &= \chi_{s_{yy}} \left[\frac{K_{2yy} + jK_{3yy}}{\hat{\gamma}} (1 - e^{-\hat{\gamma}\delta t})^2 \right] E_y^n + e^{-\hat{\gamma}\delta t} \hat{\psi}_{C_{yy}}^{n-1}, \\ \hat{\psi}_{C_{zz}}^n &= \chi_{s_{zz}} \left[\frac{K_{2zz} + jK_{3zz}}{\hat{\gamma}} (1 - e^{-\hat{\gamma}\delta t})^2 \right] E_z^n + e^{-\hat{\gamma}\delta t} \hat{\psi}_{C_{zz}}^{n-1}.\end{aligned}$$

Observe que a componente ψ_x^n contém termos acoplando as componentes de campo elétrico E_x^n , E_y^n e E_z^n . O cálculo para as componentes ψ_y^n e ψ_z^n é similar ao da componente ψ_x^n . Dessas expressões, vê-se que o cálculo do vetor Ψ^n requer um total de dezoito termos de convolução básicos (*aqueles que permitem cálculo iterativo*), $\psi_{R_{uv}}^n$ e $\hat{\psi}_{C_{uv}}^n$ com $u, v = x, y, z$.

Em termos dos elementos de \bar{K}^o e da matriz auxiliar $\bar{V}^{n+\frac{1}{2}}$, tem-se explicitamente as componentes do campo elétrico no instante $n+1$, os quais são dados a partir da equação (5.1), por:

$$E_x^{n+1}(I + \frac{1}{2}, J) = K_{xx}^o V_x^{n+\frac{1}{2}}(I + \frac{1}{2}, J) + K_{xy}^o V_y^{n+\frac{1}{2}}(I + \frac{1}{2}, J) + K_{xz}^o V_z^{n+\frac{1}{2}}(I + \frac{1}{2}, J), \quad (5.16)$$

$$E_y^{n+1}(I, J + \frac{1}{2}) = K_{yx}^o V_x^{n+\frac{1}{2}}(I, J + \frac{1}{2}) + K_{yy}^o V_y^{n+\frac{1}{2}}(I, J + \frac{1}{2}) + K_{yz}^o V_z^{n+\frac{1}{2}}(I, J + \frac{1}{2}), \quad (5.17)$$

$$E_z^{n+1}(I, J) = K_{zx}^o V_x^{n+\frac{1}{2}}(I, J) + K_{zy}^o V_y^{n+\frac{1}{2}}(I, J) + K_{zz}^o V_z^{n+\frac{1}{2}}(I, J). \quad (5.18)$$

As equações (5.16) até (5.18) são bastante extensas, quando expressas em termos das componentes de campos eletromagnéticos e dos parâmetros do plasma. A introdução

do tensor $\vec{\mathbf{K}}^o$ e da matriz auxiliar $\vec{V}^{n+1/2}$, além dos vetores $\mathbf{R}_h^{n+\frac{1}{2}}$ e ψ^n , permitiu colocá-las num formato bastante compacto. Também está implícito, nessas equações que os parâmetros K_{ij}^o variam espacialmente, ou seja, $K_{ij}^o = K_{ij}^o(I, J)$.

As componentes do campo magnético são obtidas da mesma forma que no capítulo anterior. As equações (4.1)-(4.3) apresentam os detalhes para o cálculo explícito dessas componentes. Isto completa os requisitos básicos para implementação do algoritmo FDTD, na análise de guias com núcleo contendo plasma com polarização magnética (magnetoplasma) segundo direção arbitrária .

5.3 Guia Canal com Núcleo Semicondutor Contendo Magnetoplasma.

Inicialmente, será analisado o guia canal da Fig. 5.1. O núcleo deste guia é constituído de magnetoplasma estabelecido em GaAs, cuja largura é w e altura h . O substrato é de material dielétrico. Esta estrutura está imersa em ar. O campo magnetostático, \mathbf{B}_o , pode ter orientação arbitrária \mathbf{u} e magnitude, B_o , relacionada à frequência ciclotron, f_c , por

$$f_c = \frac{qB_o}{2\pi m^*} ,$$

onde q e m^* são a magnitude da carga e a massa efetiva do portador, respectivamente. Para frequência f_c , em GHz, e densidade de fluxo magnético B_o , em gauss, tem-se:

$$f_{cGHz} = 27,99 \times 10^{-4} \frac{B_{oG}}{m_r^*} , \quad (5.19)$$

onde m_r^* é a massa efetiva relativa. A Tabela 5.1 fornece alguns valores para f_c e B_o , para elétrons em GaAs, os quais serão utilizados a seguir.

Tabela 5.1-Correspondência entre f_c e B_o para elétrons em GaAs

$f_c(GHz)$	10	30	60	90	120
$B_o(gauss)$	235	705	1411	2116	2822

A intensidade do plasma é estabelecida pela frequência de plasma, a qual depende da densidade de portadores, N , através da relação

$$f_p = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{q^2 N}{\epsilon_o \epsilon_s m^*}} \quad (5.20)$$

ou, alternativamente,

$$N_{cm^{-3}} = 1,24 \times 10^{10} \epsilon_r m_r^* f_{pGHz}^2,$$

onde ϵ_r é a constante dielétrica do material.

A orientação do campo \mathbf{B}_o é dada pelos ângulos que o mesmo forma com os eixos cartesianos x , y e z , designados por θ_x , θ_y e θ_z , respectivamente, como definido no Capítulo 2.

As perdas no núcleo é caracterizada pela taxa de colisão (ou espalhamento) com a rede cristalina, ν , ou pelo tempo de vida média do portador, $\tau = 1/\nu$, usualmente da ordem de ps.

Nas simulações feitas neste capítulo, os valores típicos escolhidos para os parâmetros dos materiais, foram os seguintes:

- frequência de plasma, $f_p = 30$ GHz ($N \simeq 9,4 \times 10^{12} \text{ cm}^{-3}$),
- taxa de colisão, $\nu = 125,7 \times 10^9$ colisões/s ($\tau = 7,96$ ps),
- frequência ciclotron, $f_c = 10, 30, 60, 90$ e 120 GHz.
- constante dielétrica estática do núcleo (*plasma host* de GaAs), $\epsilon_s = 12,0$,

- constante dielétrica do substrato, $\epsilon_{sub} = 2,25$,
- massa efetiva do portador (elétron, em GaAs), $m^* = 0,07m_o$,

Os outros dados necessários para implementação da técnica FDTD, alguns deles escolhidos segundo critérios estabelecidos no Capítulo 4, são os seguintes:

- altura do núcleo, $h = 1,0 \text{ mm}$,
- largura do núcleo, $w = 2,0 \text{ mm}$,
- dimensão mínima da célula de discretização espacial, $\delta_{min} = 0,1 \text{ mm}$,
- largura espacial (rms) do pulso de excitação, $\sigma_x = 0,56 \text{ mm}$,
- altura espacial (rms) do pulso de excitação, $\sigma_y = 0,28 \text{ mm}$,
- largura de banda espectral do pulso de excitação, $B_f = 220 \text{ GHz}$,
- largura do domínio numérico, $L_x = 6,0 \text{ mm}$,
- altura do domínio numérico, $L_y = 6,5 \text{ mm}$,
- número de células segundo o eixo horizontal de referência, $n_x = 44$,
- número de células segundo o eixo vertical de referência, $n_y = 34$,
- número de iterações temporais, para cada ponto modal (β, ω) , $n_T = 1001$.

Os pontos modais, nas características de dispersão, foram obtidos para os seguintes valores da constante de propagação, β , considerados como parâmetros de entrada, no algoritmo para FDTD bidimensional: 1,5; 2; 3; ...; 14 rad/mm. Os valores da constante de propagação abaixo de 1,5 rad/mm, produzem valores não confiáveis, para a frequência modal, por causa da atenuação acentuada do modo dominante, quando comparada com a dos modos superiores.

Os resultados das simulações são apresentados quase que unicamente através das características de dispersão, em termos do índice de refração efetivo ($n_{eff} = \beta/k_o$) versus frequência modal, em GHz. Os outros resultados, tais como espectros e registros temporais e distribuições espaciais dos campos, não apresentam novidades significativas, quando comparados aos resultados do capítulo anterior.

A Fig. 5.3 apresenta as características de dispersão para os modos dominantes E_{11}^x e E_{11}^y , para diversos valores da frequência ciclotron, f_c , ou, alternativamente, para diversos valores da magnitude do campo magnetostático, B_o . Este campo está orientado com um ângulo de 80° em relação ao eixo x (eixo horizontal de referência) e situado no plano transversal XY . Nesta situação o modo E_{11}^y apresenta a componente de campo elétrico praticamente alinhado com o campo magnetostático. Isto implica que a força de Lorentz, atuando sobre os portadores, é muito fraca e produz efeito insignificante sobre esse modo. A curva mais espessa (Fig. 5.3) mostra esse modo, aparentemente insensível ao campo magnetostático.

Para o modo E_{11}^x , entretanto, o campo elétrico está orientado quase que numa direção perpendicular ao campo magnetostático. Além disso, ambos situam-se num plano perpendicular à direção de propagação do modo. Este tipo de situação é denominada de configuração tipo Voight [2]. Neste caso, o efeito do campo magnetostático é bastante pronunciado e provoca giroressonâncias as quais dependem fundamentalmente das frequências ciclotron e do plasma e, também, do ângulo θ_x . Essas ressonâncias são identificadas pelas transições observadas na Fig. 5.3. Para campo B_o de baixa intensidade ou $f_c = 10$ GHz (curva assinalada com círculos vazios, a qual também vale para guia sem polarização), a ressonância ocorre próximo à frequência de corte do modo e o efeito sobre a fase é insignificante; porém, a atenuação pode ser significativa por causa da proximidade da ressonância magnética, como será visto mais adiante. Para $f_c = 30$ GHz (curva marcada com símbolos "+"), o efeito do campo B_o sobre a fase já é bem significativo; porém, o nível de atenuação pode ser inaceitável. Para valores maiores de f_c , por exemplo, $f_c = 90$ GHz (característica identificada com círculos em negrito) a ressonância

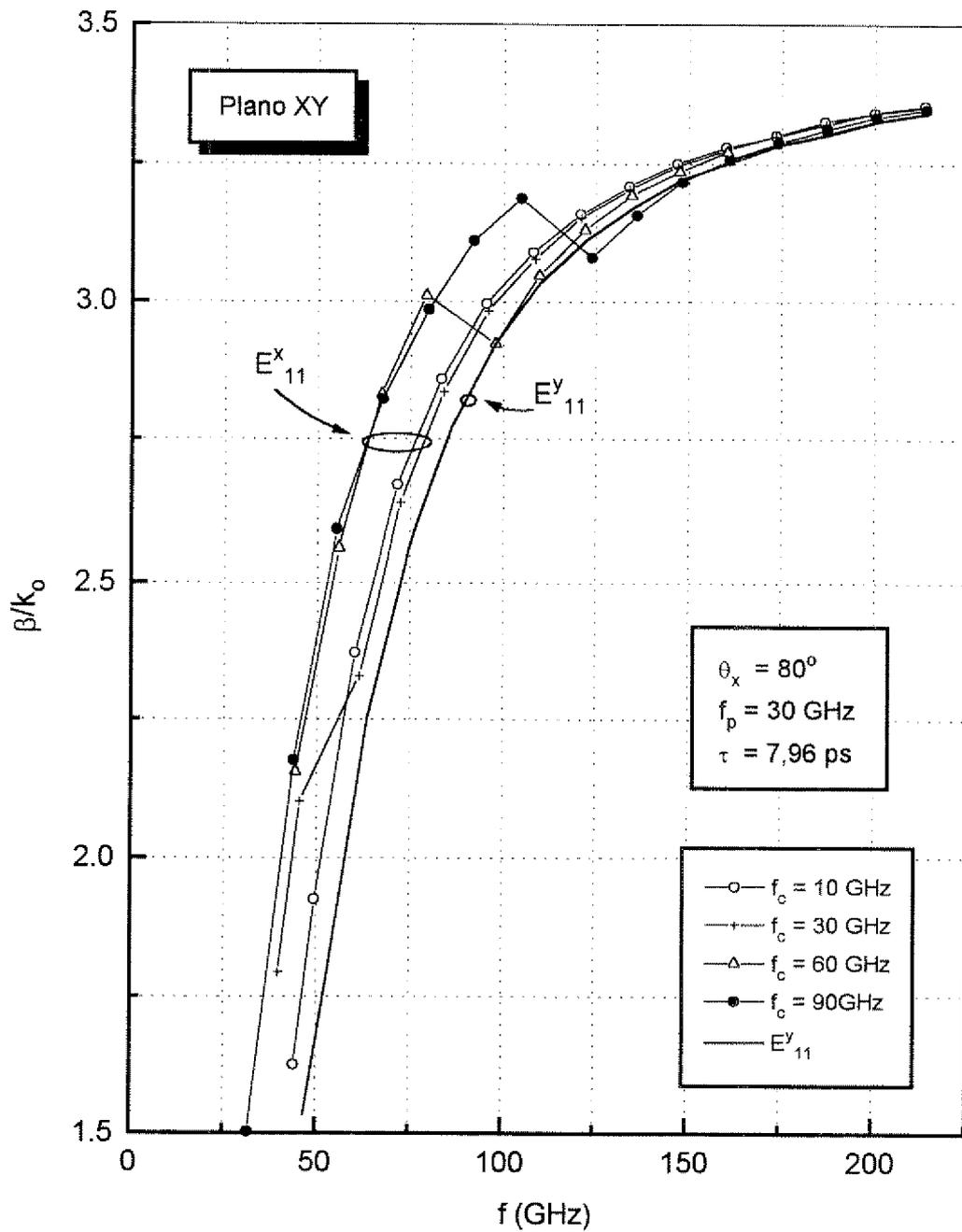


Fig. 5.3 - Efeito da magnitude do campo magnetostático sobre as características de fase dos modos dominantes, E^x_{11} e E^y_{11} .

ocorre em torno de 120 GHz. Este valor é bem longe da frequência de corte do guia (cerca de 40 GHz) e o efeito sobre a fase é mais pronunciado. Isto sugere que, para operação em modo único, deve-se controlar a fase com campo magnético suficientemente elevado ou suficientemente baixo, de modo a evitar os efeitos da ressonância sobre a atenuação do guia, em torno da frequência de corte.

A atenuação provocada pela ressonância magnética sobre os campos de RF é melhor observada através de registros temporais das componentes de campo. A Fig. 5.4(a) reproduz uma das características de dispersão apresentada na Fig. 5.3, para $f_c = 60 \text{ GHz}$ (curva sinalizada com triângulos). Na Fig. 5.4(a) são destacados dois pontos modais, **A** e **B**. O ponto **A** corresponde à constante de propagação igual a 6 rad/mm e está situado na região de ressonância. A Fig. 5.4(b) apresenta o registro temporal da componente E_x para esse ponto, através da curva mais densa. Como pode ser observado, há uma forte atenuação do campo. Também é identificada uma forte interação com o modo que se impunha antes da transição, isto é, no ponto modal adjacente, de frequência mais baixa. O registro temporal associado ao ponto **B**, para $\beta = 11 \text{ rad/mm}$, é mostrado nessa figura com traço mais fino. Neste caso a atenuação é mais branda e deve-se à taxa de colisão dos portadores no plasma, visto que a frequência modal, de aproximadamente 160 GHz, está longe da ressonância magnética. A composição de modos nesse registro é devido à excitação de modo superior. Tanto a transição ou disputa de modos como a excitação de modos superiores, dificultam o cálculo da atenuação pelo método FDTD.

O efeito da orientação do campo B_o , sobre as características de propagação do guia, é semelhante à variação da sua magnitude. A Fig. 5.5 apresenta uma família de curvas de dispersão parametrizadas em termos da orientação do campo magnetostático, em relação ao eixo x, dado pelo ângulo θ_x , situado no plano XY. Para $\theta_x = 10^\circ$ (curva identificada com círculos) o efeito sobre a fase do modo E_{11}^x é imperceptível, porque o campo elétrico é praticamente paralelo ao campo B_o . À medida que o ângulo θ_x é incrementado, o efeito sobre a propagação do modo se estabelece com mais intensidade. Próximo ao corte, o efeito satura em torno de 65° . Observe que as transições são mais bruscas para valores

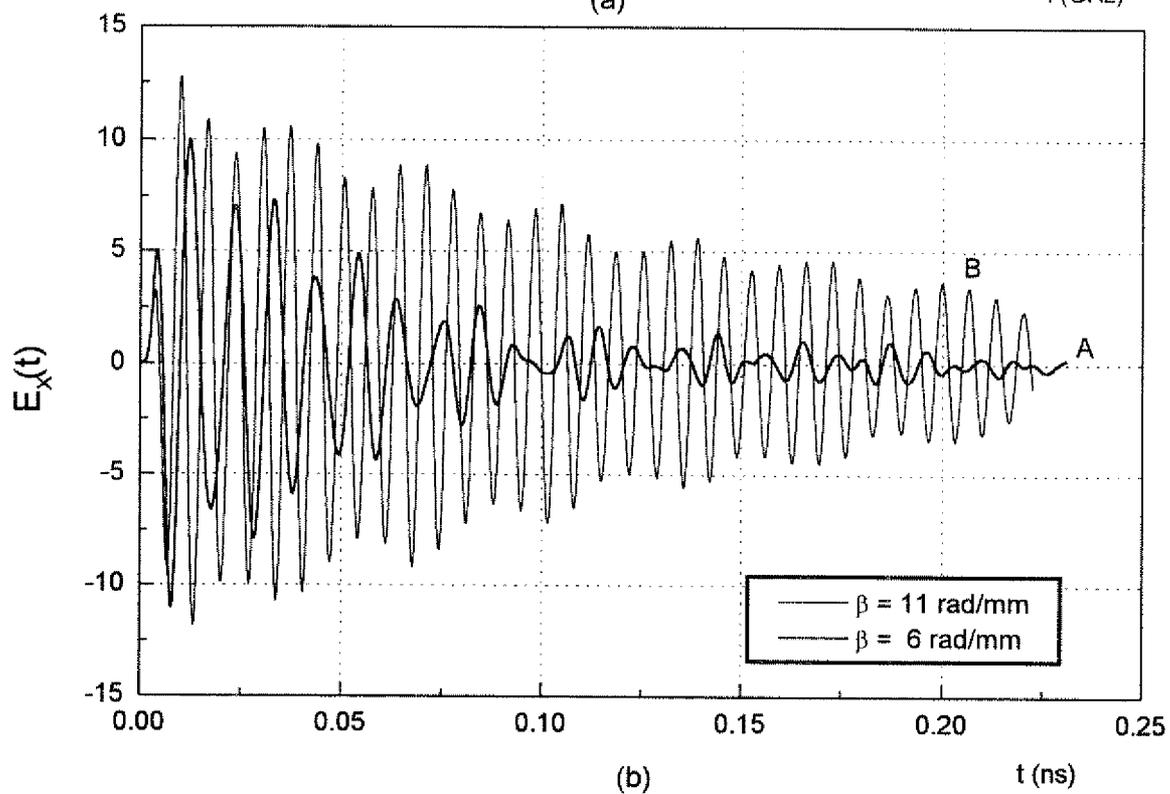
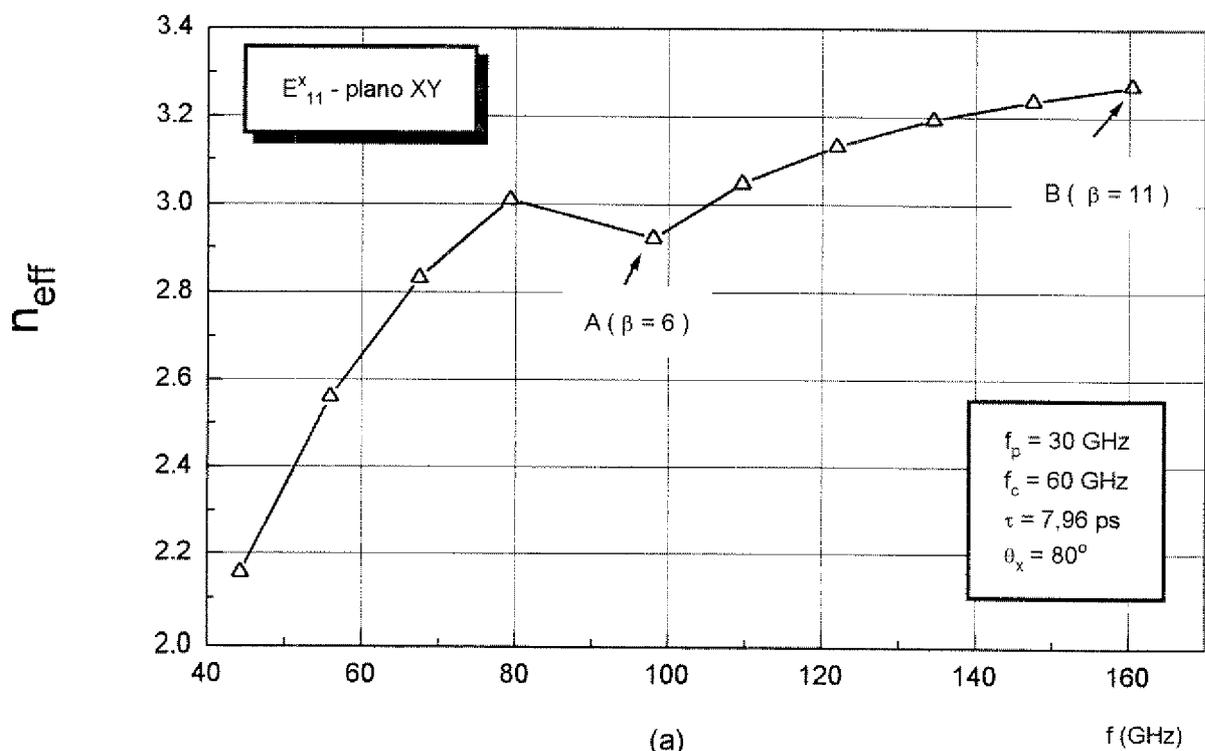


Fig. 5.4 - Efeito da giroressonância sobre a atenuação do modo dominante E^x_{11} : (a) característica de dispersão; (b) registros temporais obtidos nos pontos indicados na curva de dispersão.

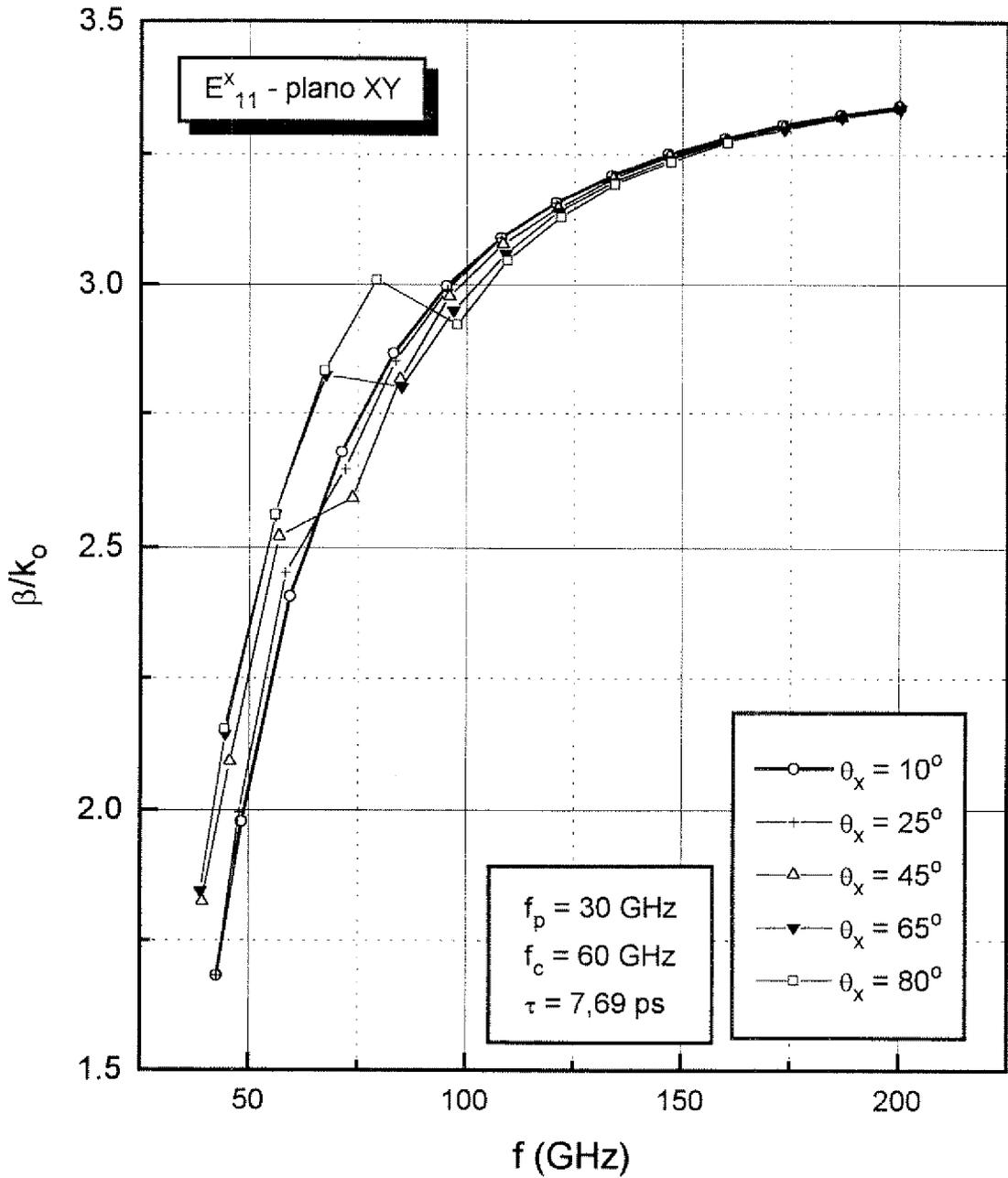


Fig 5.5 - Efeito da orientação do campo magnetostático sobre as características de dispersão do guia canal para o modo dominante E_{11}^x .

elevados de θ_x . As curvas marcadas com círculos ($\theta_x = 10^\circ$) e com quadrados ($\theta_x = 80^\circ$) delimitam o máximo que se pode conseguir, em diferença de fase para o modo E_{11}^x , para esse caso particular.

Os efeitos provocados pelo magnetoplasma para B_o situado em outros planos coordenados, são mais modestos do que os resultados apresentados acima. A Fig. 5.6 mostra as características de dispersão para $f_p = 30 \text{ GHz}$, $f_c = 60 \text{ GHz}$ e $\tau = 7,96 \text{ ps}$. O ângulo, θ_z , é tomado em relação ao eixo z . Tanto o modo E_{11}^x , como o modo E_{11}^y apresentam variação discreta na fase. Resultado semelhante foi obtido para variação em magnitude, B_o . Para polarização no plano YZ o resultado foi semelhante. Portanto o plano de polarização mais efetivo para controle de fase é o plano transversal à direção de propagação, XY (configuração tipo Voight).

A configuração tipo Voight, com campos de RF e B_o cruzados, pode apresentar características de propagação bastante complexas, quando o campo magnetostático é relativamente intenso. A Fig. 5.7 mostra as características de dispersão para o modo E_{11}^x em configuração Voight, para diversos valores da frequência ciclotron e $\theta_x = 80^\circ$.

A curva mais espessa, identificada com círculos vazios, foi obtida com polarização magnética mais intensa, com $f_c = 120 \text{ GHz}$. Os pontos modais assinalados com letras demarcam as transições entre modos de propagação. Os números entre parênteses representam o valor da constante de propagação, β , em rad/mm . Inicialmente, até $\beta = 2$ (ponto A), o modo E_{11}^x normal (denominado aqui de *ordinário*) se impõe. Entre os pontos A(2) e B(3) há uma transição para um outro tipo de modo E_{11}^x , denominado aqui de modo *extraordinário*, o qual se impõe sobre o modo *ordinário* até $\beta = 7$ (ponto C). Uma outra transição ocorre entre C e D, onde o modo *ordinário* volta a dominar. Segue-se então a transição de E para F devido ao efeito da giroressonância.

Esse tipo de comportamento é semelhante ao descrito por Bolle e Talisa [1], os quais analisaram as características de propagação de um *slab* de material semiconductor tipo n-GaAs. A Fig. 5 do trabalho de Bolle e Talisa[1] apresenta a curva de dispersão $\omega \times \beta$, com cinco ramificações, sendo três delas projetando-se na região de índice de refração real, ou

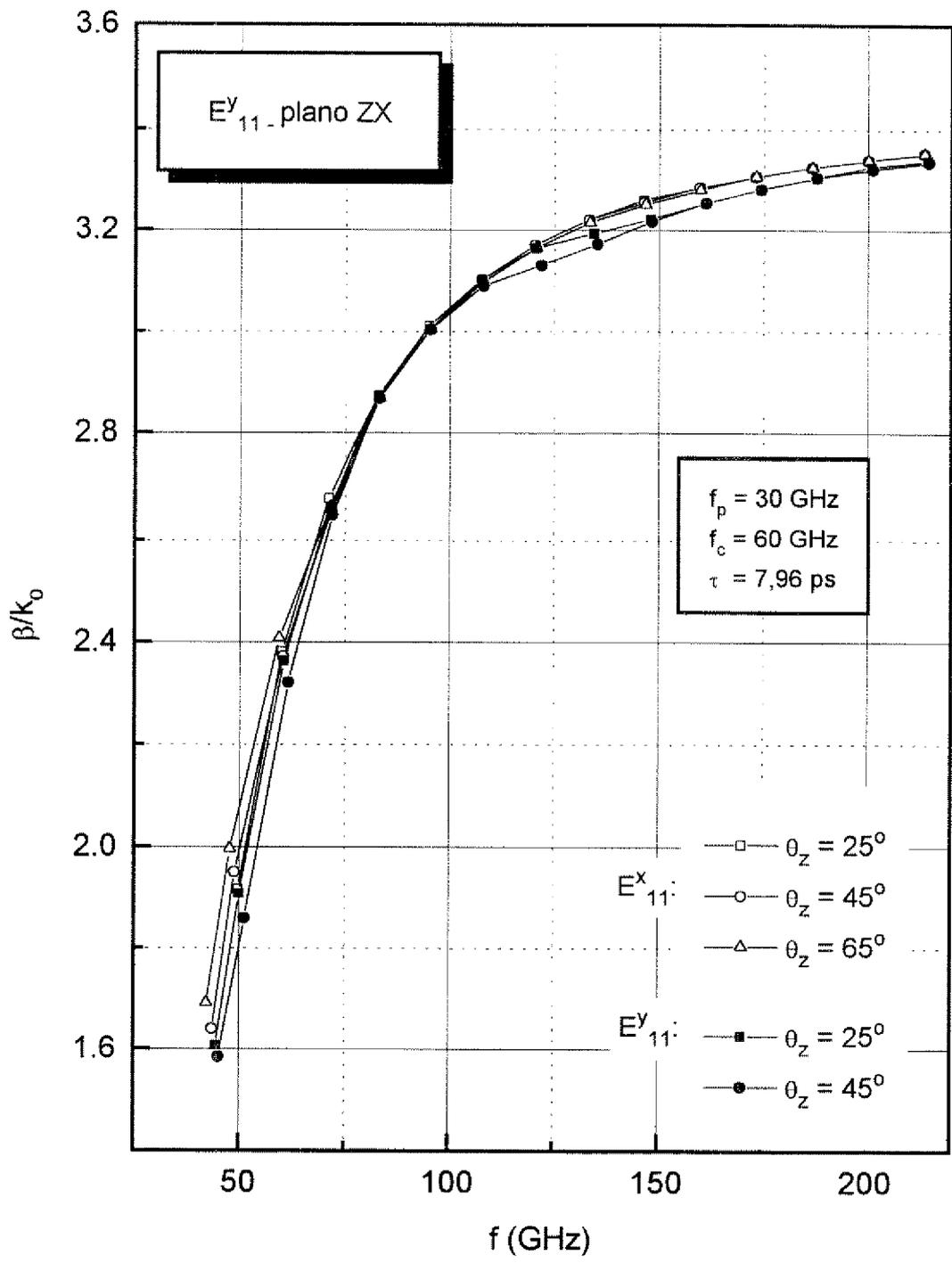


Fig. 5.6 - Efeito do ângulo do campo magnetostático sobre as características de fase dos modos dominantes E_{11}^y e E_{11}^x . A rotação do ângulo é no plano ZX.

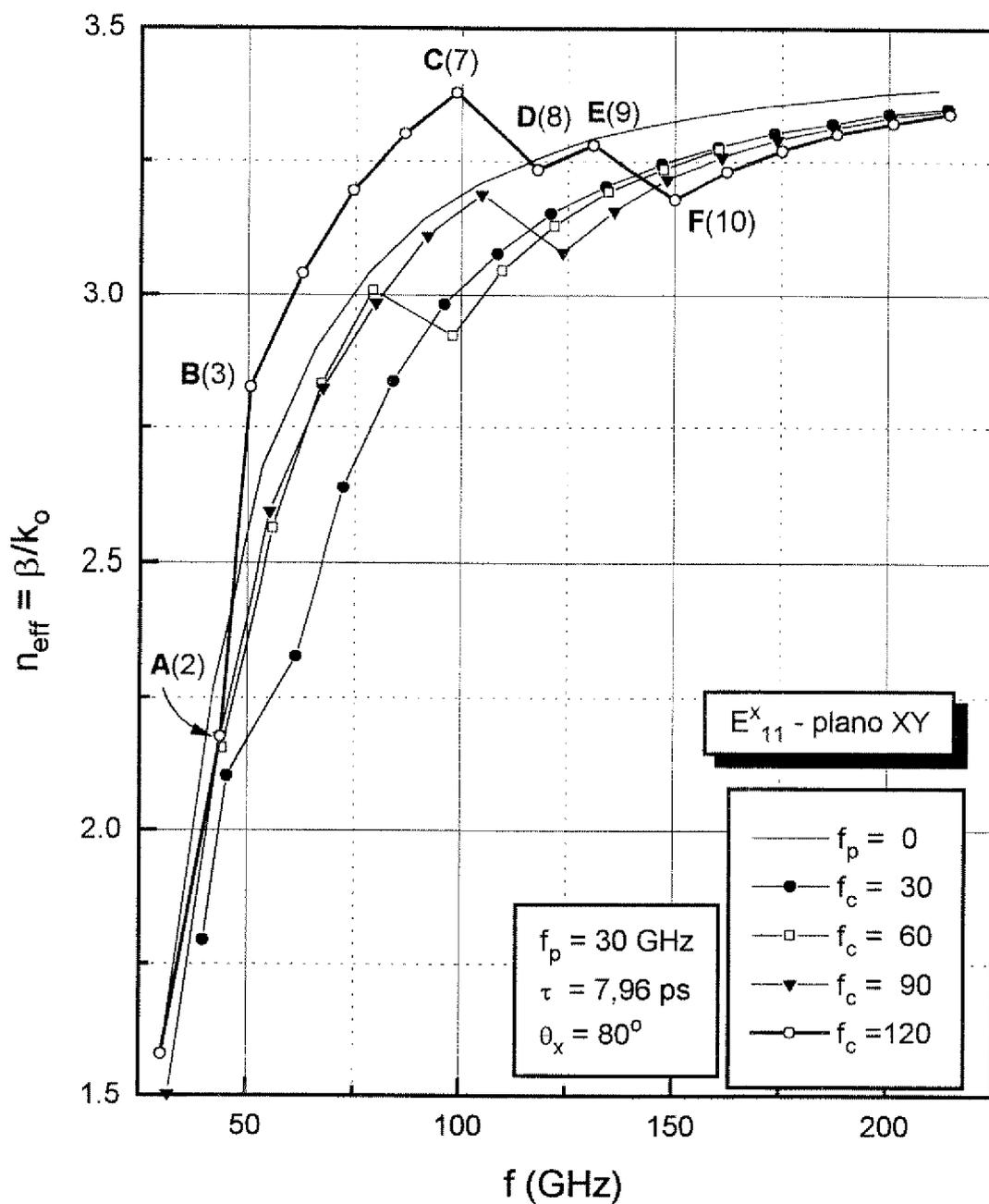


Fig. 5.7 - Efeito de campo magnético intenso sobre a característica de propagação do modo dominante, E^x_{11} , em configuração Voigt e B_0 quase perpendicular à componente E_x . O parâmetro f_c é dado em GHz.

ramos *dinâmicos*. Este termo é adotado aqui para diferenciar esses modos propagantes dos modos evanescentes. O algoritmo FDTD não consegue excitar modo evanescente em um intervalo de tempo significativo, quando na presença de modos dinâmicos, visto que esse método excita com muito mais naturalidade os modos dinâmicos. Isto impede o estudo dos efeitos não recíprocos em estruturas retangulares com magnetoplasma, pois são justamente esses modos evanescentes que provocam um grau de não-reciprocidade significativo em tais dispositivos [1], [3].

5.4 Guias canais acoplados, com núcleos constituídos de magnetoplasma em semicondutor

Na análise de guias canais acoplados, adota-se uma configuração simétrica para a estrutura, para que se possa utilizar o conceito de paredes elétrica e magnética para os modos ímpar e par, respectivamente. Isto é importante porque o núcleo de cada guia está totalmente cheio de magnetoplasma e o tempo de processamento para simulação é considerável para o tratamento desses materiais.

A Fig. 5.8 mostra a configuração do domínio numérico para análise dessa estrutura. Aqui o plano de simetria é substituído por uma parede elétrica ou magnética, sendo as demais paredes do tipo absorvente. Essa figura também mostra a envoltória ou perfil da evolução das dimensões das células, δ_x e δ_y , utilizadas para discretização do domínio computacional, o qual é limitado pelas paredes absorventes e *dura* (elétrica ou magnética).

A maioria dos parâmetros usados na presente simulação são os mesmos do item anterior, no qual foi tratado o guia canal singelo. Os parâmetros modificados ou inseridos são os seguintes:

- distância entre guias, $d = 2d' = 0,4 \text{ mm}$,
- largura (altura) do domínio computacional, $L_x = 4,2 \text{ mm}$ ($L_y = 5,0 \text{ mm}$),
- número de células segundo os eixos de referência, $n_x = 34$ e $n_y = 34$.

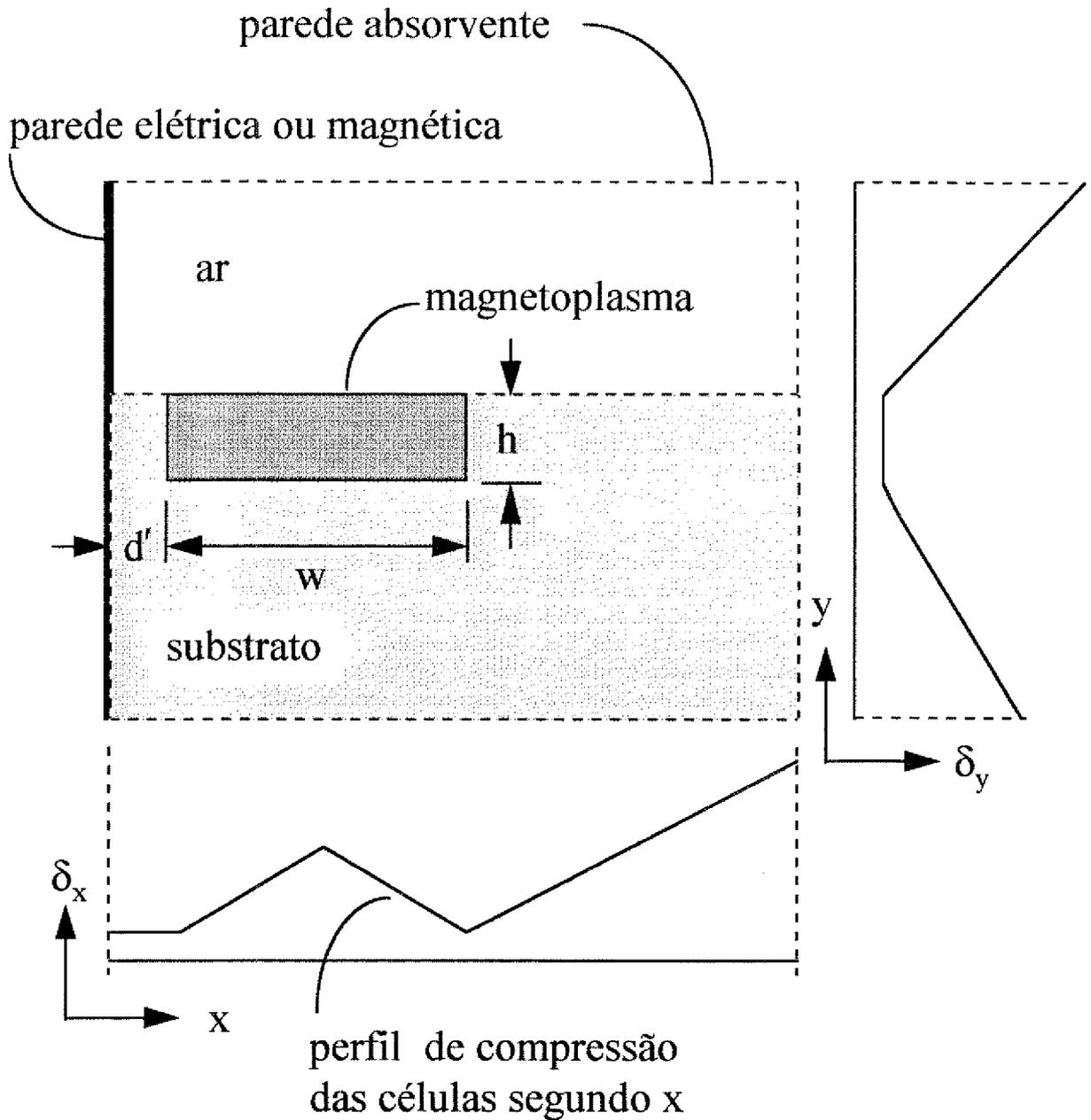


Fig. 5.8 - Configuração do domínio numérico para guias acoplados utilizando conceito de paredes elétrica e magnética. Os perfis de compressão (expansão) das células segundo os eixos de referência, são mostrados esquematicamente.

A Fig. 5.9 apresenta uma *visão panorâmica* das características de transmissão para os modos dominantes E_{11}^x , par e ímpar, e também E_{11}^y , par e ímpar, quando submetidos a diferentes graus de orientação, especificado por θ_x , do campo magnetostático girando no plano transversal, XY , da estrutura. Os parâmetros fixos são: frequência de plasma, $f_p = 30 \text{ GHz}$, frequência ciclotron, $f_c = 90 \text{ GHz}$ e $\tau = 7,96 \text{ ps}$.

Como já era esperado, o impacto maior da magnetização é verificado nos modos E_{11}^x par e ímpar, enquanto que os efeitos sobre os modos E_{11}^y par e ímpar são muito modestos. Em geral a magnetização provoca uma discriminação crescente entre os modo E_{11}^x e E_{11}^y quando o ângulo θ_x aumenta, isto é, quando a força de Lorentz aumenta para o modo E_{11}^x e diminui para E_{11}^y . Este comportamento, para os modos pares, é mostrado na Fig. 5.10. Nesta figura, a menor discriminação entre as características de propagação acontece para o ângulo $\theta_x = 25^\circ$ (curvas marcadas com quadrados). Para o ângulo $\theta_x = 65^\circ$ (curvas identificadas por círculos) os modos apresentam a maior diferença de fase.

Da Fig 5.9 constata-se que o modo dominante da estrutura com magnetoplasma é o E_{11}^x ímpar e o modo superior mais próximo é o E_{11}^x par. A Fig. 5.11 mostra esses modos para diversos ângulos de orientação do campo magnetostático. Os parâmetros fixos são mantidos, exceto que são incluídas duas curvas de referência correspondentes ao campo magnetostático residual, isto é, aquele para o qual o efeito sobre a fase é desprezível. Neste caso, o campo magnetostático é caracterizado pela frequência ciclotron igual a 10 GHz ($B_o = 235 \text{ G}$). Observe que o efeito diferencial de fase entre esses modos são muito pequenos. Isto porque os modos tendem a deslocar no mesmo sentido quando θ_x é alterado. Isto implica que o controle de acoplamento entre guias, pelo campo magnetostático, não é tão efetivo como nos dispositivos com controle óptico.

Talvez a vantagem principal do magnetoplasma, em guias dielétricos, seja o controle da não reciprocidade sobre a propagação dos campos de RF. Infelizmente, o método aplicado aqui não é adequado para analisar esse tipo de efeito.

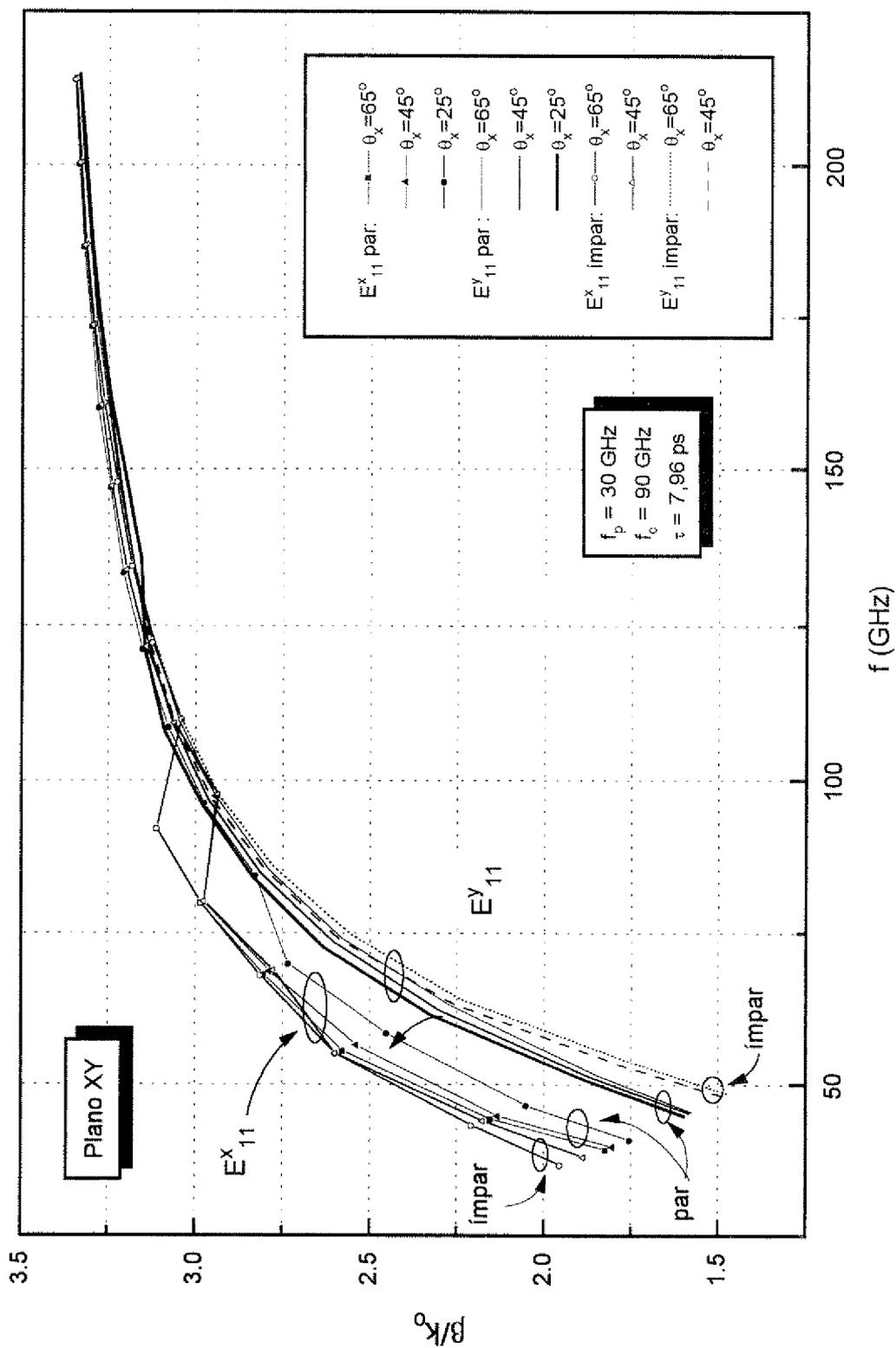


Fig. 5.9 - Efeito da orientação do campo magnetostático sobre as características de dispersão dos modos E^x_{11} e E^y_{11} par e impar. A rotação de B_0 é feita no plano XY.

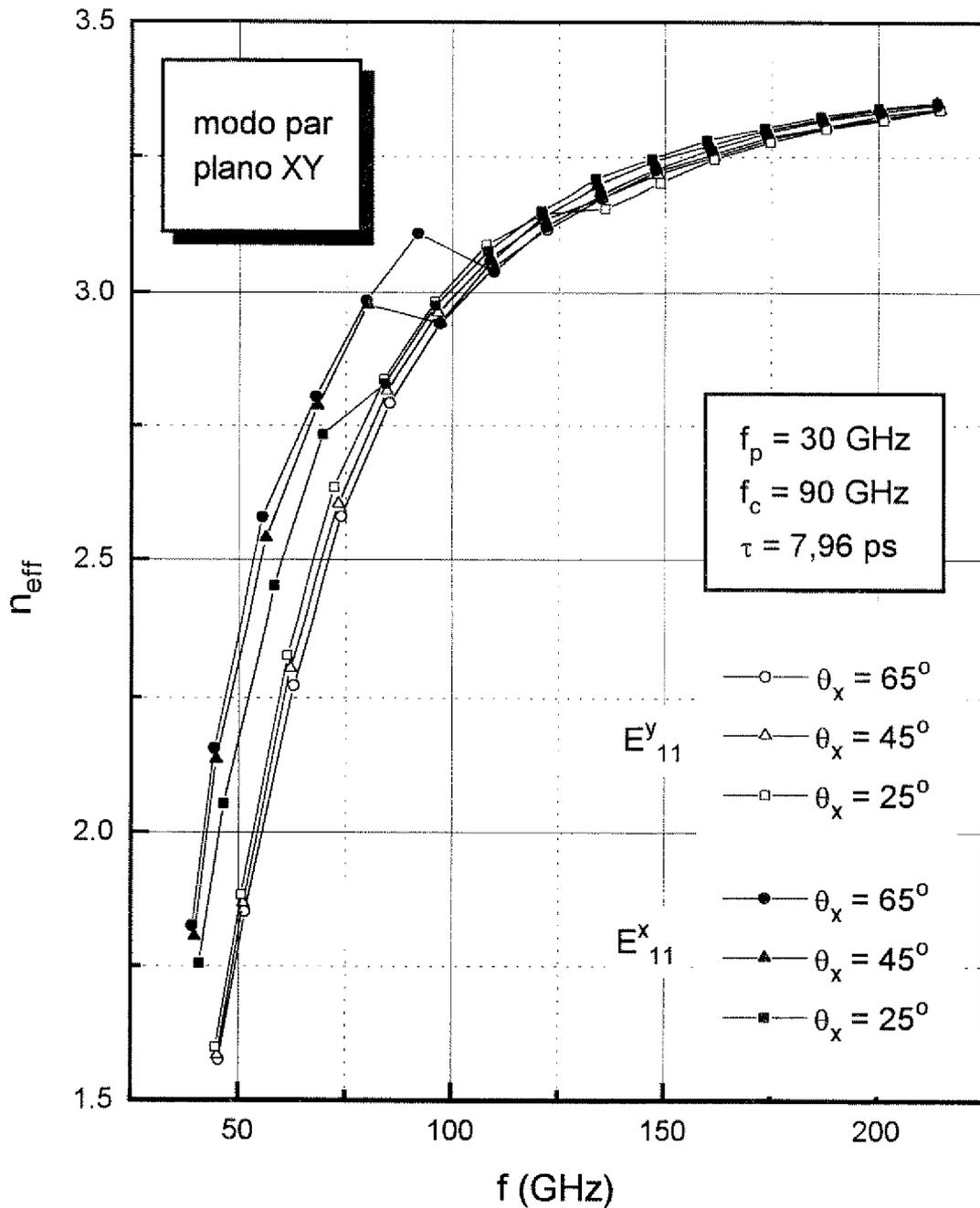


Fig. 5.10 - Efeito da orientação do campo magnetostático sobre as características de propagação dos modos E^y_{11} e E^x_{11} , ambos pares. A rotação do campo B_0 é no plano XY.

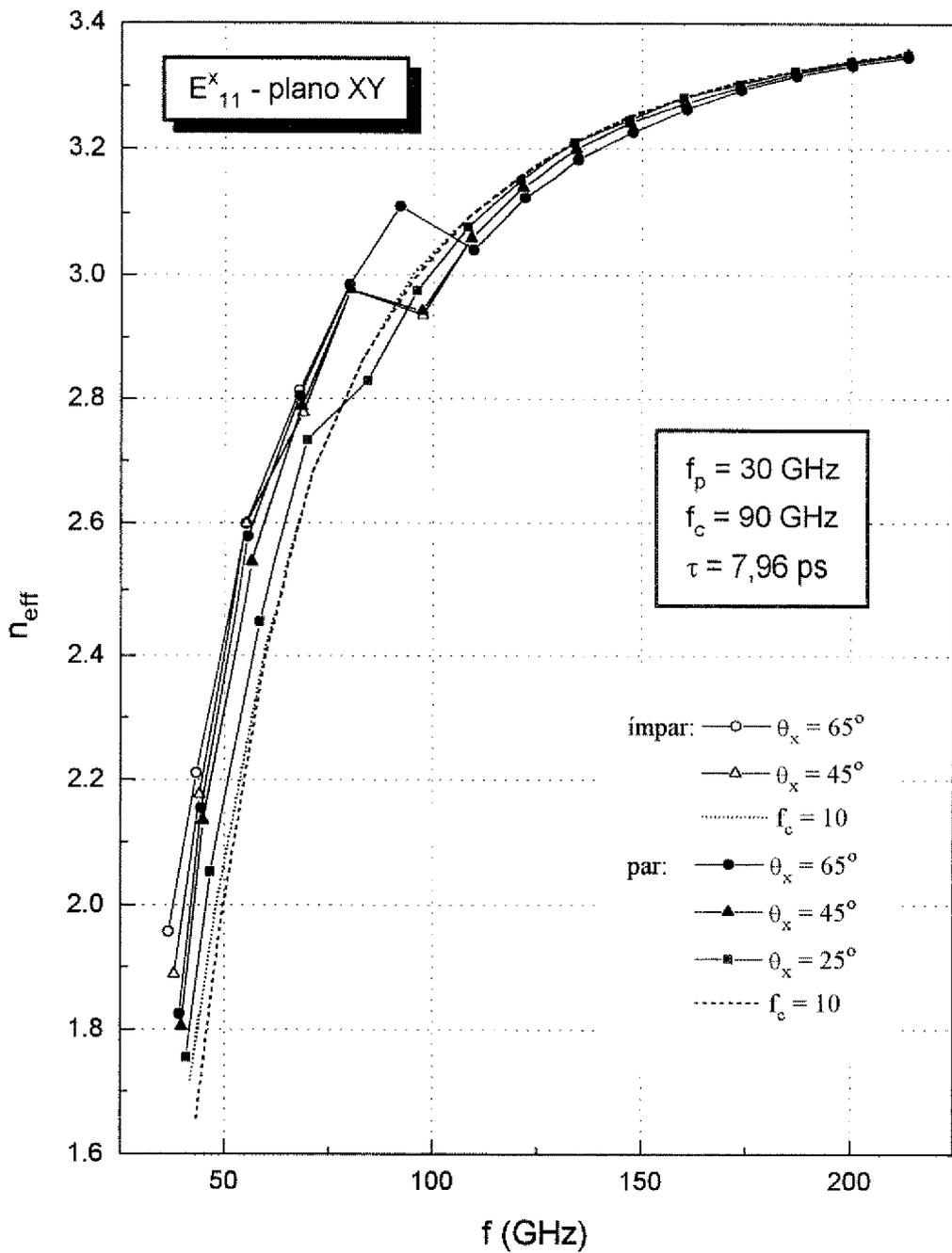


Fig. 5.11 - Efeito da orientação do campo magnetostático sobre as características de propagação dos modos E^x_{11} par e ímpar. f_c (residual) é dado em GHz.

Referências

- [1] D. M. Bolle e S. H. Talisa, "Fundamental considerations in millimeter and near-millimeter component design employing magnetoplasmons", *IEEE Trans. Microwave Theory and Tech.*, vol MTT-29, pp.916-923, set. 1981.
- [2] D. G. Swanson, "Plasma Waves", *Academic Press*, 1989.
- [3] S. H. Talisa e D. M. Bolle, "Performance predictions for isolators and differential phase shifters for the near-millimeter wave range", *IEEE Trans. Microwave Theory Tech.*, vol. MTT-29, pp. 1338-1343, dez. 1981.

Capítulo 6

Conclusões

O método das diferenças finitas no domínio do tempo considerado neste trabalho, é uma versão mais abrangente para o tratamento de magnetoplasma. O operador derivada, tanto no tempo como no espaço, foi aproximado por diferença finita centrada e aplicado diretamente às equações de Maxwell [1]. A extensão do método está no cálculo da convolução entre o vetor intensidade de campo elétrico e o tensor susceptibilidade elétrica, usando princípios originalmente estabelecidos por Luebbers et al. [2]. O presente tratamento, como desenvolvido nos Capítulos 2 e 3, permite analisar plasma com campo magnetostático segundo direção arbitrária.

Nos Capítulos 4 e 5 foram analisados os dispositivos propostos, usando esse método (FDTD estendido). No Capítulo 4 foram apresentados critérios e testes de convergência estabelecidos aqui. Não foi possível aplicar critérios analíticos para convergência ou estimativa de erros, por causa da complexidade do problema, tais como: meios e geometrias complexos, com graduação de malha. Os testes de convergência foram feitos em detalhes por causa de carência de resultados similares na literatura. Para tanto, foram usados todos os recursos disponíveis gerados pelo método, a saber: características de dispersão, resposta espectral e distribuição espacial dos campos.

É importante ressaltar que o método FDTD, na forma como foi tratado aqui, embora muito versátil, não é adequado para analisar quantitativamente as perdas em estruturas

complexas, por causa de disputa modal ou presença de modo superior com menor perda. Também não é apropriado para obter efeitos devidos a campos evanescentes. Isto é inerente ao método FDTD, quando aplicado diretamente às equações de Maxwell e usando célula de Yee. Essas dificuldades devem-se à simulação de propagação da onda e a utilização de registro temporal dos campos para obtenção da frequência modal.

Apesar dessas limitações, o método permitiu obter características de dispersão em fase, resposta temporal e distribuição espacial, com detalhamento, para dispositivos bastante complexos. Também, permitiu um prognóstico comparativo de atenuação.

Para os dispositivos propostos, os resultados mais significativos são descritos a seguir.

No Cap. 4 foram analisados os guias opticamente controlados. Mostrou-se que o guia com núcleo semicondutor com baixo contraste no índice de refração, apresentou alta sensibilidade no desvio de fase, ou índice de refração efetivo, quando sujeito à variação de luz incidindo sobre uma película semicondutora (*plasma host*), com *gap* de energia maior do que o do núcleo. Operando esse dispositivo em níveis de luz alto e baixo, parece possível contornar a absorção devida ao plasma induzido. Desta forma, acredita-se que seja possível modular de maneira eficiente a fase ou, então, controlar a região de operação monomodo do guia.

Quando acoplados, esses guias permitiram controlar dinamicamente o acoplamento entre eles, para um dado dimensionamento físico do dispositivo. A radiância de pico estimada para esse tipo de operação, usando GaAs em 300 K, foi da ordem de 13 mW/cm^2 .

Além disso, foram observados dois tipos de efeitos atuando sobre os campos de RF, devido à presença do plasma: *efeito especular* e interação entre plasma e campos de RF, ou simplesmente *efeito de interação*. O *efeito especular* se manifesta em frequências mais baixas, para densidade de plasma acima de um certo valor. Nesta situação o plasma comporta-se aproximadamente como um espelho, para o modo dominante do guia, E_{11}^y . O *efeito de interação* deve-se à penetração dos campos de RF no plasma, em frequências acima de um certo valor. Esses efeitos coexistem simultaneamente numa faixa de frequências, ou região de transição. Para minimizar a absorção do sinal, é necessário

evitar a operação na região na qual o *efeito de interação* predomina.

Por exemplo, para plasma com densidade moderada, observou-se claramente a transição gradual entre esses dois efeitos.

O efeito do campo magnetostático sobre as características de fase do modo dominante em guias canal, apresentou efeitos mais modestos do que aqueles obtidos nos guias opticamente controlados. Para guias acoplados os resultados não foram promissores, com respeito ao controle de acoplamento.

Talvez o controle de efeitos não recíprocos sobre os campos de RF sejam as principais vantagens dessas estruturas. Entretanto, esses efeitos são provocados principalmente por campos evanescentes [3], [4]. O algoritmo FDTD da maneira como aplicado aqui, não é adequado para análise desses modos, por causa da forte atenuação dos modos dominantes e excitação de modos superiores.

Alguns tópicos adicionais poderão ser tratados com os recursos desenvolvidos neste trabalho. A inclusão de anisotropia no núcleo dos guias opticamente controlados parece ser um bom exemplo a ser estudado. Outras possibilidades são:

- estudo de estruturas com geometrias curvas;
- estruturas tridimensionais e
- dispositivos dielétricos com multicamadas.

Referências

- [1] K. S. Yee, "Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell equations in isotropic media", *IEEE Trans. Antennas Propagat.* vol. AP-14, pp. 302-307, maio 1966.
- [2] R. J. Luebbers, F. P. Hunsberger, K. S. Kunz e M. Schneider, "A frequency-dependent finite-difference time-domain formulation for dispersive materials", *IEEE Trans. Electromag. Compat.*, vol. ECM-32, pp. 222-227, agosto 1990.
- [3] M. Bolle e S. H. Talisa, "Fundamental considerations in millimeter and near-millimeter component design employing magnetoplasmons", *IEEE Trans. Microwave Theory Tech.*, vol. MTT-29, pp. 916-923, set. 1981.
- [4] S. H. Talisa e D. M. Bolle, "Performance predictions and differential phase shifters near-millimeter wave range", *IEEE Trans. Microwave Theory Tech.*, vol. MTT-29, pp. 1338-1343, dez. 1981.

Apêndice A

Algoritmo empregado na implementação da técnica FDTD para análise de guias dielétricos.

O procedimento básico para a implementação do algoritmo FDTD, em dispositivo semi-condutor contendo plasma, compreende os seguintes passos:

- Entrar com parâmetros básicos da estrutura.
- Calcular os parâmetros do plasma [Cap.2, eqs. (2.9), (2.10), (2.26)-(2.29), (2.32)-(2.35). Cap. 4, eqs. (4.4), (4.8), (4.10)].
- Configurar o domínio numérico a partir da geometria e materiais da estrutura.
- Repetir os passos seguintes para cada valor da constante de fase, β (rad/mm):
 - Calcular o incremento temporal, δt , de modo a garantir estabilidade do método [eqs. (3.84), (3.85)].
 - Inicializar os campos eletromagnéticos e as convoluções em $t = 0$ ($n = 0$).
 - Repetir os seguintes passos até que a resposta espectral dos campos estabilizem, para cada célula da malha:
 - * Aplicar pulso de excitação [eq. (3.82)], sobre uma das componentes transversais do campo elétrico.
 - * Obter o campo rotacional auxiliar, $\mathbf{R}_e^n(I, J)$ [eq. (3.79)].
 - * Obter o campo magnético, $\mathbf{H}^{n+\frac{1}{2}}(I, J)$ [eq. (4.1)].
 - * Aplicar as condições de contorno às componentes do campo $\mathbf{H}^{n+\frac{1}{2}}(I, J)$, nas paredes da estrutura [eqs. (3.86), (3.87), (3.91), (3.92)].
 - * Calcular o campo rotacional auxiliar $\mathbf{R}_n^{n+\frac{1}{2}}(I, J)$ [eq. (3.80)].
 - * Calcular a convolução diferença, $\psi^n(I, J)$ [Eqs. (3.59)-(3.62)] se o material for plasma.

- * Obter o campo elétrico, $\mathbf{E}^{n+1}(I, J)$ [eq. (4.5) ou eqs. (5.16)-(5.18)].
 - * Aplicar as condições de contorno às componentes de $\mathbf{E}^{n+1}(I, J)$.
 - * Extrair as distribuições espaciais das componentes de $\mathbf{E}^{n+1}(I, J)$ ou de $\mathbf{H}^{n+\frac{1}{2}}(I, J)$.
 - * Obter o registro temporal das componentes de $\mathbf{E}^{n+1}(I, J)$ ou de $\mathbf{H}^{n+\frac{1}{2}}(I, J)$, no ponto de referência, P_{rp} .
 - * Armazenar as componentes de $\psi^n(I, J)$, para uso no processo iterativo.
 - * Incrementar as variáveis espaciais ($I \rightarrow I + 1, J \rightarrow J + 1$).
- Atualizar os campos $\mathbf{E}^{n+1} \rightarrow \mathbf{E}^n$ e $\mathbf{H}^{n+1/2} \rightarrow \mathbf{H}^{n-1/2}$.
- Incrementar a variável espacial ($n \rightarrow n + 1$).

- Obter a transformada de Fourier para os registros temporais.
- Calcular a frequência de ressonância a partir do espectro de Fourier.
- Repetir o processo acima para outro valor da constante de atenuação
- Obter tempo de CPU
- Sair com os seguintes arquivos de dados:

<file>o: parâmetros básicos de entrada/saída.

<file>b: característica de dispersão, β/k_o versus $f(GHz)$.

<file>t: registro temporal de uma componente de campo.

<file>f: transformada de Fourier do registro temporal.

<file>y: distribuição espacial da componente de campo, ao longo de \mathbf{u}_y .

<file>x: distribuição espacial da componente de campo, ao longo de \mathbf{u}_x .

<file>g: grade de discretização espacial do domínio numérico, $\delta x(I)$ e $\delta y(J)$.

Obs. O prefixo <file> é um *string* de até 7 caracteres. Tem por finalidade identificar o programa fonte.