ANEXO 1

TUTORIAL DE SIMULAÇÃO

Neste documento é apresentado instruções para projetar o modulador de eletro-absorção em estudo. A modelagem do dispositivo foi feita em modelo 2D no Software *MULTIPHISYCS COMSOL*, versão 5.5. As figuras apresentadas são relativas às simulações feitas com PMMA depositado sobre o capacitor. Para realizar as simulações deve-se atentar aos seguintes passos:

1. Passo – Definição de Interface Fisíca

Para selecionar a interface física, clica-se sequencialmente em Model Wizard-2D- Optics- Wave Optics- Electromagnetic Waves, Frequency Domain (ewfd). Em seguida, a estudo a ser selecionado é Mode Analysis.

As interfaces que compõe *Optics* podem ser usadas para modelagem eletromagnética de dispositivos nano-ópticos e plasmônicos, guias de ondas e fibras, fenômenos de espalhamento óptico e óptica não linear.

As interfaces em *Wave Optics* são usadas para calcular campos elétricos e magnéticos para sistemas onde o comprimento de onda é comparável ou muito menor do que o dispositivo ou sistema estudado. No caso da interface *Electromagnetic Waves*, *Frequency Domain*, o intuito é resolver distribuições de campo eletromagnético de tempo harmônico.

Para a interface *ewfd* o tamanho máximo do elemento de malha deve ser limitado a uma fração do comprimento de onda. O tamanho do domínio que pode ser simulado, portanto, é dimensionado com a quantidade de memória do computador disponível e o comprimento de onda. E dentre as opções de estudo desta interface, neste trabalho foi adotado o *Mode Analysis*, que é usado para calcular as constantes de propagação ou números de onda, bem como formas de modo de propagação, para uma determinada frequência.

2. Passo – Declaração de Variáveis e Parâmetros

Em *Global Definitions-Parameters* foram declaradas aquelas variáveis, como largura do capacitor e espessura do dielétrico, as quais servirão de parâmetro em *Parametric Sweep*.

Em *Global Definitions-Variables* foram inseridas as variáveis pré-definidas, como: os raios do SAP, núcleo e casca, além das variáveis que determinam as propriedades ópticas e elétricas dos dielétricos e da fibra.

3. Passo – Modelagem do Dispositivo

Em *Component-Geometry* foram feitas as definições das unidades geométricas. Ao clicar com o botão direito do *mouse* é aberto um menu de opções geométricas, na qual foram adotados neste trabalho círculos e retângulos, para dar forma ao dispositivo 2D, como pode ser visto canto esquerdo da Figura 1. E ainda foram utilizadas funções booleanas da diferença como polimento da face da fibra e a função união para unir os componentes.

Dentro de cada geometria que compõe o componente (núcleo, casca, SAP, dielétrico) há lacunas que foram preenchidas com as variáveis definidas em *Variables* e *Parameters*, para o raio dos círculos, posição no eixo x e y, altura etc. Neste ponto é importante que as localizações dos componentes tenham sido bem definidas para que, ao clicar em *build all*, o núcleo, os SAPs, a casca, o dielétrico estejam em suas corretas posições.

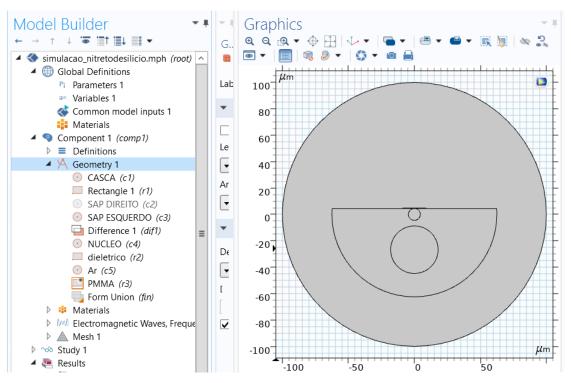


Figura 1 – Modelagem da fibra com seu eixo lento na vertical.

Fonte: Elaborado pelo autor.

4. Passo – Declaração de Materiais

Em *materials*, com o menu aberto pelo botão direito do *mouse* foram criados múltiplos *blank materials* para inserir somente as propriedades necessárias de cada material em estudo como: índice de refração, modulo de Young, razão de Poisson e constante dielétrica.

Como nesse trabalho foram estudados moduladores para diferentes dielétricos, a comutação de troca entre os dielétricos foi feita manualmente estabelecendo *enable* para o elemento em estudo e *disable* para os demais, Figura 2.

Model Builder Settings Graphics @ @ ▼ ⊕ ⊕ ↑ ↓ 🐷 📰 🖫 🔻 Material R 🕷 🖎 🕽 🕶 To o O CASCA (c1) O - @ A Rectangle 1 (r1) Geometric entity level: Domain SAP DIREITO (c2) Selection: Manual SAP ESQUERDO (c3) 160 Difference 1 (dif1) +140 NUCLEO (c4) 120 dieletrico (r2) 1 100 Ar (c5) PMMA (r3) 80 Form Union (fin) 60 # Materials 40 ▶ # nucleo (mat1) 20 Override ▶ # SAP (mat2) U. CASCA (mat3) Material Properties -20 Air (mat4) Material Contents Alumina (mat5) -40° nitreto de silicio (mat6) -60 silica (mat7) Property Variable Value Unit -80 initreto de boro (mat8) Refractive index.... n_iso ;... 1.450462 -100 PMMA (mat9) Refractive index,... ki_iso... 0 -120 ▶ IM Electromagnetic Waves, Free 70.7e9 Young's modulus Ε Pa -140 A Mesh 1 Poisson's ratio 0.161 nu

Figura 2 – Definindo as propriedades do material para o núcleo da fibra.

Fonte: Elaborado pelo autor.

5. Deposição do Grafeno

Em Electromagnetic Waves, Frequency Domain (ewfd), além de Wave Equation, Perfect Electric Conductor e Initial Values gerados automaticamente, foram adicionadas as interfaces Scattering Boundary Condition e Surface Current Density duas vezes.

Em *Surface Current Density* foram inseridas as equações de densidade de corrente superficial pré-determinadas, a quais representam as folhas de grafeno, em níveis de Fermi em 150 meV e 500 meV, para as direções do campo eletromagnético x, y e z, de acordo com a Figura 3. Essas densidades de corrente são depositadas nas superfícies horizontais do dielétrico formando então um capacitor, como pode ser visto na Figura 4.

Settings Model Builder Graphics → ↑ ↓ 🖝 📑 🗐 🕶 **√** ▼ | **□** ▼ Surface Current Density simulacao_nitretodesilicio.mph (root) | 🗐 | 🍕 👂 🕶 Label: grafeno densidade de corrente superficial e Global Definitions Parameters 1 ▼ Boundary Selection Variables 1 140 Common model inputs 1 Selection: Manual 120 Materials Component 1 (comp1) 100 ■ Definitions

A Geometry 1 80 1 60 # Materials Electromagnetic Waves, Frequency Domain (ewfd) 40 Wave Equation, Electric 1 20 Perfect Electric Conductor 1 0 Initial Values 1 Describeration Override and Contribution Scattering Boundary Condition 1 -20 grafeno densidade de corrente superficial em 0.15 ev Equation -40° grafeno densidade de corrente superficial em 0.5 ev -60 Mesh 1 ▼ Coordinate System Selection Study 1 -80 Coordinate system: Results. -100 Datasets Global coordinate system -120 Views Derived Values
Tables Surface current density -100 ewfd.Ex*(60.827-0.375i)*1e-6[S] Campo Eletrico (ewfd) Electric Field (ewfd) 1

* 1D Plot Group 3 ewfd.Ey*(60.827-0.375i)*1e-6[S] Progress Log Messages Export

Figura 3 – Incluindo as densidades de corrente para as folhas de grafeno.

Fonte: Elaborado pelo autor.

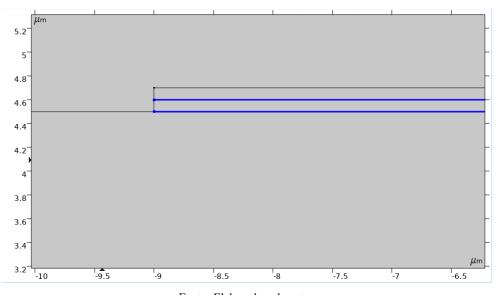


Figura 4 – Deposição das folhas de grafeno nas superfícies horizontais do dielétrico.

Fonte: Elaborado pelo autor.

6. Passo – Geração da Malha

Em *Mesh*, ao clicar em *build all* é gerada a malha se todos os componentes e propriedades estiverem definidas corretamente, Figura 5.

Model Builder Settings Graphics ← → ↑ ↓ 🖝 🗐 📳 🔻 **Q Q ⊕ ⊕ ⊕ ⊕** \$ 5 @ V Mesh \$ 2 ▼ () - (a) simulacao_nitretodesilicio.mph (root) Build All (III) Global Definitions 80 µm Label: Mesh 1 Pi Parameters 1 70 Variables 1 Mesh Settings Common model inputs 1 60 Materials Sequence type: 50 Component 1 (comp1) User-controlled mesh Definitions 40 30 ▶ M Electromagnetic Waves, Frequency Do 20 ▲ Mesh 1 10 Size
Free Triangular 1 0 Refine 1 -10 Study 1 -20 Results -30 Datasets -40° Derived Values -50 ▶ **III** Tables Campo Eletrico (ewfd) -60 Electric Field (ewfd) 1

* 1D Plot Group 3 -707 -50

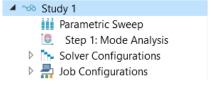
Figura 5 – Gerando a malha.

Fonte: Elaborado pelo autor.

7. Passo – Definição do Tipo de Estudo

Em *Study*, Figura 6, deve-se ter atenção somente aos itens *Parametric Sweep* e *Step 1: Mode Analysis*, onde o primeiro deve ser adicionado pelo menu de opções gerado com o botão direito do *mouse* e o segundo é obtido direto da definição de interface discutida no 1. Passo.

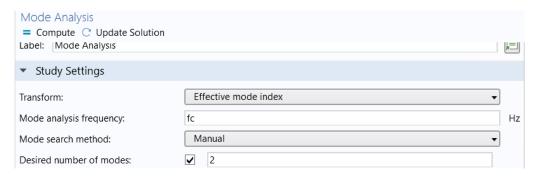
Figura 6 – Parâmetros de estudo.



Fonte: Elaborado pelo autor.

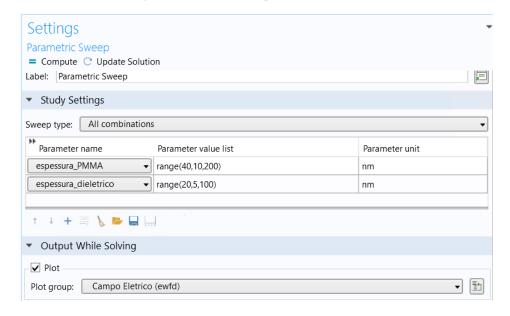
Em Mode Analysis foi inserido a frequencia de operação fc, definida em Variables, de acordo com o comprimento de onda de simulação. Assim como foi indicado o valor 2 para numero de modos desejaveis (TE e TM). Após todas essas definições foram geradas as simulações.

Figura 7 – Definindo a frequência de operação.



Fonte: Elaborado pelo autor.

Figura 8 – Varredura em espessura do PMMA e dielétrico.



Fonte: Elaborado pelo autor.

8. Passo – Resultados

Em *Derived Values* – *Global Evaluation* seleciona-se o *dataset* e define-se a expressão *ewdf.dampzdB* para obter os resultados de atenuação para cada simulação gerada pelo *Parametric Sweep*, Figura 9. Para gerar a planilha corresponde aos resultados do conjunto de simulações basta clicar em *Evaluate*.

🍃 🕶

Model Builder Settings ← → ↑ ↓ 🐱 🗐 🗒 🔻 Global Evaluation ■ simulação nitretodesilicio.mph (root) = Evaluate ▼ Global Definitions Label: Global Evaluation 1 Component 1 (comp1) Study 1 Data ■ Results Datasets Study 1/Parametric Solutions 4 (sc ▼ Dataset: ■ 8.85 Derived Values Parameter selection (espessura PMMA): From list 65 Global Evaluation 1 Parameter values (espessura PMMA (nm)) Surface Integration 1 40 ▶ **III** Tables 50 Campo Eletrico (ewfd) 60 Electric Field (ewfd) 1

* 1D Plot Group 3 70 Export All Parameter selection (espessura_dieletrico):

Effective mode index selection:

Table columns:

▼ Expressions

Expression

ewfd.dampzdB

First

Data only

Unit

rad/mm

Description

vert0 dB

Figura 9 – Definindo função para gerar planilha.

Fonte: Elaborado pelo autor.

Reports

A planilha resultante é apresentada na figura 10 onde as colunas foram definidas em *Column Headers*.

Model Builder Settings Graphics ← → ↑ ↓ 🕭 🖫 🖬 🔻 @ @ • 🖶 🗇 | 👉 • | 🖨 • | ● **▼** ● **▼** 및 | | | | | | | | | | | | | | ▲ ❖ simulacao_nitretodesilicio.mph (root) Update Global Definitions 0.5 Component 1 (comp1) Label: Table 1 Study 1 ▼ Data Progress Log Table 1 × ■ Results Messages X # Datasets Presentation format: √ Views ■ № Derived Values Filled table structure espessura_PMMA (nm) espessura_dieletrico (nm) lambda dB/mm 65 Global Evaluation 1 20.000 0.20937 espessura_PMM₁ ▼ Surface Integration 1 1.4474 0.23674 40.000 25.000 espessura_dielet • Line Integration 2 40.000 30.000 1.4474 0.26954 40.000 35.000 1.4474 0.30929 vert0 dB (rad/m⊨ ▼ Data: Table 1 40.000 40.000 1.4474 0.35811 Campo Eletrico (ewfd) Import... 40.000 45.000 1 4474 0.41892 Electric Field (ewfd) 1

** 1D Plot Group 3 40.000 50.000 1.4474 0.49598 ▼ Storage 40.000 55.000 1.4475-1.6368E-5i 0.59552 Export In model ▼ Store table: 40.000 60.000 1.4475-1.9984E-5i 0.72710 Reports 40.000 65.000 1.4475-2.4896E-5i 0.90582 Maximum number of rows: 10000 40.000 1.4475-3.1789E-5i 1.1566 70.000 40.000 75.000 1.4476-4.1853E-5i 1.5227 ▼ Column Headers 40.000 80.000 1.4476-5.7283E-5i 2.0842 40.000 85.000 1.4477-8.2434E-5i 2.9992 40.000 90.000 1.4478-1.2670E-4i 4.6098 espessura PMMA (nm) 40.000 95.000 1.4479-2.1237E-4i 7.7266 espessura dieletrico (nm) 40 000 100.00 1.4482-3.9725E-4i 14.453 lambda 50,000 20,000 1 4474 0.22862

Figura 10 – Geração de Planilha.

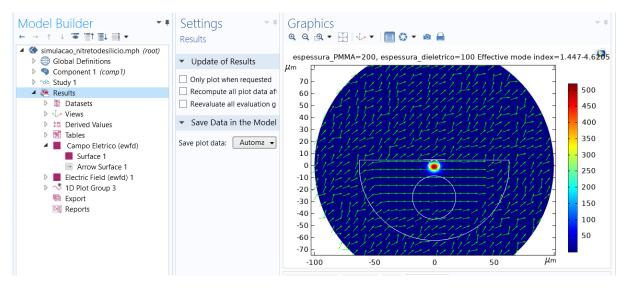
Fonte: Elaborado pelo autor.

A planilha resultante é apresentada na figura 10 onde as colunas foram definidas em *Column Headers*.

Como pode ser visto na Figura 1, por meio da interface *Electric Field* é possível visualizar a propagação da luz, e no caso da amostra desta figura, os vetores representam

a propagação do modo TE, uma vez que as setas estão paralelas ao plano do grafeno. Os vetores foram obtidos pela inclusão de *Arrow Surface*.

Figura 11 – Representação de campo eletromagnético com setas direcionadas pelo modo TE.



Fonte: Elaborado pelo autor.