



UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARÁ
CAMPUS UNIVERSITÁRIO DE ANANINDEUA
FACULDADE DE ENGENHARIA DE MATERIAIS

MARCOS GABRIEL FERNANDES DOS SANTOS

**SIMULAÇÃO NUMÉRICA DE UMA ANTENA RESSOADORA DIELÉTRICA
(DRA) BASEADA EM Si , Ag E GRAFENO PARA APLICAÇÕES EM
ESPECTRO THZ**

ANANINDEUA

2022

MARCOS GABRIEL FERNANDES DOS SANTOS

**SIMULAÇÃO NUMÉRICA DE UMA ANTENA RESSOADORA DIELETRICA
(DRA) BASEADA EM *Si*, *Ag* E *GRAFENO* PARA APLICAÇÕES EM
ESPECTRO THZ**

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado para obtenção de grau de Bacharel em Engenharia de Materiais, Faculdade de Engenharia de Materiais, Campus Universitário de Ananindeua, Universidade Federal do Pará.

Orientador: Prof. Dr. Marcos Benedito Caldas Costa

ANANINDEUA

2022

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

S237n Santos, Marcos Gabriel Fernandes
Simulação numérica de uma antena ressoadora dielétrica (dra)
baseada em si, ag e grafeno para aplicações em espectro thz /
Marcos Gabriel Fernandes Santos. — 2022.
70 f. : il. color.

Orientador(a): Prof. Dr. Marcos Benedito Caldas Costa
Trabalho de Conclusão de Curso (Graduação) - Curso de
Engenharia de Materiais, Campus Universitário de Ananindeua,
Universidade Federal do Pará, Ananindeua, 2022.

1. Materiais. 2. Simulação. 3. Telecomunicações. 4.
Dispositivos para imagenologia. I. Título.

CDD 620.110287

MARCOS GABRIEL FERNANDES DOS SANTOS

**SIMULAÇÃO NUMÉRICA DE UMA ANTENA RESSOADORA DIELÉTRICA
(DRA) BASEADA EM *Si*, *Ag* E *GRAFENO* PARA APLICAÇÕES EM
ESPECTRO THZ**

Trabalho de Conclusão de Curso orientado pelo Prof. Dr. Marcos Benedito Caldas Costa, apresentado ao curso de Bacharelado em Engenharia de Materiais da Universidade Federal do Pará, *Campus* Universitário de Ananindeua para obtenção do grau de bacharel em Engenharia de Materiais.

Data da Defesa: 05 de Dezembro de 2022

Conceito: Excelente

Banca Examinadora

Prof. Dr. Marcos Benedito Caldas Costa
Faculdade de Engenharia de Materiais -
UFPA
Orientador

Profa. Dra. Roseane de Lima Silva
Faculdade de Engenharia de Materiais -
UFPA
Membro da Banca

Prof. MSc. Igor Ramon Sinimbú Miranda
Faculdade de Engenharia Elétrica - UFPA
Membro da Banca

Dedico aos meus pais e minha irmã.

AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente a Deus por toda a paciência e compreensão com minha pessoa, agradeço aos meus pais por esse contrato de cinco anos para realização da graduação com suporte financeiro e pessoal, agradeço ao meu orientador Dr. Marcos Costa pela orientação e contribuição durante todo o desenvolver deste trabalho e também a Igor Miranda que sempre me auxiliou e tirou dúvidas das mais diversas no desenrolar da graduação.

Aos amigos e professores que disponibilizaram de seu tempo e conhecimento, direta ou indiretamente, contribuindo assim para o presente momento.

*“A tarefa não é tanto ver aquilo que ninguém viu,
mas pensar o que ainda ninguém pensou
sobre aquilo que todo mundo vê.”
(Arthur Schopenhauer)*

RESUMO

Neste trabalho, é realizado o estudo das características de radiação de duas antenas com camadas de grafeno, constituídas de componentes de silício e prata, operando na banda terahertz. Ambas antenas são dispositivos integrados com nano-disco de grafeno para controle dinâmico de respostas de frequência, obtendo desempenho potencializado pela modificação de componentes e subcomponentes específicos. O primeiro modelo de antena operando na faixa de frequência de 3,27 a 3,31 THz possui uma superfície denominada *Patch* de microfita não ressoante (NMP) a qual é responsável por operar como superfície seletora de modo eletromagnético de resposta. De maneira análoga o segundo modelo de antena consiste em um ressoador dielétrico cilíndrico, contudo, é uma antena a qual foi projetada por um método singular visando subcomponentes em escala menor e elevada largura de banda podendo operar em diferentes faixas de frequência em função do grafeno, modelo este operante na faixa de frequência de 7,24 - 7,27 THz. Quando se considera a variação de temperatura do nano-disco de grafeno e mantém-se os valores de porta química desse material fixos, mudanças desprezíveis ocorrem na forma como a antena tem seu controle de resposta de frequência. É mostrado que o primeiro modelo de antena opera com eficiência na casa dos 84%, já o segundo modelo de antena apresentou resultados de perda de retorno e largura de banda muito superiores, alcançando um coeficiente de reflexão de -54.9501 dB e largura de banda de 0,35 THz. Se comparados os modelos é possível aferir que o primeiro modelo de antena obteve melhor valor de eficiência de radiação, contudo, o segundo modelo apresentou maior proximidade com protótipos físicos, obtendo melhor casamento de impedâncias e consequentemente maior eficiência como antena.

Palavras-chave: Grafeno, nanoantena ressoadora dielétrica, seletor de modo eletromagnético e *patch* de microfita não ressoante.

ABSTRACT

In this work, the study of the radiation characteristics of two antennas with graphene layers, constituted of silicon and silver components, operating in the terahertz band is carried out. Both antennas are devices integrated with graphene nano-disk for dynamic control of frequency responses, obtaining enhanced performance by modifying specific components and subcomponents. The first antenna model operating in the 3.27 to 3.31 THz frequency range has a surface called Non-Resonant Microstrip Patch (NMP) which is responsible for operating as a response electromagnetic mode selector surface. Similarly, the second antenna model consists of a cylindrical dielectric resonator, however, it is an antenna which was designed by a unique method aiming at smaller scale subcomponents and high bandwidth, being able to operate in different frequency ranges due to graphene, this model operates in the frequency range of 7.24 - 7.27 THz. When considering the temperature variation of the graphene nanodisk and keeping the chemical gate values of this material fixed, negligible changes occur in the way the antenna has its frequency response control. It is shown that the first antenna model operates with efficiency of around 84%, while the second antenna model presented much higher return loss and bandwidth results, reaching a reflection coefficient of -54.9501 dB and bandwidth of 0.35 THz. If the models are compared, it is possible to verify that the first antenna model obtained a better radiation efficiency value, however, the second model presented greater proximity to physical prototypes, obtaining better impedance matching and consequently greater efficiency as an antenna.

Keywords: Graphene. nanoantenna dielectric resonator. electromagnetic mode selector. non-resonant microstrip patch.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 – Antena ressoadora dielétrica com exemplificação das componentes básicas como ressoador, substrato e plano terra (<i>ground plane</i>) (Autor, 2022).	25
Figura 2 – Diferentes formas e modelos de ressoador dielétrico (DR) [Adaptado de (LUK, 2003)].	26
Figura 3 – Geometria do DR com componetes de campo [Adaptado de (VIEIRA, 2019)].	26
Figura 4 – Distribuição dos vetores dos campos elétricos, magnéticos e cortes transversais num ressoador dielétrico cilíndrico no espaço livre para o modo $HEM_{12\delta}$ [Adaptado de (KAJFEZ; GUILLON, 1986; LUK, 2003)].	27
Figura 5 – Esboço do modelo escalonável através do comprimento de onda para uma antena DRA [Adaptado de (ZOU, 2013)].	28
Figura 6 – Ilustração de modelos de alimentação para antenas DRA e/ou <i>Patch</i> (Autor 2022).	28
Figura 7 – (a) Grafeno ponto inicial para outros alótropos do carbono: (b) Grafite, (c) CNTs e (d) Fulereno [Adaptado de (MIKHAIL, 2007; OXTOBY; GILLIS; BUTLER, 2015)].	32
Figura 8 – Configuração eletrônica (a) estado fundamental do carbono e (b) grafeno [Adaptado de (MIKHAIL, 2007)].	33
Figura 9 – Ilustração dos orbitais na rede cristalina do grafeno e formação de ligações covalentes σ e π [Adaptado de (OXTOBY; GILLIS; BUTLER, 2015; SHAFRANIUK, 2015)].	33
Figura 10 – Rede direta para o grafeno e ilustração da célula unitária por paralelogramo equilátero. [Adaptado de (WONG; AKINWANDE, 2011; MILOVANOVIĆ; PEETERS, 2018)].	34
Figura 11 – Ilustração da rede recíproca do grafeno de forma que o hexágono cinza representa a primeira zona de Brillouin [Adaptado de (DOVE; DOVE, 2003; AVOURIS, 2010)].	35
Figura 12 – (a) Estrutura de bandas 2D do grafeno [Adaptado de (ENOKI; ANDO, 2019)], (b) Estrutura de bandas 3D e (c) ilustração da estrutura de banda na rede <i>honeycomb</i> . [Adaptado de (NETO et al., 2009)].	36
Figura 13 – Interações entre bandas e nível de Fermi (E_F). [Adaptado de (GONÇALVES; PERES, 2016)]	37
Figura 14 – Condutividade superficial do grafeno parte real e imaginária para os valores ímpares de porta química. (Autor, 2022).	38
Figura 15 – (a) Nanopartícula de Silício com esferas cinza representando o Hidrogênio [Adaptado de (NAYFEH, 2018)] e (b) Fulereno, alótropo do Carbono [Adaptado de (OXTOBY; GILLIS; BUTLER, 2015)].	40

Figura 16 – Exemplificação estrutura amorfa Sílica com esferas laranja sendo Silício e azul claro sendo Oxigênio [Adaptado de (CALLISTER, 2016)].	41
Figura 17 – Comparativo de resistência a passagem de corrente em diversas categorias de materiais [Adaptado de (ASTAKHOV, 2018)].	42
Figura 18 – Antena e seus materiais (Autor, 2022).	44
Figura 19 – Espectro eletromagnético com diferentes comprimentos de onda e passíveis aplicações [Adaptado de (KARABOYTCHEVA, 2020)].	45
Figura 20 – Projeto de antena dielétrica ressoadora cilíndrica com camada de grafeno recobrando o ressoador dielétrico e estrutura seletora de modo eletromagnético de resposta NMP. (Autor 2022).	48
Figura 21 – Malha distribuída no substrato, exemplificação dos tetraedros (Autor, 2022).	50
Figura 22 – Coeficiente de reflexão para antena CDRA sem camada de grafeno, apresentando ponto de ressonância dentro do espectro selecionado e almejado assim como estrutura seletora de modos (Autor 2022).	51
Figura 23 – Valores encontrados para a Resistência e Reatância CDRA NoGraphene (Autor 2022).	52
Figura 24 – Eficiência de radiação da antena CDRA sem camada de grafeno (Autor 2022).	52
Figura 25 – Coeficiente de reflexão para antena CDRA Graphene com aproximação dos pontos de ressonância (<i>zoom</i>) para melhor visualização da frequência de resposta em função do potencial químico. (Autor 2022).	53
Figura 26 – Padrão de radiação apresentado pela antena, tendo lóbulos mais expressivos em -30 a 30 , 60 a 90 e 90 a -180° , gráfico de ganho total e ilustração da distribuição de corrente na estrutura NMP respectivamente (Autor 2022).	54
Figura 27 – (a) <i>E-field</i> modo $HEM_{12\delta}$ em corte transversal para antena CDRA NoGraphene e (b) <i>H-field</i> modo $HEM_{12\delta}$ em corte axial para antena CDRA NoGraphene. (Autor 2022).	55
Figura 28 – Coeficiente de reflexão para antena MicroDRA, sendo possível mensurar a largura de banda em -10 dB (Autor, 2022).	55
Figura 29 – Valores de resistência e reatância para antena MicroDRA (Autor 2022).	56
Figura 30 – Valores de frequência em função da modificação de temperatura na simulação da camada de grafeno em conjunto com a simulação da antena (Autor 2022).	57
Figura 31 – Modelos de antena simulados neste trabalho, (a) CDRA No/Graphene e (b) MicroDRA, ambos com modelo de padrão de radiação e padrão de malha (Autor 2022).	58

Figura 32 – Esquema dos modelos de antena simulados neste trabalho, (a) CDRA No/Graphene e (b) MicroDRA (Autor 2022).	58
Figura 33 – Modelo de malha e exemplificação de estrutura responsável por mudança de modos EM nos modelos de antena (Autor 2022).	68
Figura 34 – Nanodisco/camada/carregamento de Grafeno, estrutura responsável por operar como seletor de frequência (Autor 2022).	68
Figura 35 – Diagrama de Ishikawa para simulação neste trabalho (Autor 2022).	70

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Propriedades condutivas de diferentes elementos (BABURIN et al., 2019; GALATAGE et al., 2021)	43
Tabela 2 – Parâmetros e dimensões da antena DRA e estrutura NMP (Autor, 2022).	49
Tabela 3 – Parâmetros de Design modelo de antena 2, MicroDRA (Autor, 2022).	50
Tabela 4 – Valores de resultado encontrados para o modelo CDRA NoGraphene (Autor, 2022).	51
Tabela 5 – Valores de resultados mediante superfície seletora de frequência variante em sua porta química (Autor 2022).	53
Tabela 6 – Valores de resultado do modelo MicroDRA (Autor 2022).	56
Tabela 7 – Resultados da MicroDRA em função da variação de temperatura do nano disco de grafeno (Autor 2022).	57
Tabela 8 – Apanhado de características dos modelos de antena (Autor 2022). . .	57

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

NMP	<i>Patch de microfita não ressoante (Non-resonant microstrip patch)</i>
IMDS	Dispositivos médicos implantáveis (<i>Implantable medical devices</i>)
mmWave	Ondas milimétricas
Gbp/s	Gigabit por segundo
THz	Terahertz
GHz	Gigahertz
DR	Ressorador dielétrico (<i>Dielectric resonator</i>)
DRA	Antenas ressoadora dielétrica (<i>Dielectric resonator antenna</i>)
HFSS	<i>High Frequency Structure Simulator</i>
TE	Transversal elétrico
TM	Transversal magnético
HEM	Eletromagnético híbrido
EM	Eletromagnético
CNTs	Nanotubos de carbono
2D	Bidimensional
CVD	Deposição química de vapor
PLD	Deposição de laser pulsado
SiNWs	Nanofios de Silício
HV	Dureza Vickers
TPI	Imagem THz pulsada
ELF	Frequência extremamente baixa
VLF	Frequência muito baixa
LF	Baixa frequência
IF	Infra-vermelho
UV	Ultra-violeta

CDRA	Antena ressoadora dielétrica cilíndrica
CDRA Graphene	Antena ressoadora dielétrica cilíndrica com camada de grafeno
CDRA NoGraphene	Antena ressoadora dielétrica cilíndrica sem camada de grafeno
MicroDRA	Antenas com camada de grafeno e variação de temperatura
Pec	Condutor elétrico perfeito
FR4_Epoxy	Material laminado epóxi reforçado com vidro
CAE	Engenharia Assistida por Computador
MEF	Método dos Elementos Finitos
TAB	<i>MapInfo Table File</i>

LISTA DE SÍMBOLOS

λ	Comprimento de onda
ϵ_r	Permissividade elétrica relativa
ϵ_0	Permissividade elétrica do vácuo
μ_0	Permeabilidade magnética no vácuo
$f_{(TE_{01\delta})}$	Frequência de ressonância do modo $TE_{01\delta}$
$f_{(TM_{01\delta})}$	Frequência de ressonância do modo $TM_{01\delta}$
$f_{(HEM_{12\delta})}$	Frequência de ressonância do modo $HEM_{12\delta}$
f_r	Frequência de resposta
a	Raio do ressonador dielétrico
h	Altura para ressoador dielétrico cilíndrico
ϵ_{rd}	Constante dielétrica do ressoador dielétrico
d	Diâmetro do ressoador dielétrico
k_0	Número de onda no espaço livre
Q	Fator de qualidade
s	VSWR
BW	Largura de Banda
Γ_r	Coefficiente de reflexão
S_{11}	Coefficiente de reflexão em decibéis
a_{c-c}	Comprimento em uma ligação entre dois átomos de carbono
\vec{a}_1, \vec{a}_2	Vetores unitários primitivos
\vec{b}_1, \vec{b}_2	Vetores da rede recíproca
v_F	Velocidade de Fermi
c	Velocidade da luz
μ_c	Potencial químico
σ	Condutividade Elétrica

ω	Frequência Angular
Γ	Taxa de Espalhamento
T	Temperatura
q_e	Carga do Elétron
\hbar	Constante de Planck Reduzida
f_d	Distribuição Fermi-Dirac
k_B	Constante de Boltzmann
Z_s	Impedância superficial
ρ	Densidade de carga
\vec{r}	Vetor posição
\vec{R}	Vetor periodicidade
\vec{d}	Vetor de rede
L_s	Comprimento do substrato
W_s	Largura do substrato
H	Altura
h_s	Altura do substrato
h_{dr}	Altura do ressoador dielétrico
r_{dr}	Raio do ressoador dielétrico
r_{NMP}	Raio da estrutura <i>patch</i> de microfita não ressoante
W_m	Largura do alimentador da antena
L_m	Comprimento do alimentador da antena

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	19
1.1	Estado da Arte	20
1.2	Objetivos	23
1.3	Organização do Trabalho	23
2	TEORIA DE ANTENAS: ANTENAS DRA	25
2.1	Introdução	25
2.2	Antenas Ressonadoras Dielétricas DRA	25
2.3	Alimentação de uma DRA	28
2.4	Fator de Qualidade de uma DRA	29
2.5	Largura de Banda de uma DRA	29
2.6	Ganho e Eficiência de Radiação	30
2.7	Projetando DRAs, Considerações finais do capítulo	30
3	TEORIA DE MATERIAIS	31
3.1	Introdução	31
3.2	Grafeno nanomaterial	31
3.2.1	Rede Direta	33
3.2.2	Rede Recíproca	35
3.2.3	Propriedades e Estrutura Eletrônica do Grafeno	36
3.2.4	Condutividade Superficial do Grafeno	37
3.3	Silício, um material funcional	39
3.4	Dielétricos	41
3.4.1	Permissividade	42
3.4.2	Constante Dielétrica	42
3.5	Porque a Prata ?	43
3.6	Materiais, Considerações finais do capítulo	43
4	RADIAÇÃO TERAHERTZ	45
4.1	Introdução	45
4.2	Aplicações THz	45
4.3	Medicina	46
4.4	Indústria de alimentos	46
4.5	Agro	46
4.6	Tecnologia promissora ?	47
5	GEOMETRIA DA ANTENA: UM PROJETO	48
5.1	Software de Simulação	50
5.1.1	Nano-Disco de Grafeno modelado no HFSS	51
5.2	Resultados e Discussões	51
6	CONSIDERAÇÕES FINAIS	59
6.1	Conclusões	59

6.2	Propostas Futuras	59
	REFERÊNCIAS	60
	APÊNDICES	67
	APÊNDICE A – IMAGENS ADICIONAIS	68
	APÊNDICE B – SIMULAÇÃO EM FOCO	69
	APÊNDICE C – CAUSA E EFEITO PARA UMA BOA SIMULAÇÃO	70

1 INTRODUÇÃO

Os sistemas de transferência de dados e informações sem a utilização de cabos (*wireless*) evoluíram significativamente na corrente década, o tráfego de dados e envio/recebimento de informações está experimentando um crescimento sem precedentes e é indispensável no mundo moderno com aplicações em vários campos e setores de telecomunicações (CHATTOPADHYAY, 2012; AKYILDIZ; JORNET; HAN, 2014), mas também em dispositivos médicos com combinação implantável de sensores e antenas, os quais definem a qualidade dos dispositivos implantáveis (IMDs) e introduzem novos conceitos neste campo de aplicação. À medida que as informações compartilhadas pela sociedade crescem exponencialmente, há uma demanda crescente por maiores taxas de dados em sistemas de comunicação, bem como a convergência de diversas tecnologias sem fio para dispositivos menores e mais compactos para aplicações que vão desde telecomunicações até biomedicina. Novas bandas espectrais serão necessárias para suportar essas taxas de dados extremamente altas e configurações de espectro com diferentes valores de energia e potência (ANDREI; LI; DU, 2012; SINGHWAL et al., 2022).

Neste contexto, a busca por dispositivos cada vez menores e sem perda de desempenho vem impulsionando as pesquisas na área do eletromagnetismo aplicado. Estudos envolvendo a nanotecnologia são frequentes atualmente e estão presentes em inúmeras aplicações, tais como: medicamentos, filtros solares, materiais esportivos, dispositivos eletroeletrônicos e dispositivos médicos implantáveis. Portanto, novas soluções avançadas são esperadas para essa comunicação sem fio ultrarrápida e de componentes chegando em escalas nanométricas e micrométricas. O estudo e a síntese de dispositivos eletromagnéticos que operem em terahertz (THz) têm atraído grande atenção da comunidade científica nos últimos anos (CHATTOPADHYAY, 2012).

Definida pelas frequências de 0,1 a 10 THz (SIEGEL, 2002; JORNET; AKYILDIZ, 2013), a banda de frequências de terahertz pode suportar dispositivos com taxas de dados maiores que 100 Gbit/s, diferentemente da última geração em *ultra wideband* (UWB) ou de ondas milimétricas (*mmWave*) as quais apresentam características inferiores quando comparadas. A banda de terahertz ainda é pouco explorada, pois os materiais comumente usados na construção de dispositivos não atendem as singularidades mais desafiadoras desse espectro. Como resultado, muitas pesquisas foram feitas para encontrar novos materiais capazes de operar em THz e aproveitar a ampla largura de banda disponível nessa faixa de frequência (AKYILDIZ; JORNET; HAN, 2014).

A busca por materiais nanoestruturados com propriedades físicas e químicas aprimoradas tem sido foco de intensas pesquisas em todo o mundo, notadamente aquelas voltadas ao estudo de materiais ferromagnéticos e ferroelétricos. Dentre as muitas nanoestruturas que estes materiais assumem, estacam-se a fase espinélio e a fase perovskita (WILSON et al., 2019), que particularmente possuem propriedades

eletromagnéticas e características únicas.

Neste contexto, destaca-se a importância de um material que tem sido foco de pesquisas nos últimos anos: o grafeno. Devido às excepcionais propriedades eletrônicas, ópticas e mecânicas, o grafeno tem sido estudado para uma ampla gama de aplicações. Assim como o grafite e o diamante, o grafeno também é um alótropo do carbono. O grafeno é formado por uma monocamada planar de átomos de carbono densamente compactados em uma estrutura hexagonal bidimensional (2D) (GEIM; NOVOSELOV, 2010). Muitos trabalhos realizaram mudanças de potencial químico para ajustar dinamicamente a condutividade desse material em frequências terahertz e infravermelho, sendo alguns deles: (AMANATIADIS; KARAMANOS; KANTARTZIS, 2017; SEYEDSHARBATY; SADEGHZADEH, 2017; ZARRABI et al., 2017; SAMANTA; MITRA, 2018; NOVIN et al., 2019; SOUSA et al., 2020; SHARMA et al., 2020; KAZEMI, 2020).

No entanto, ainda existem entraves quando se trata de dispositivos que funcionam em THz, dificuldades e perdas com grande limitação de distância de comunicação, sensibilidade a fatores externos e atmosféricos, de modo que serão necessários modelos e protótipos inovadores e de baixo custo de produção (simulação), estáveis e com boa aplicabilidade dentro do espectro Terahertz. Levando-se em conta tais fatores, é ansiado simular e desenvolver novos aparatos, mais tecnológicos e de baixo custo que atendam as características do espectro THz e forneçam inovação em materiais.

1.1 Estado da Arte

Em teoria o grafeno é estudado a mais de 70 anos, começando com o trabalho de P. R. Wallace (WALLACE, 1947) sobre a teoria de bandas do grafite em 1947, em que a estrutura das bandas de energia eletrônica e as zonas de Brillouin para o grafite são desenvolvidas utilizando a aproximação de “ligação forte” (*tight binding*). O estudo de Wallace considera a condução elétrica neste material apenas longitudinal aos planos dos átomos de carbono que o compõem. Nesta abordagem, o grafeno foi, portanto, usado apenas como uma ferramenta de pesquisa teórica para caracterizar o grafite, embora a primeira vez que os planos que compõem o grafite foram chamados de grafeno tenha sido apenas em 1987 (MOURAS et al., 1987).

Na década de 1980, embora o grafeno fosse conhecido como parte integrante dos materiais 3D, era considerado improvável que fosse obtido isoladamente. A ideia era que o grafeno, por ser material bidimensional (2D), apresentava instabilidade termodinâmica e que isso levaria à formação de estruturas curvas (fulerenos ou nanotubos) levando à suposição de que o grafeno não existisse no estado livre, sendo descrito como um material puramente “acadêmico”(FRADKIN, 1986).

Contudo, no ano de 2004, o pesquisador Novoselov et al. (2004) e seus colaboradores publicaram o primeiro trabalho acerca da obtenção experimental do grafeno.

Descobrimo experimentalmente a existência do grafeno no estado livre, principalmente quando os experimentos de Novoselov et al. (2005) e Zhang et al. (2005) confirmaram que seus portadores de carga eram realmente férmions de Dirac sem massa, quebrando as suposições e afirmativas previamente sugeridas e também os argumentos de Peierls (1935) e Landau (1937) de que os cristais estritamente 2D eram termodinamicamente instáveis e não poderiam existir.

No experimento realizado por eles, primeiramente efetuou-se o processo de esfoliação mecânica, grudando e desgrudando uma fita adesiva na qual se colocou uma lâmina de grafite, matéria prima de lápis e lapiseiras. Após isso, o material disposto na fita adesiva, ou seja, as finas camadas de grafite eram depositadas em um substrato composto de silício e dióxido de silício. Podendo assim, ser isolado um único plano de átomos de carbono, de forma que pela primeira vez houve a caracterização das propriedades do grafeno (LIU; ZHOU, 2014). Devido a essas contribuições, que impulsionaram a chamada “corrida de ouro” do grafeno, Andre Geim e Konstantin Novoselov receberam o Prêmio Nobel de Física no ano de 2010.

O grafeno, um material bidimensional (2D) desde então passou a receber muito estudo e pesquisa, é um material com propriedades elétricas, eletromagnéticas, mecânicas, térmicas e ópticas muito interessantes para aplicações em antenas operando na faixa THz. (AKYILDIZ; JORNET; HAN, 2014). Devido a essas propriedades, o material é alvo de pesquisas e possui aplicações nas mais diversas áreas, principalmente no desenvolvimento de dispositivos para aplicações em telecomunicações que possam atender à crescente demanda mundial por maior tráfego de dados e maiores taxas de transmissão (LIN; LI, 2015).

Após a publicação do trabalho inicial de Novoselov et al. (2004), outras pesquisas importantes foram realizadas no contexto de dispositivos baseados em grafeno, começaram as buscas por novos fenômenos e aplicações para tal material muito devido a propriedade eletrônica exibida pelos cristalitos de grafeno isolados. Desde então até os dias atuais diversos trabalhos vêm sendo publicados com os mais diversos dispositivos que utilizam o grafeno.

Por exemplo, Cheng et al. (2016) apresenta um conceito de antena DRA para aplicações Thz permitindo o ajuste de resposta de frequência através da variação do potencial químico de um nanodisco de grafeno colocado no topo do ressonador dielétrico (DR), o que permite a implementação de antenas na faixa Thz com alto ganho, cerca de 3,8 dBi e eficiência de radiação próxima a 75%. Zhang et al. (2017) investiga a resposta e o ganho de antenas DRA com uma camada fina de grafeno posta no topo do DR, primeiro cobrindo 50% da superfície superior do DRA e posteriormente 100%, neste último transformando em uma antena de microfita, mostrando que a condutividade do filme de grafeno é significativa no desempenho do DRA.

Hosseinejad et al. (2018) apresenta uma abordagem da utilização de dipolo

plasmônico de grafeno para excitar uma antena DRA na faixa de frequência THz, sendo feito em duas etapas para projetar a antena DRA com ganho de 7 dBi e eficiência de radiação em até 70%.

Varshney et al. (2019) estuda a implementação de uma técnica para obtenção da polarização circular em uma antena ressoadora nano-dielétrica projetada para operar na banda C óptica, onde um DR de formato cilíndrico é excitado por meio de uma nano-tira, é aplicado um pulso gaussiano, os componentes de campo viajam nas bordas da linha de alimentação e o acoplamento desses componentes de campo no DR fornece a resposta polarizada circular. A antena fornece uma largura de banda de impedância de aproximadamente 10 dB e de largura de banda de proporção axial igual a 3 dB.

Assim sendo, muitas foram as antenas onde se implementou o grafeno (AMANATIADIS; KARAMANOS; KANTARTZIS, 2017; ZARRABI et al., 2017; SEYEDSHARBATY; SADEGHZADEH, 2017; SAMANTA; MITRA, 2018; NOVIN et al., 2019; KAZEMI, 2020; SHARMA et al., 2020) estas podem ter um design miniaturizado e mesmo assim não perder suas características, outros dispositivos também tiveram grandes aplicações desse material, destacando-se o desenvolvimento de dispositivos tais como: sensores acopladores, filtros e amplificadores.

No tocante a antenas, principalmente de dimensões micro e nano, estas tem tido grande pesquisa ao longo do tempo, os dispositivos tem necessitado operar com grande eficiência e em escalas cada vez menores, a nanotecnologia é uma demanda da era atual. Antenas DRA e dispositivos nano operam em frequências ópticas, ou seja, frequência Terahertz e aplicam-se não somente a telecomunicações com altas taxas de transferência de dados, mas também à imagem biomédica (SIEGEL, 2004; LI; CHIU, 2017). Quando se trata da parte de aplicação biomédica, a onda THz é não ionizante, tecnologia muito segura para tecidos humanos em comparação com o raio-X, além de poder criar imagem com alta precisão ao nível de DNA, aminoácidos e proteínas por exemplo.

Dessa forma, Yaduvanshi et al. (2021) propõe uma antena cônica de dimensões micro para aplicação no espectro THz, visando aplicações de elevada taxa de transferência de dados assim como aplicações biomédicas. Neste contexto, Singhwal et al. (2021) propõe também um modelo de antena ressoadora dielétrica operando no GHz para aplicação em dispositivos implantáveis de profundidade. Dessa forma é observado a gama de aplicações possíveis e passíveis de trabalhar em uma antena, deixando de se restringir a telecomunicações e transferência de dados, como comumente se observa no geral.

Do exposto, este trabalho analisa através de simulações modelos de antena com camada de grafeno com diagrama de radiação controlável pelo potencial químico, utilização de material de contato feito de prata e utilização de sílico como agente ressoante. Tratam-se de dois modelos de antena ressoadora dielétrica (DRA), com alimentação por microlinha, onde potenciais químicos diferentes na camada de grafeno

(0,34 nm) são simulados e busca-se também o controle de modo eletromagnético de resposta de um dos modelos de antena através da implementação de estrutura planar seletora de modos. A análise é feita na faixa do terahertz de 3,27 - 3,31 THz e 7,24 – 7,27 THz, com auxílio do Software Ansys HFSS (*Ansoft's High Frequency Structure Simulator*) (ANSYS, 2022) desenvolvido pela ANSYS, Inc.

1.2 Objetivos

O principal objetivo deste trabalho é desenvolver protótipos simulados de duas antenas DRA, explorando através de técnicas computacionais numéricas algumas das propriedades do grafeno e as aplicando quando possível. Como este material pode apresentar diferentes comportamentos em função da variação de espectro, a condutividade também apresenta diferentes resultados na frequência THz, condição resultante em características interessantes. Dessa maneira, visando a necessidade de dispositivos menores e versáteis com materiais eficientes (Prata) e difusos (Silício), seja para sistemas sem fio, nanotecnologia ou imagenologia, o trabalho em questão aborda os seguintes objetivos:

1. Projetar e simular um modelo DRA base para posterior implementação do grafeno;
2. Aplicar um modelo numérico para avaliar as características elétricas e de condução do grafeno.
3. Desenvolver e simular superfícies planares seletoras de modo eletromagnético de resposta;
4. Avaliar brevemente a influência da variável temperatura quando aplicado em IMDS.
5. Avaliar a viabilidade e parâmetros de análise das antenas compostas de grafeno, sílico e prata, tais como eficiência de radiação, ganho e largura de banda.

1.3 Organização do Trabalho

Este trabalho está organizada em seis capítulos, conforme é descrito a seguir:

O Capítulo 1 apresenta o contexto em que este trabalho se encontra inserido. Após isso, revisa-se a literatura científica relacionada. No fim desse capítulo, os objetivos e as propostas do trabalho são expostos.

O Capítulo 2 apresenta um estudo bibliográfico a respeito da teoria de antenas utilizada no trabalho, situando-a no contexto histórico de evolução, evidenciando suas características, vantagens e desvantagens em relação às antenas de micro-ondas convencionais, além das técnicas de alimentação e os métodos de análise. Por fim os parâmetros fundamentais de antenas são também descritos em detalhes.

O Capítulo 3 apresenta a teoria de materiais utilizados neste trabalho, faz referência ao estudo dos métodos de sínteses utilizados para produção de grafeno, sua

condutividade superficial é detalhada. Na sequência algumas propriedades e características do Silício, material base em quesitos tecnológicos. A prata também é abordada, suas propriedades eletrônicas. De forma geral, são detalhados alguns dos materiais ímpares na produção deste trabalho.

No Capítulo 4 são abordadas outras áreas de aplicação da tecnologia THz, são mostrados alguns dos campos de utilização dessa tecnologia tanto na área médica quanto biológica assim como na bioquímica e detecção de moléculas para indústria alimentícia, monitoramento ambiental e diagnósticos.

No Capítulo 5 são apresentados os projetos de antenas DRA, onde há o detalhamento de características e resultados das simulações acompanhadas pelos softwares, avaliação da estrutura NMP e viabilidade em aplicações IMDS, além das características obtidas pela adição de camadas de grafeno.

Por fim conclusões retiradas a partir de todo escopo deste trabalho, incluindo sugestões para trabalhos futuros relacionados com essa linha de pesquisa envolvendo dispositivos eletrônicos e materiais inovadores e as referências.

2 TEORIA DE ANTENAS: ANTENAS DRA

2.1 Introdução

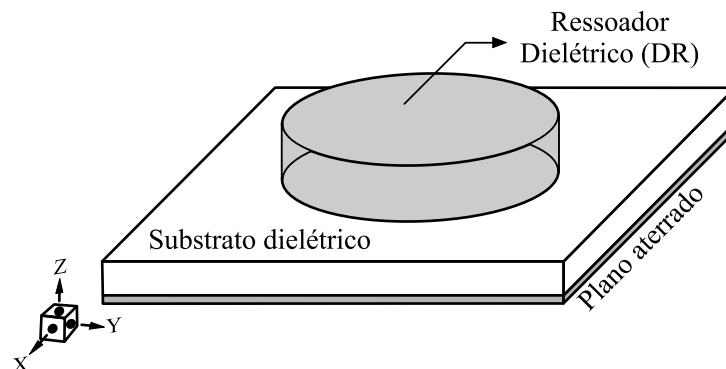
Antenas são estruturas empregadas principalmente em sistemas de comunicação sem fio com o objetivo de propagar ondas eletromagnéticas e também de captá-las, convertendo corrente elétrica em ondas eletromagnéticas e vice-versa, assim, gerando e recebendo informações. Essas estruturas constituem a base para este trabalho, sendo neste capítulo apresentados os fundamentos para entendimento das informações dispostas nos capítulos subsequentes.

2.2 Antenas Ressonadoras Dielétricas DRA

Uma das primeiras pesquisas abordando antenas ressoadoras dielétricas, data de 1939, trata-se de um trabalho de Richtmyer (1939) onde ele mostrou que um bloco de material dielétrico ressoa no espaço livre quando a constante dielétrica é alta. Por outro lado Long, McAllister e Shen (1983) publicaram um dos primeiros artigos no qual demonstraram uma antena tendo um ressonador dielétrico utilizado como radiador de sinal.

As antenas de ressonador dielétrico são embasadas um ressonador dielétrico (DR), usualmente com formas iguais aquelas ilustradas na Figura 1, normalmente o DR é colocado sobre um plano de terra metálico (*Ground Plane*) ou sobre um substrato dielétrico aterrado conforme mostra a Figura 2, apresentam várias vantagens em relação as antenas de microlinha, como por exemplo, tamanho reduzido, perfil, peso e não apresentam grandes perdas de condução (LUK, 2003), as DRAs possuem uma grande eficiência de radiação por haver poucas perdas devido à ausência de metais, o que possibilita a utilização de DRAs em aplicações com frequências acima da banda de micro-ondas, próximas da região de ondas milimétricas e no espectro THz.

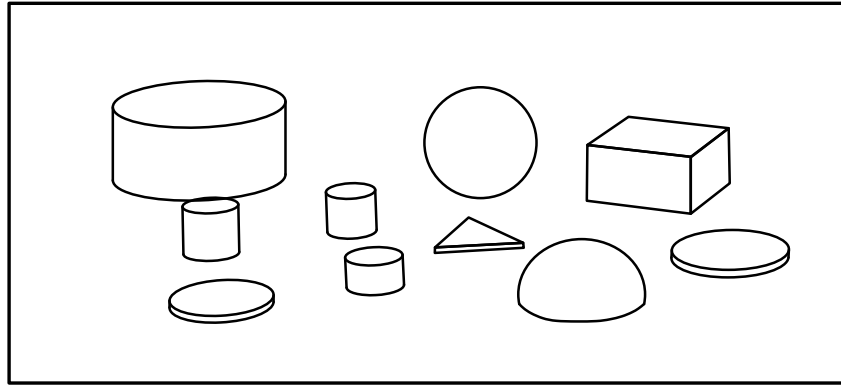
Figura 1 – Antena ressoadora dielétrica com exemplificação das componentes básicas como ressonador, substrato e plano terra (*ground plane*) (Autor, 2022).



Em princípio, o ressonador pode assumir qualquer forma geométrica e teoricamente produzir radiação eletromagnética sem a presença de um substrato dielétrico

aterrado ou placa de base, e pode irradiar sinais para qualquer superfície, exceto o plano de aterramento (RICHTMYER, 1939; LUK, 2003).

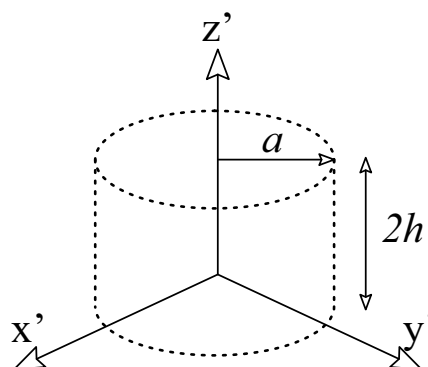
Figura 2 – Diferentes formas e modelos de ressoador dielétrico (DR) [Adaptado de (LUK, 2003)].



Em geral, o ressoador dielétrico cilíndrico é mais comumente usado em circuitos e antenas DRA, é uma estrutura que funciona em modos de ressonância. Cada um desses modos possui uma frequência de ressonância e uma distribuição de campo eletromagnético específicas, as quais dependem das seguintes características do ressoador: tamanho, formato geométrico, material e ambiente de operação (LUK, 2003), ou mais precisamente, da utilização de superfícies capazes de fornecer essas condições em um modelo de antena.

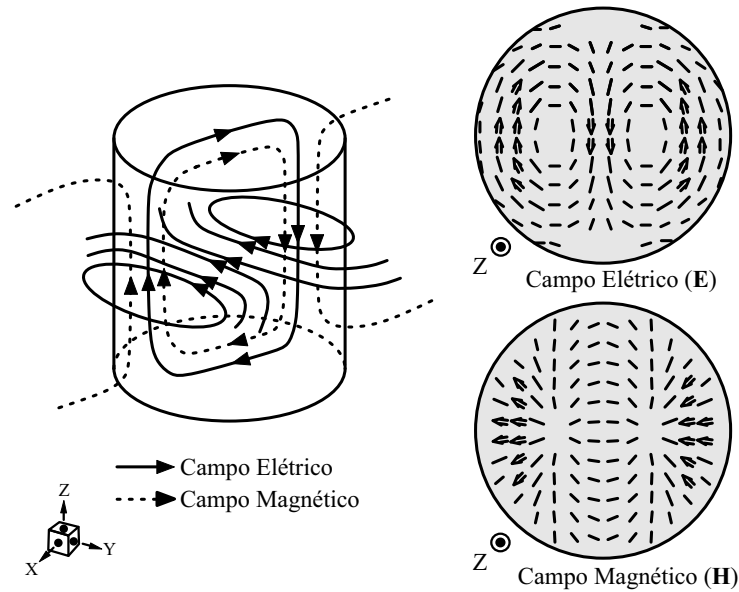
Os modos ressonantes do ressoador dielétrico cilíndrico podem ser advindos em três tipos: transversal elétrico (TE), transversal magnético (TM) e híbrido (HEM). Os modos HEM possuem componentes de campos elétrico e magnético em z conforme a Figura 3, podendo ser visto matematicamente como uma combinação de modos TE e TM de acordo como a Figura 4 ilustra. (KAJFEZ; GUILLON, 1986)

Figura 3 – Geometria do DR com componetes de campo [Adaptado de (VIEIRA, 2019)].



Os modos TE são aqueles cuja componente de campo elétrico em z é nula, mas a componente de campo magnético na mesma direção não é nula. Os modos TM têm como nula a componente de campo magnético em z , sendo a componente de campo elétrico nessa direção diferente de zero, ou seja, os modos TE e TM diferem-se pela ordem a qual as componentes são direcionadas através de z . (KAJFEZ; GUILLON, 1986)

Figura 4 – Distribuição dos vetores dos campos elétricos, magnéticos e cortes transversais num ressoador dielétrico cilíndrico no espaço livre para o modo $HEM_{12\delta}$ [Adaptado de (KAJFEZ; GUILLON, 1986; LUK, 2003)].



Para ressoadores dielétricos com formato cilíndrico (CDR) não existe solução matemática analítica exata para a análise. Por esse motivo, vários pesquisadores e estudiosos da área desenvolveram expressões aproximadas e simplificadas para o cálculo da frequência de ressonância dos modos ressoantes do ressoador dielétrico cilíndrico isolado no espaço livre (vácuo), sendo algumas delas para os modos anteriormente citados (LUK, 2003; PETOSA, 2007):

$$f_0^{(TE_{01\delta})} = \frac{2,22 * 10^7 m/s}{a} \left[1 + 0,308 \frac{a}{2h} + 0,127 \left(\frac{a}{2h} \right)^2 - 0,0895 \left(\frac{a}{2h} \right)^3 \right] \varepsilon_{r_d}^{-0,475} \quad (2.1)$$

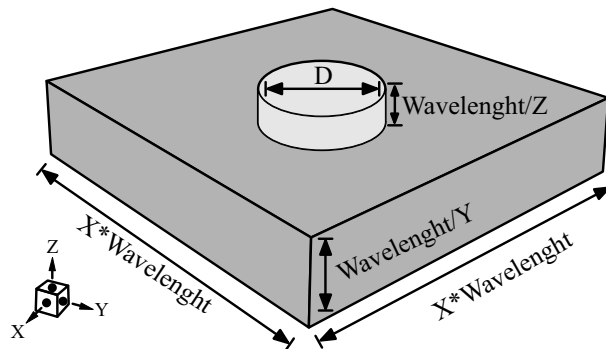
$$f_0^{(TM_{01\delta})} = \frac{4,27 * 10^7 m/s}{a} \left[1 + 3,02z \left(\frac{a}{2h} \right)^{0,881} + e^{0,962(1-1,69 \frac{a}{2h})} \right] \varepsilon_{r_d}^{-0,45} \quad (2.2)$$

$$f_0^{(HEM_{12\delta})} = \frac{1,28 * 10^7 m/s}{a} \left[1 + 0,12 \frac{a}{2h} + 0,06 \left(\frac{a}{2h} \right)^2 + 0,014 \left(\frac{a}{2h} \right)^3 \right] - \left[0,712e^{-1,25 \frac{a}{2h} (1+4,7 \frac{a}{2h})} \right] \varepsilon_{r_d}^{-0,5} \quad (2.3)$$

Essas formulações provem uma boa estimativa para início de projeto, porém tais fórmulas de engenharia padrão (RICHTMYER, 1939; LUK, 2003; PETOSA, 2007) para calcular a frequência ressonante de DRs em alguns casos podem ser substituídas por outros métodos, principalmente métodos escalonáveis. Dessa forma, sabendo-se que todos os dispositivos EM podem ser dimensionados em termos de comprimento de onda para operação em diferentes faixas espectrais, desde que as propriedades do

material sejam constantes (LUK, 2003), existe a possibilidade de escalonamento para estes dispositivos (Figura 5), para o escalonamento de DRAs, à medida que a frequência de operação se aproxima das frequências infravermelha e visível, o escalonamento direto tende a um desvio ou falha porque a penetração de campos elétricos e magnéticos no plano terra deixa de ser uma constante desprezível e as ressonâncias de oscilações coletivas passam a ter grande influência em como o dispositivo opera (ZOU, 2013).

Figura 5 – Esboço do modelo escalonável através do comprimento de onda para uma antena DRA [Adaptado de (ZOU, 2013)].

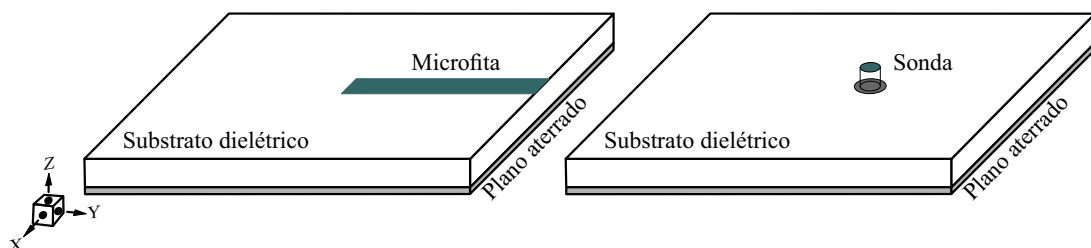


Dessa maneira Zou (2013) aborda um método de escalonamento para dispositivos, uma alternativa análoga para desenvolvimento e definição de parâmetros relacionados a antenas DRA.

2.3 Alimentação de uma DRA

A forma como uma antena é excitada determina como quais modos podem ser gerados, sendo cruciais na análise de fator de qualidade e impedâncias. A excitação de uma antena é realizada através da incidência de energia através de um condutor constituinte no modelo de antena, de forma que tal energia possa ser conduzida à componente responsável pela irradiação de sinais, neste caso ao DR. De forma geral, o modo de excitação abordado neste trabalho é o de microlinha conforme a Figura 6 mostra, no entanto, existem outros modelos que apresentam diversas outras características e resultados quando empregados em DRAs, um exemplo também muito abordado é a alimentação por sonda. Ambos modelos de alimentação são mostrados na Figura 6.

Figura 6 – Ilustração de modelos de alimentação para antenas DRA e/ou Patch (Autor 2022).



2.4 Fator de Qualidade de uma DRA

O fator Q (fator de qualidade) é uma medida da seletividade do ressoador para uma determinada frequência. Valores de Q mais altos tendem a minimizar os riscos de interferências na banda passante do dispositivo, de maneira a ser definido como uma relação recíproca entre a energia armazenada e a potência radiada. O fator de qualidade para um ressoador dielétrico cilíndrico ressoando em modos define-se como, respectivamente (LUK, 2003):

$$Q_{TE} = 0,078192e^{1,27} \left(1 + 17,31 \left(\frac{d}{a} \right) - 21,31 \left(\frac{d}{a} \right)^2 + 10,86 \left(\frac{d}{a} \right)^3 - 1,98 \left(\frac{d}{a} \right)^4 \right) \quad (2.4)$$

$$Q_{TM} = 0,009e^{0,888} e^{0,04\epsilon_r} 1 - \left(0,3 - 0,2 \frac{a}{d} \right) \left(\frac{38 - \epsilon_r}{28} \right) * \left(9,498 \frac{a}{d} + 2058,33 \left(\frac{a}{d} \right)^{4,32} \right) \left(e^{-3,501 \frac{a}{d}} \right) \quad (2.5)$$

$$Q_{HEM} = 0,017007\epsilon_r^{1,3} \left(\frac{d}{a} \right) \left(1 + 100e^{-2,05 \left[\frac{a}{2d} - \frac{1}{80} \left(\frac{a}{d} \right)^2 \right]} \right) \quad (2.6)$$

Enquanto que k_0a em ressoadores cilíndricos está relacionado diretamente com a constante dielétrica efetiva da antena (LUK, 2003):

$$k_0a_{TE} = \frac{2,327}{\sqrt{\epsilon_r + 1}} \left(1 + 0,2123 \frac{a}{h} - 0,00898 \left(\frac{a}{h} \right)^2 \right) \quad (2.7)$$

$$k_0a_{TM} = \frac{\sqrt{3,83^2 + \left(\frac{\pi a}{2h} \right)^2}}{\sqrt{\epsilon_r + 2}} \quad (2.8)$$

$$k_0a_{HEM} = \frac{6,324}{\sqrt{\epsilon_r + 2}} + \left(0,27 + 0,36 \frac{a}{2h} + 0,02 \left(\frac{a}{2h} \right)^2 \right) \quad (2.9)$$

2.5 Largura de Banda de uma DRA

A Largura de banda, em resumo, descreve a faixa de frequências sobre as quais a antena pode irradiar adequadamente ou receber energia, ou seja, é uma medida de capacidade de transmissão. A largura de banda de uma DRA é dependente das dimensões físicas e da permissividade do dielétrico utilizado (PETOSA, 2007). A largura de banda (*Bandwidth*) da DRA é relacionada com o fator de qualidade Q , dessa forma:

$$BW = \frac{s - 1}{Q\sqrt{s}} * 100\% \quad (2.10)$$

Onde s é o $VSWR$ desejado para a antena.

2.6 Ganho e Eficiência de Radiação

Ganho representa a razão entre a intensidade irradiada de uma antena em uma determinada direção e a intensidade irradiada de uma antena de referência na mesma direção, ambas alimentadas com a mesma potência isotrópica, onde o ganho é denotado como o ganho absoluto em dBi (o termo *i* significa isotrópico), caso contrário, significa relativo e é expresso em dB.

A eficiência de uma antena é a razão entre a potência fornecida à antena e a potência irradiada pela antena. Em uma antena altamente eficiente, a maior parte da energia presente na entrada da antena é irradiada. Em uma antena de baixa eficiência, a maior parte da energia é absorvida como perdas dentro da antena ou refletida devido à incompatibilidade de impedância.

2.7 Projetando DRAs, Considerações finais do capítulo

Partindo-se das etapas e equações dispostas neste capítulo é possível ter parâmetros iniciais para a projeção de antenas ressoadoras dielétricas, podendo-se projetar DRAs seguindo formulações de engenharia padrão como aquelas dispostas na equação Equação 2.1 e Equação 2.10 (RICHTMYER, 1939; MONGIA; ITTIPIBOON, 1997; LUK, 2003; PETOSA, 2007; YADUVANSHI et al., 2021) ou através de escalonamento por comprimento de onda e formulações dispostas por Zou (2013).

3 TEORIA DE MATERIAIS

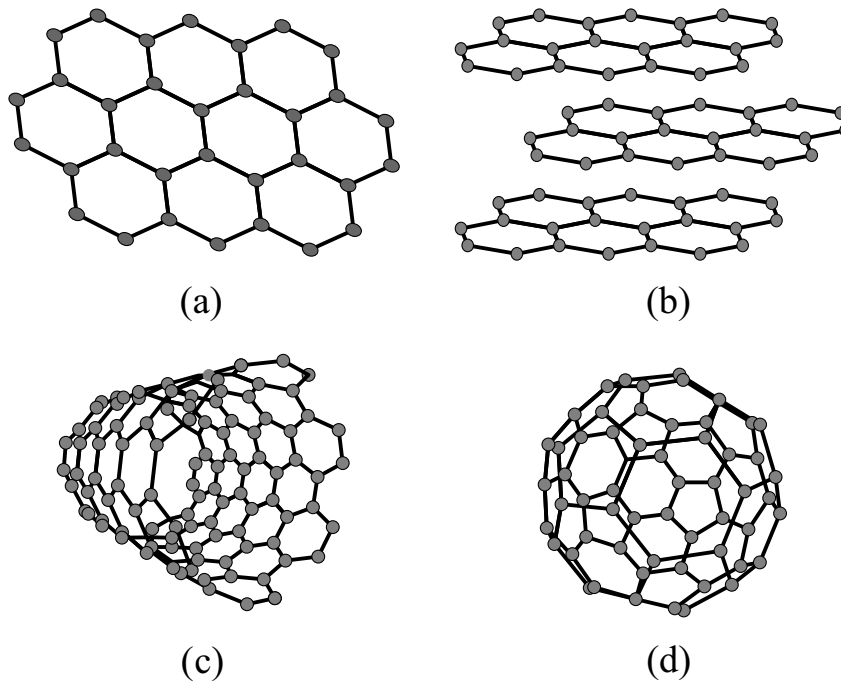
3.1 Introdução

O grafeno é um nanomaterial constituído inteiramente de carbono, no qual os átomos se combinam para formar estruturas hexagonais. É o cristal mais fino conhecido, tendo altura de um único átomo e suas propriedades tornando-o muito procurado. Este material é tênue, eletricamente condutor, rígido e impermeável. O material de silício (*Si*) é um dos materiais mais importantes para aplicações de nanotecnologia, sendo o pilar da indústria de microeletrônica e também possuindo característica de biocompatibilidade não apresentando riscos de toxicidade, o silício é um isolante, contudo, após sofrer um processo de adição de elementos alternativos (dopagem eletrônica), ele se torna um semiconductor e atende eficientemente as necessidades da eletrônica na atualidade. Por outro lado a prata (*Ag*) tem a maior condutividade elétrica de todos os metais. Em outras palavras, a prata define a condutividade, onde todos os outros metais são comparados com ela. Em uma escala de 0 a 100, a prata se encontra na centésima posição, o cobre em nonagésima sétima e ouro em septuagésima sexta posição. A prata é comumente usada em circuitos e contatos elétricos visando baixas perdas e alta eficiência. Materiais estes, os quais são constituintes base para o trabalho, sendo neste capítulo apresentados os fundamentos para entendimento de algumas dessas propriedades e das informações dispostas nos capítulos subsequentes.

3.2 Grafeno nanomaterial

O grafeno é formado por uma camada 1D planar de átomos de carbono densamente compactados em uma estrutura hexagonal bidimensional (2D) (GEIM; NOVOSELOV, 2010), com formato semelhante ao de favo de mel (geometria hexagonal) conforme exemplifica a Figura 7 – (a)., da palavra “*graph*” prefixo de grafite e “*ene*” sufixo para ligação dupla carbono/carbono, ou também entendido como uma única camada de grafite, é um alótropo do carbono com hibridização sp^2 , ângulo de 120° entre seus átomos e com um comprimento de ligação molecular de $1,42 \text{ \AA}$ (FERRARI et al., 2015), possui propriedades muito interessantes para aplicações eletrônicas e também quânticas, é descrito como o material com menor espessura (um único átomo de carbono), mais forte e com melhor flexibilidade podendo suportar deformações mecânicas e ser dobrado sem que haja a ruptura, além de possuir alta impermeabilidade a gases e ser quimicamente inerte e estável. O que o torna atípico e intrigante haja visto que todas essas propriedades procuradas são combinadas em um único material. As ligações duplas carbono/carbono são separadas por aproximadamente $0,142 \text{ nm}$ com interações de Van der Waals pouco resistentes entre camadas, seus átomos são fortemente ligados uns aos outros através de uma nuvem eletrônica (TIWARI et al., 2020; BLEU et al., 2018).

Figura 7 – (a) Grafeno ponto inicial para outros alótropos do carbono: (b) Grafite, (c) CNTs e (d) Fulereo [Adaptado de (MIKHAIL, 2007; OXTOBY; GILLIS; BUTLER, 2015)].

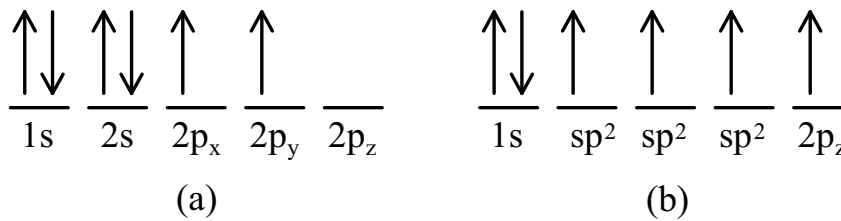


O grafeno pode ser considerado o ponto de partida para a construção de outros alótropos do carbono conforme exemplifica a Figura 7. Por exemplo, o grafite que é composto de monocamadas de grafeno empilhadas com um espaçamento de 3,35 Å entre elas e são mantidas juntas por interações de van der Waals conforme Figura 7 - (b), os nanotubos de carbono (CNTs) são cilindros de uma ou mais camadas de grafeno dobradas no formato cilíndrico conforme Figura 7 - (c) e ao se envolver camadas de grafeno no formato de uma esfera há a produção dos Fulerenos Figura 7 - (d) (MIKHAIL, 2007).

No grafeno cada átomo de carbono é um híbrido sp^2 ligado fortemente a outros três átomos vizinhos. O processo de hibridização do grafeno ocorre pela interação dos orbitais $2s$ e dos orbitais $2p_x$ e $2p_y$ gerando três outros orbitais hibridizados Sp^2 (Figura 8), resultando que para cada átomo haja um elétron livre, e este elétron é encontrado no orbital P_z o qual se encontra sobreposto ao plano de forma a gerar as ligações covalentes π (MIKHAIL, 2007; OXTOBY; GILLIS; BUTLER, 2015; BLEU et al., 2018; TIWARI et al., 2020). Na forma elementar, os quatro elétrons de valência ocupam os orbitais $2s$ e $2p$ (Figura 8 - (a)). Quando há a junção de átomos de carbono para formação de um cristal, um dos elétrons $2s$ é excitado para o orbital de $2p_z$ a partir da energia obtida dos núcleos vizinhos, o que tem o efeito de reduzir a energia total do sistema.

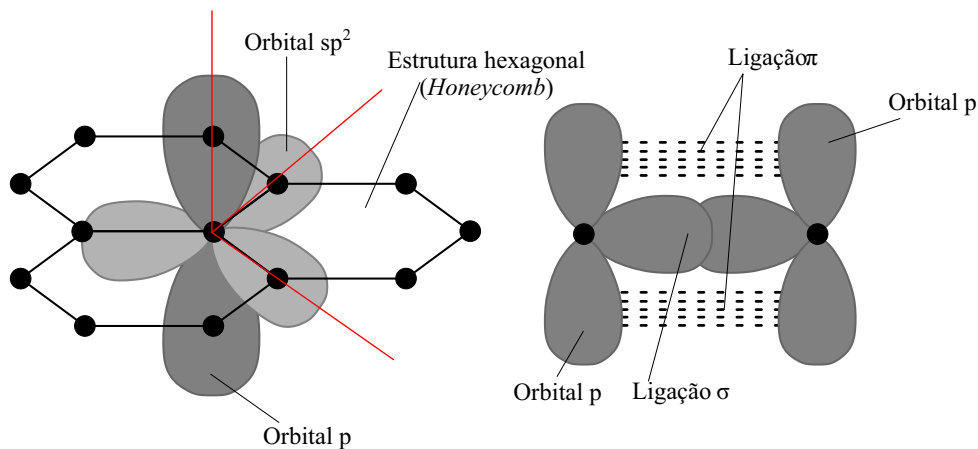
A configuração eletrônica do grafeno possui três orbitais com hibridização sp^2 (Figura 8 - (b)) e mais um orbital não hibridizado $2p_z$. Os orbitais hibridizados são separados por ângulos de 120° e formam a ligações covalentes σ localizadas paralela-

Figura 8 – Configuração eletrônica (a) estado fundamental do carbono e (b) grafeno [Adaptado de (MIKHAIL, 2007)].



mente ao plano da folha de grafeno. As ligações covalentes sigma são originárias da sobreposição dos orbitais sp^2 , estas são consideradas as ligações mais fortes dos tipos de ligação covalente, sendo responsáveis principalmente pelas propriedades mecânicas apresentadas pelo grafeno. Já nas ligações π , provenientes do orbital não hibridizado $2p_z$ localizado perpendicularmente ao plano conforme a Figura 9 exemplifica, nela os elétrons se encontram fracamente ligados aos átomos de carbono. A característica do grafeno possuir excelente condutividade se dá pela presença das ligações π , uma vez que os elétrons se encontram fracamente ligados aos átomos tendo assim fácil mobilidade.

Figura 9 – Ilustração dos orbitais na rede cristalina do grafeno e formação de ligações covalentes σ e π [Adaptado de (OXTOBY; GILLIS; BUTLER, 2015; SHAFRANIUK, 2015)].



3.2.1 Rede Direta

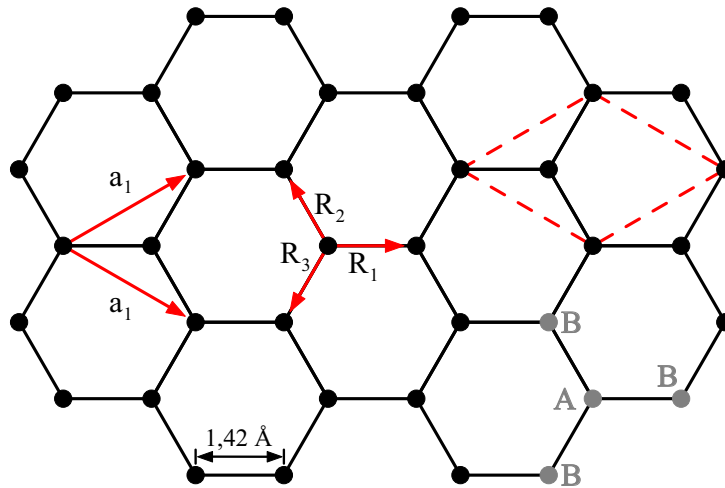
Os sólidos cristalinos equivalem a uma disposição regular de partes idênticas que se repetem veemente no espaço, neste caso a estrutura do cristal pode ser descrita como a célula primitiva unitária ou rede de Bravais e a base como sendo os átomos ou quantidade de pontos interligados na rede. Podendo apenas ser considerada como rede de Bravais quando o arranjo e orientação dos pontos é simétrico ao longo de qualquer ponto observável da rede (GROSSO; PARRAVICINI, 2014).

A rede do grafeno sendo uma estrutura hexagonal ou favo de mel (*Honeycomb*) não é uma rede de Bravais, no entanto pode ser convertida em uma rede fundamental

se considerarmos que a sua base é constituída por dois átomos A e B conforme ilustra a Figura 10. Onde a distância entre átomos de carbono é de aproximadamente $a_{C-C} = 1,42 \text{ \AA}$. As bolas representam átomos de carbono e os bastões simbolizam as ligações σ entre os átomos (WU et al., 2013).

Através desses dois átomos A e B , então, a rede no formato hexagonal pode ser caracterizada como rede de Bravais, de forma a contribuir com dois elétrons π por célula unitária. Conforme a Figura 10., a célula unitária primitiva ilustrada pelo paralelogramo tem seu lado definido como $a = \sqrt{3}a_{C-C}$ de forma a se ter um valor de $0,246 \text{ nm}$. Já os vetores a_1 e a_2 podem ser definidos através da Equação 3.1 e Equação 3.2 de forma que $|\vec{b}_1| = |\vec{b}_2| = \frac{4\pi}{\sqrt{3}a}$

Figura 10 – Rede direta para o grafeno e ilustração da célula unitária por paralelogramo equilátero. [Adaptado de (WONG; AKINWANDE, 2011; MILOVANOVIC; PEETERS, 2018)].



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

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

Por outro lado, os vetores que descrevem a separação entre átomos mais próximos (A, B e B) pode ser descrito através da Equação 3.3 a Equação 3.5.

$$|\vec{R}_1| = -a_2 + R_2 = \frac{a}{1} \left(\frac{-1}{\sqrt{3}}x + y \right) \quad (3.3)$$

$$|\vec{R}_2| = \frac{a}{\sqrt{3}}x \quad (3.4)$$

$$|\vec{R}_1| = -a_1 + R_1 = \frac{a}{2} \left(\frac{-1}{\sqrt{3}}x - y \right) \quad (3.5)$$

3.2.2 Rede Recíproca

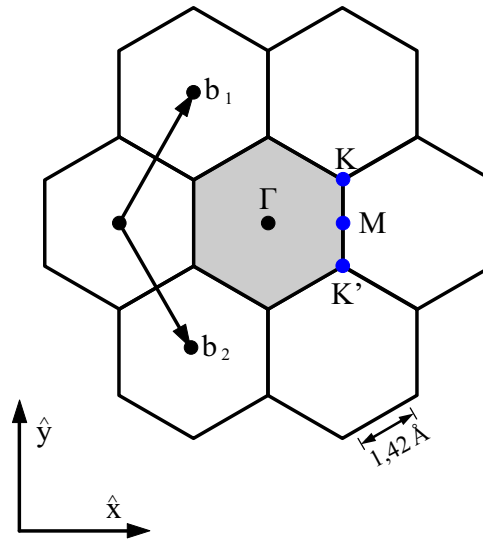
A rede recíproca para o grafeno é semelhante a rede direta, havendo somente a mudança de orientação, ou seja, na rede recíproca a estrutura é visualizada com angulação de 90° em relação a rede direta conforme exemplifica a Figura 11., em outras palavras a rede recíproca pode ser encontrada a partir da transformada de Fourier discreta da rede direta (DOVE; DOVE, 2003). Os vetores de rede recíproca são dados pelas Eqs. abaixo

$$|\vec{b}_1| = \left(\frac{2\pi}{\sqrt{3}a}, \frac{2\pi}{2} \right) \quad (3.6)$$

$$|\vec{b}_2| = \left(\frac{2\pi}{\sqrt{3}a} - \frac{2\pi}{2} \right) \quad (3.7)$$

De forma que $|\vec{b}_1| = |\vec{b}_2| = \frac{4\pi}{\sqrt{3}a}$. Na Figura 11., é ilustrado pelo hexágono em cinza a primeira zona de Brillouin importante para entendimento da estrutura de banda dos elétrons e outras excitações fundamentais que existem dentro do sólido.

Figura 11 – Ilustração da rede recíproca do grafeno de forma que o hexágono cinza representa a primeira zona de Brillouin [Adaptado de (DOVE; DOVE, 2003; AVOURIS, 2010)].



Estrutura essa tendo o comprimento de seus lados e área descritos por $b_{BZ} = \frac{|\vec{b}_1|}{\sqrt{3}} = \frac{4\pi}{3a}$ e $\frac{8\pi^2}{\sqrt{3}a^2}$ respectivamente. E os três pontos de simetria da zona de Brillouin importantes para análise do grafeno podem ser identificados ou localizados através da convenção dos pontos Γ , M e K (Figura 11.), onde Γ é centralizado na zona de Brillouin e os vetores os quais descrevem a localização dos pontos são descritos pelas Eqs. abaixo. Existindo seis pontos K e M dentro da zona.

$$\Gamma M = \left(\frac{2\pi}{\sqrt{3}a}, 0 \right) \quad (3.8)$$

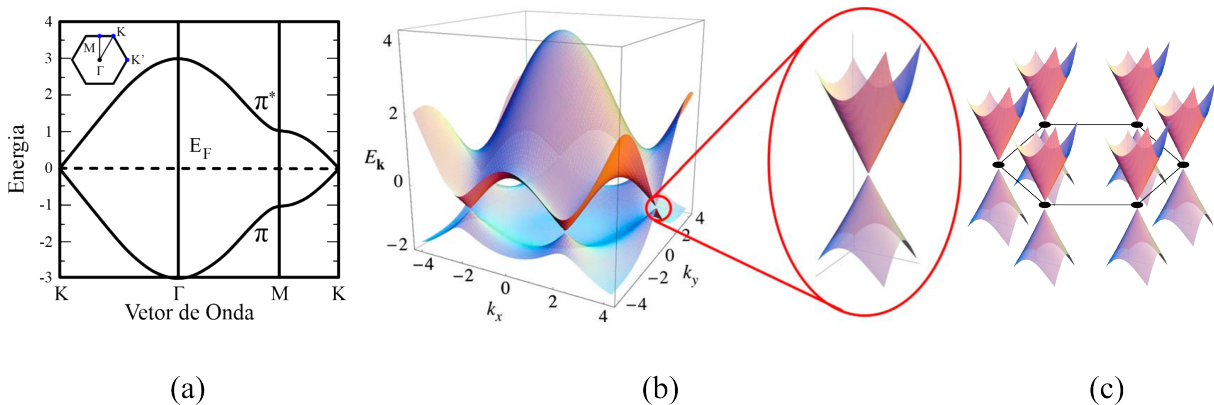
$$\Gamma M = \left(\frac{2\pi}{\sqrt{3}a}, \frac{2\pi}{3a} \right) \quad (3.9)$$

$$|\Gamma M| = \frac{2\pi}{\sqrt{3}a}; |\Gamma K| = \frac{4\pi}{3a} \text{ e } MK = \frac{2\pi}{3a} \quad (3.10)$$

3.2.3 Propriedades e Estrutura Eletrônica do Grafeno

Em estudos com grafeno no contexto de eletricidade e condução enfatizam-se os elétrons π , haja visto que esses elétrons se encontram deslocados por todo o plano da estrutura do grafeno como se fossem uma nuvem de elétrons fracamente ligados ao carbono, logo, a condutividade elétrica do grafeno está estritamente relacionada com a estrutura de bandas desses elétrons. Neste material as bandas de condução e valência se cruzam no ponto denominado ponto de Dirac, definido pelos seis vértices K da primeira zona de Brillouin como exemplificado na Figura 12. Em matemática e física do estado sólido, a primeira zona de Brillouin é uma célula primitiva definida de forma única no espaço recíproco. Da mesma forma que a rede de Bravais é dividida em células de Wigner-Seitz na rede real, a rede recíproca é dividida em zonas de Brillouin. (GEIM; NOVOSELOV, 2010; GONÇALVES; PERES, 2016).

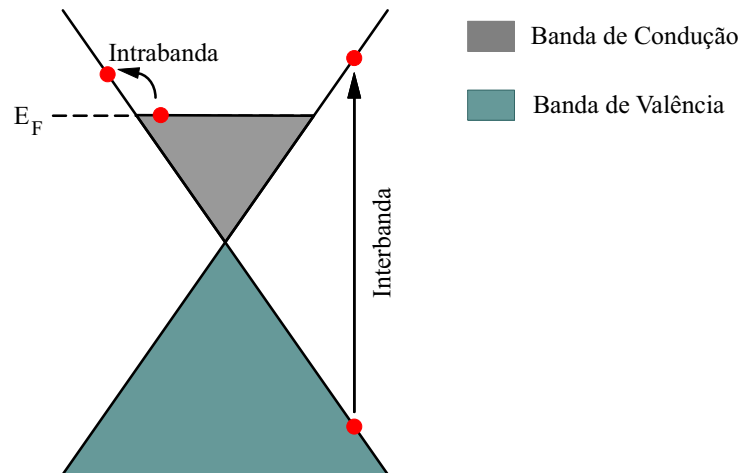
Figura 12 – (a) Estrutura de bandas 2D do grafeno [Adaptado de (ENOKI; ANDO, 2019)], (b) Estrutura de bandas 3D e (c) ilustração da estrutura de banda na rede *honeycomb*. [Adaptado de (NETO et al., 2009)].



Nestes vértices (Figura 12 – (b)), as bandas de condução ($E > 0$) e de valência ($E < 0$) se tocam, formando um cone que se intercepta no nível de Fermi (E_F) conforme exemplifica a Figura 13. Assim, o grafeno pode ser considerado um semicondutor de *gap* nulo onde os elétrons podem se movimentar de forma mais espontânea, ou seja, passam facilmente para a banda de condução e estabelecem corrente. O grafeno é tido também como semicondutor de *gap* nulo com uma dispersão linear nos pontos K , o que leva a conclusão que o grafeno quando na presença de energias baixas, tem seus elétrons se comportando como partículas sem massa (Férmions) o que permite a condução

de elétrons com velocidade 300 vezes menor que a da luz ($c = 3e^8 m/s$), ou seja, com velocidades de Fermi ($v_F = \frac{c}{300}$) (GEIM; NOVOSELOV, 2010; GONÇALVES; PERES, 2016).

Figura 13 – Interações entre bandas e nível de Fermi (E_F). [Adaptado de (GONÇALVES; PERES, 2016)]

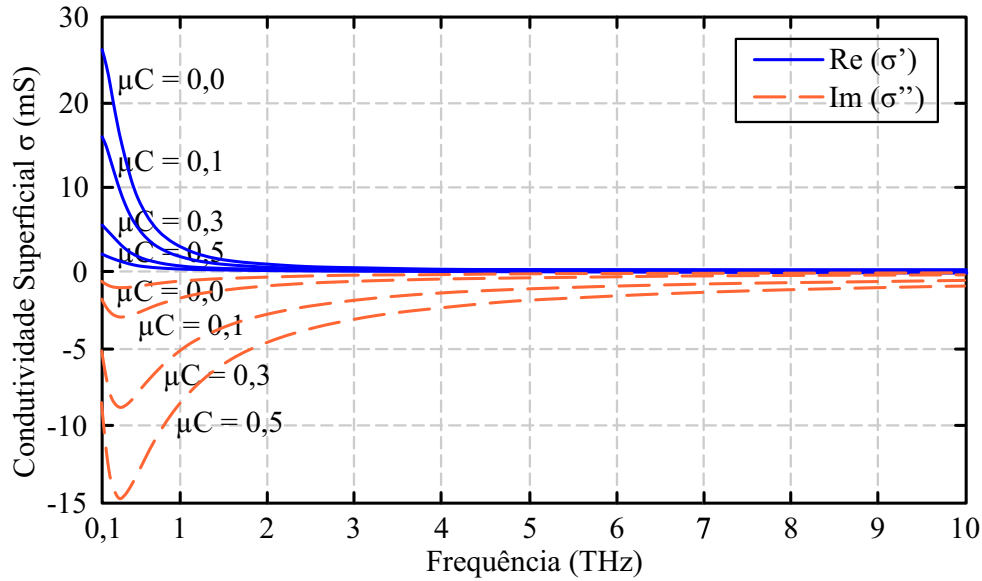


Todas essas propriedades fazem com que o grafeno seja um material multi-aplicável em diversos segmentos como o qual é abordado neste trabalho. O grafeno tem a capacidade de mudar a forma como transporta cargas bastando aplicar uma tensão de porta química para que valores de potencial químico (μ_c) variem (Figura 14), essa mudança acarreta na variação de posição em que o nível de Fermi (E_F) ilustrado na Figura 13, pode ser encontrado, em outras palavras, o nível de Fermi (E_F) se desloca em relação ao ponto de Dirac conforme há a aplicação de campo elétrico externo na folha de grafeno, de forma que cria-se uma pequena sobreposição entre as bandas de condução e de valência, o que facilita o transporte de portadores de carga (elétrons ou buracos) no grafeno (GEIM; NOVOSELOV, 2010; AVOURIS, 2010).

3.2.4 Condutividade Superficial do Grafeno

O grafeno é considerado um semiconductor de gap nulo, com características eletricamente ajustáveis através de dopagem química, ou seja, do potencial químico ou através de portas elétricas, possuindo também uma condutividade complexa $\sigma(\omega, \mu_c, \Gamma, T)$. O grafeno possui interações Intrabanda e Interbanda que possibilitam o cálculo de sua condutividade (MIKHAILOV; ZIEGLER, 2007), sendo a contribuição intrabanda predominante neste caso de aplicação, por tal motivo será abordado apenas essa contribuição quando observado a condutividade superficial da folha (camada/disco) de grafeno a nível de simulação numérica. O efeito de borda será desconsiderado neste trabalho, o que por sua vez, possibilitará o uso do formalismo de Kubo para calcular a condutividade superficial de uma folha de grafeno infinita. Através do exposto, a condutividade do

Figura 14 – Condutividade superficial do grafeno parte real e imaginária para os valores ímpares de porta química. (Autor, 2022).



grafeno pode ser definida pela expressão resultante da fórmula de Kubo (MIKHAILOV; ZIEGLER, 2007; HANSON, 2008) de acordo com a equação Equação 3.11.

$$\sigma(\omega, \mu_c, \Gamma, T) = \sigma_{intra} + \sigma_{inter} \quad (3.11)$$

A qual em temperaturas ambientes e frequências de baixo terahertz possibilita o cálculo da condutividade unicamente através de uma dessas interações, a Intrabanda Equação 3.12.

$$\sigma_{intra} = \frac{je^2(\omega - j2\Gamma)}{\pi\hbar^2} \left[\frac{1}{\omega - j2\Gamma} \int_0^\infty \left(\epsilon \frac{\partial f_d \epsilon}{\partial \epsilon} - \frac{\partial f_d(-\epsilon)}{\partial \epsilon} d\epsilon \right) \right] \quad (3.12)$$

A contribuição Interbanda pode ser obtida através de Equação 3.13.

$$\sigma_{inter} = \frac{je^2(\omega - j2\Gamma)}{\pi\hbar^2} \left[- \int_0^\infty \frac{f_d(-\epsilon) - f_d \epsilon}{(\omega - j2\Gamma)^2 - 4\left(\frac{\epsilon}{\hbar}\right)^2} d\epsilon \right] \quad (3.13)$$

Onde e é a carga do elétron, j é um número imaginário adotado como $\sqrt{-1}$, ω é a frequência angular, Γ $\left(\frac{1}{2\tau}\right)$ é a taxa de espalhamento, \hbar é a constante de Planck reduzida $\frac{h}{2\pi}$, μ_c é o potencial químico dado em elétron volts (eV), τ é o tempo de relaxamento, T é a temperatura e $f_d \epsilon$ é a energia do elétron dependente da função de distribuição de Fermi-Dirac, dada pela equação Equação 3.14.

$$f_d \epsilon = \left(e^{\frac{\epsilon - \mu_c}{k_B T}} + 1 \right)^{-1} \quad (3.14)$$

Onde T é a temperatura absoluta e k_B é a constante de Boltzmann. A condutividade superficial do grafeno está relacionada diretamente com a impedância de superfície (JUANG et al., 2010), dessa forma temos que Equação 3.15

$$Z_s = \frac{1}{\sigma} \quad (3.15)$$

Todas essas características e propriedades descritas são qualidades muito atraentes para diversos ramos de pesquisa e aplicação, para isso diversos métodos podem ser usados para se chegar no grafeno, seja puro ou dopado, podendo ser por deposição química de vapor (CVD), decomposição de *SiC*, esfoliação mecânica e deposição de laser pulsado (PLD). (JUANG et al., 2010; SAEED et al., 2020).

A deposição química de vapor (CVD) como o nome sugere, é uma técnica de deposição de material, neste caso o grafeno, em substratos através de vapor de reações químicas, havendo também a fácil transferência do grafeno sob o ataque por solução ácida em alguns metais de transição. No reator CVD podem ocorrer diversas reações químicas, caso indesejadas, podem ser controladas através de fatores como, temperatura de reação, configuração do sistema e do reator, pressão do reator tempo de crescimento. Há também uma classificação para o método de energia usado no reator para geração do filme fino, sendo três os principais, CVD de parede quente, de parede fina e intensificado por plasma (JUANG et al., 2010; SAEED et al., 2020).

O CVD é um método parecido com o de deposição de laser pulsado (PLD). O método PLD é descrito como uma técnica de fabricação de filmes finos através de um feixe de laser de alta energia pulsado para bombardear um alvo específico sob determinada pressão de vácuo, esses alvos atingidos pelo laser atingem alta energia cinética, chegando próximo a alguns *KeV* o que possibilita a deposição dos filmes, ou seja, resulta na transição de fase sólida para fase de vapor, que posteriormente é revestido (depositado) em substratos, em temperaturas baixas comparadas a outras técnicas. O PLD possui temperatura mais baixa, possibilitando o trabalho com materiais mais sensíveis à temperatura com superfícies químicas que sejam ativas, menor custo e melhor versatilidade. (WANG, 2013; RUDRAPATI, 2020). Já o CVD tem maior facilidade em obter maiores domínios de material depositado. Uma das principais diferenças entre estes métodos está na fonte de carbono, no CVD a fonte é uma mistura de gás enquanto que no PLD necessita que seja um alvo sólido. O método de deposição química de vapor é bem exemplificado em Tai et al. (2018). Uma melhor explicação para a deposição química de vapor para o grafeno e o método de deposição de laser pulsado pode ser encontrada nas referências: (JUANG et al., 2010; WANG, 2013; TAI et al., 2018; SAEED et al., 2020; RUDRAPATI, 2020).

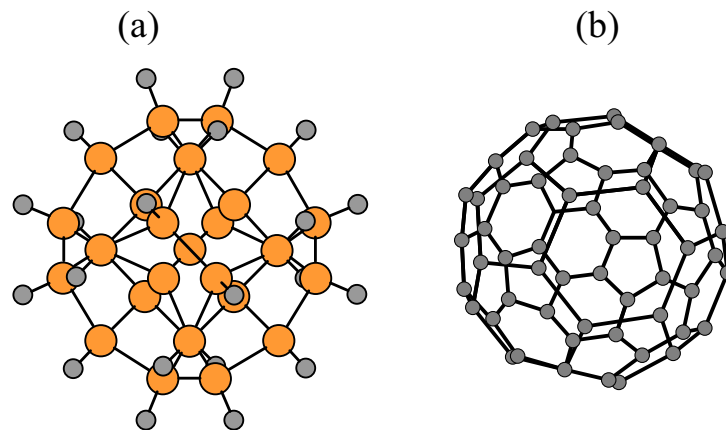
3.3 Silício, um material funcional

O silício depois do Oxigênio é o elemento mais abundante na Terra, pertencente ao grupo XIV da tabela periódica, é um metalóide, um dos poucos elementos que possuem propriedades de metais e não metais cujo número de elétrons livres é menor

do que o de um condutor, contudo maior do que o de um isolante. Os materiais de silício têm muitas aplicações na tecnologia de fabricação de componentes microeletrônicos, circuitos integrados e toda área de aplicações tecnológicas que necessitam de material semicondutor, no qual o *Si* é considerado matéria prima base. Em microssistemas, o silício não é apenas um material estrutural, mas também um material funcional. Compostos dielétricos de silício, nitreto e óxido também são amplamente utilizados em microssistemas. Filmes de nitreto de silício têm sido utilizados como camada de passivação em dispositivos semicondutores devido à sua alta estabilidade e inércia. Os semicondutores são caracterizados por possuírem condutividade elétrica intermediária entre os isolantes e condutores. O *Si* semicondutor ocorre através de um processo de dopagem que consiste na adição de uma substância (impureza) díspar do silício. Com esse processo, é possível controlar a concentração de portadores de carga e assim modificar as propriedades elétricas do material (GIANCHANDANI; TABATA; ZAPPE, 2008; NAYFEH, 2018; ZAIDI; BELGHIT, 2019).

As nanopartículas de silício são semelhantes às esferas de fulereno de carbono citadas na Capítulo 3. Mas, em oposição aos fulerenos que são esferas vazias, as nanopartículas de silício são compactas e possuem o elemento hidrogênio serpenteando a superfície como mostra a Figura 15 - (a).

Figura 15 – (a) Nanopartícula de Silício com esferas cinza representando o Hidrogênio [Adaptado de (NAYFEH, 2018)] e (b) Fulereno, alótropo do Carbono [Adaptado de (OXTOBY; GILLIS; BUTLER, 2015)].

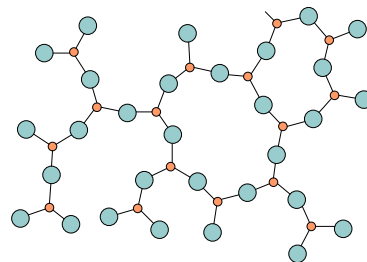


O silício é um semicondutor cujo *gap* de energia é de 1,12 eV. A resistividade pode ser controlada em um elevado *range* através da adição de outros elementos (impurezas). A resistividade do silício puro é de 198 $k\Omega\ cm$ sob temperatura ambiente.

Outra estrutura de silício importante são os nanofios de silício (SiNWs). Eles têm uma estrutura eletrônica quase unidimensional e são considerados um dos materiais 1D mais importantes. Diferentemente do carbono advindo da coordenação sp^2 , o silício pertence à coordenação sp^3 , as estruturas de silício são perincipalmente nanoestruturas sólidas. Por outro lado, as denominadas nanopartículas de Sílica divergentes em sua formulação (SiO_2) são indispensáveis para várias aplicações industriais. O dióxido de

silício tem uma estrutura amorfa vítrea, que não apresenta simetria e periodicidade na estrutura de acordo como a Figura 16 exemplifica (CALLISTER, 2016). No dióxido de silício, as estruturas possuem redes 3D que são compostas por um tetraedro de sílica. Os tetraedros de sílica compartilham apenas cantos e cada íon de oxigênio está ligado a não mais que dois cátions no centro do tetraedro. São usados para fazer substratos eletrônicos, substratos de filmes finos, isolantes elétricos e isolantes térmicos, alguns dos quais são componentes base para realização deste trabalho (NAYFEH, 2018; ZAIDI; BELGHIT, 2019)

Figura 16 – Exemplificação estrutura amorfa Sílica com esferas laranja sendo Silício e azul claro sendo Oxigênio [Adaptado de (CALLISTER, 2016)].



3.4 Dielétricos

Materiais dielétricos são eletricamente não condutores, materiais como borracha, mica, vidro, madeira e papel. Todos os materiais dielétricos são materiais em suma isolantes. A diferença entre um dielétrico e um isolante está em suas aplicações. Se a principal função dos materiais não condutores é fornecer isolamento elétrico, eles são chamados de isolantes. Por outro lado, se a principal função dos materiais não condutores é armazenar cargas elétricas, eles são chamados de dielétricos. Geralmente, os dielétricos são materiais não metálicos de alta resistividade (HIPPEL; MORGAN, 1955; MARTINEZ-VEGA, 2013).

Os materiais dielétricos podem ser classificados em dielétricos ativos e passivos.

1. Dielétricos ativos: Quando um material dielétrico é submetido a um campo elétrico externo, se ele aceita ativamente a eletricidade, então é conhecido como material dielétrico ativo. Dessa forma, os dielétricos ativos podem se adaptar facilmente para armazenar energia, caracterizando-se assim como ativos (MARTINEZ-VEGA, 2013).
2. Dielétricos passivos: Os dielétricos passivos restringem o fluxo de energia elétrica neles. Dessa maneira, esses dielétricos atuam como isolantes. Exemplos: A maioria os materiais isolantes exemplificados na Figura 17, (MARTINEZ-VEGA, 2013).

3.4.1 Permissividade

A permissividade representa a propriedade dielétrica de um meio. Indica a natureza facilmente polarizável de um material, ou seja, o deslocamento reversível das nuvens eletrônicas nos átomos ou moléculas de um material isolante exposto a um campo elétrico externo. Sua unidade é farad/metro

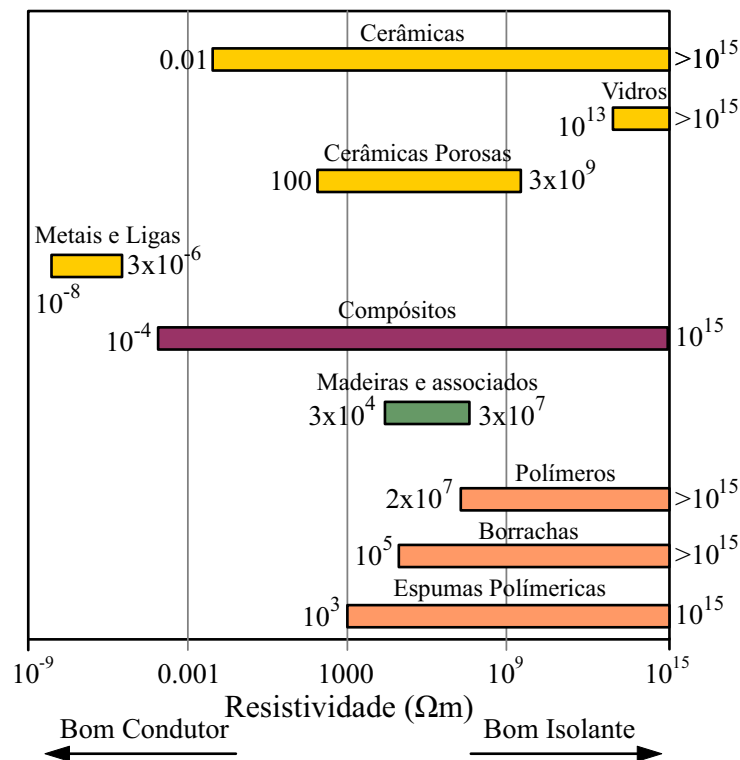
3.4.2 Constante Dielétrica

Determinada característica dielétrica de um material é determinada por sua constante dielétrica. É uma medida de polarização (processo de produção de dipolos elétricos dentro do dielétrico pela aplicação de um campo elétrico externo) dos dielétricos. Em outras palavras, é a razão entre a permissividade absoluta do meio (ϵ) e a permissividade do espaço livre (ϵ_0). (HIPPEL; MORGAN, 1955; MARTINEZ-VEGA, 2013)

$$\epsilon_r = \epsilon / \epsilon_0 \tag{3.16}$$

A Figura 17 trás um apanhado de materiais e suas respectivas resistividades.

Figura 17 – Comparativo de resistência a passagem de corrente em diversas categorias de materiais [Adaptado de (ASTAKHOV, 2018)].



3.5 Porque a Prata ?

A prata tem a maior condutividade elétrica e térmica de todos os materiais de contato, e seus elétrons se movem mais livremente do que outros elementos. Isso o torna ideal para lidar com altas correntes. A condutividade refere-se à capacidade de um material de transmitir energia. Existem diferentes tipos de condutividade, incluindo condutividade elétrica, condutividade térmica e condutividade acústica. O elemento mais condutor é a prata, seguida pelo cobre e ouro como anteriormente citado. A pureza da prata fina é geralmente acima de 99,9%, a resistência ao desgaste é moderada e a dureza é em torno de 75-200 HV, que é muito semelhante ao ouro (BABURIN et al., 2019; GALATAGE et al., 2021).

A condutividade da prata nas CNTP é $62,5 \text{ Sm/mm}^2$. Em alguns casos específicos, a prata é utilizada como condutor em determinados circuitos eletrônicos que requerem alta precisão, como em microeletrônica e radiofrequência, e é amplamente utilizada como meio eficiente de transferência de energia. Usando prata, o supercondutor pode ter um transporte de corrente mais alto, o que o torna mais eficiente do que um supercondutor trabalhando sozinho. Quando outros metais são colocados perto do supercondutor, a condutividade diminui, mas para a prata, o efeito é revertido, aumentando em grande medida a supercondutividade (BABURIN et al., 2019; GALATAGE et al., 2021).

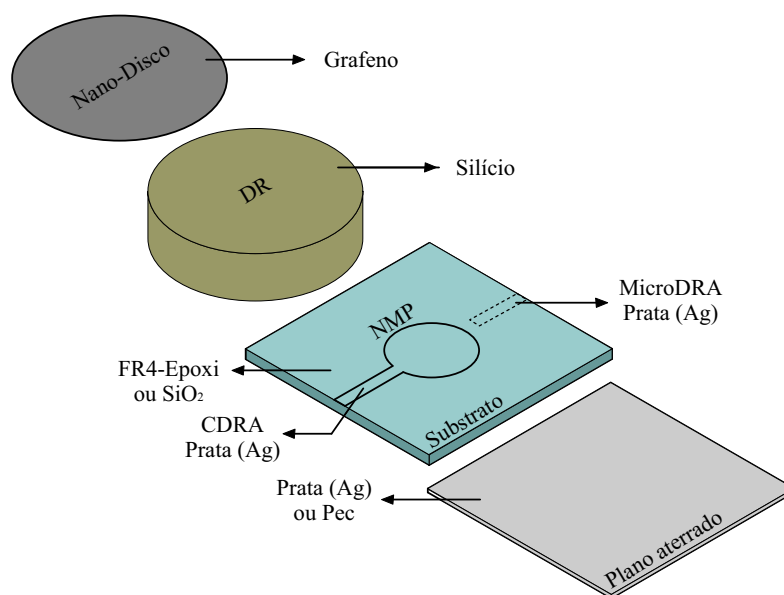
Tabela 1 – Propriedades condutivas de diferentes elementos (BABURIN et al., 2019; GALATAGE et al., 2021)

Posição	Elemento	Símbolo	Condutividade ($S.m * mm^2$)
1	Prata	<i>Ag</i>	62,5
2	Cobre	<i>Cu</i>	59,7
3	Ouro	<i>Au</i>	42,5
4	Alumínio	<i>Al</i>	36,6

3.6 Materiais, Considerações finais do capítulo

Dado o referencial teórico base para estes materiais, é possível entender as funções desempenhadas dentro do escopo deste trabalho, onde cada material aliado a suas características e propriedades empenna função ímpar necessária para resultados promissores.

Figura 18 – Antena e seus materiais (Autor, 2022).



4 RADIAÇÃO TERAHERTZ

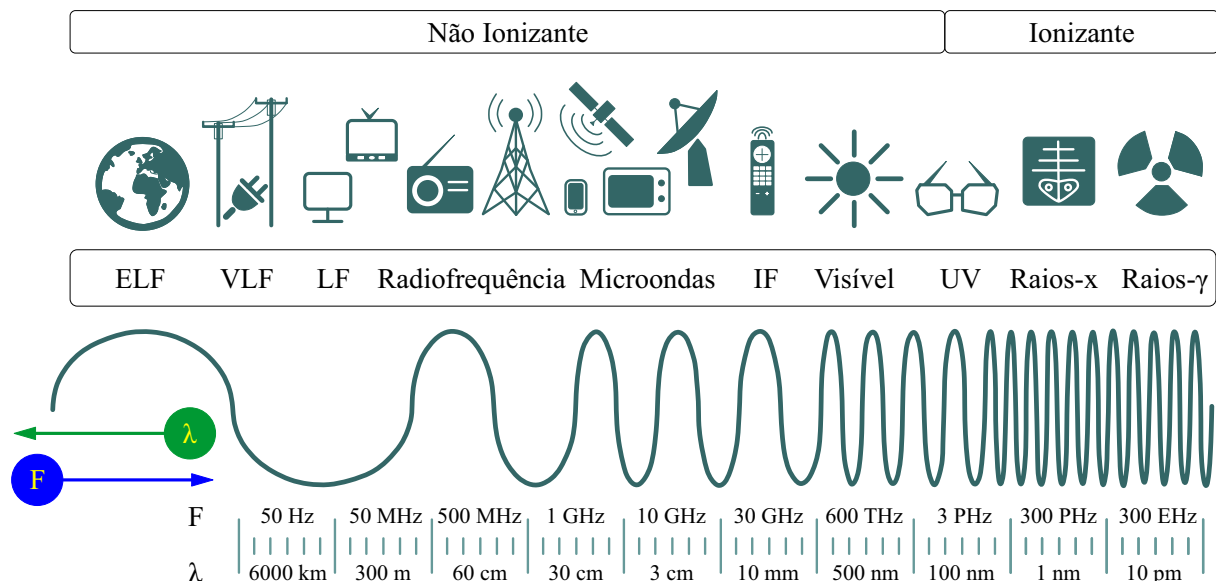
4.1 Introdução

O tratamento de imagens por tecnologias consideradas divergentes ou pouco exploradas em campos diferentes daqueles originalmente concebidos tem feito grandes avanços, a exemplo da espectroscopia terahertz, uma tecnologia emergente que representa uma série de avanços técnicos em diversas aplicações científicas. Esta radiação tem uma energia de fótons muito baixa e, portanto, não representa um risco de ionização para tecidos biológicos. Este capítulo fornece uma base teórica introdutória para alguns destes tipos de aplicação.

4.2 Aplicações THz

A radiação THz pode ocorrer naturalmente no meio, como parte do espectro solar, por radiação natural na atmosfera terrestre além da possibilidade de ser advinda de fontes como as antenas. O caráter não ionizante dessa radiação e a indisponibilidade de boas fontes e detectores por muito tempo fizeram com que tal região permanecesse quase inexplorada, sendo comumente chamada de “THz gap”. Contudo, apresentando propriedades distintas e faixa espectral menos saturada que as convencionais, houve o estudo, busca e desenvolvimento de novas fontes de THz para amplo campo de aplicação, de maneira a apresentar condições ideais para a compreensão das interações entre radiação THz e biomoléculas assim como diversas outras aplicações passíveis. (BOCK et al., 2010).

Figura 19 – Espectro eletromagnético com diferentes comprimentos de onda e passíveis aplicações [Adaptado de (KARABOYTCHEVA, 2020)].



4.3 Medicina

Vários recursos atípicos tornam o THz muito adequado para aplicações médicas. Sendo o mais notável quando observado a âmbito de materiais (substâncias), a capacidade para distinguir entre diferentes compostos, ou seja, a capacidade de "ler" as diferentes assinaturas exibidas por diferentes materiais através da energia das transições rotacionais e vibracionais das moléculas localizadas na região THz assim como as vibrações intermoleculares, que como as ligações de hidrogênio, exibem diferentes características espectrais nessa faixa. Em outras palavras, quando a radiação THz se propaga através de uma biomolécula, esta produz sua assinatura vibracional espectral característica na faixa de THz. A "impressão digital de THz" pode ser utilizada para identificar e caracterizar objetos com base em medições espectroscópicas de THz. A radiação THz é muito sensível a substâncias polares (água). Dessa maneira, as ondas THz podem fornecer por exemplo, um contraste melhor para os tecidos moles (% de umidade) do que os raios-X. Devido a localização da faixa THz no espectro eletromagnético, as ondas THz são transitórias e possuem alta penetração, banda larga, coerência e baixa energia, podendo detectar a maioria das biomoléculas como DNA, RNA e outras proteínas virais (KHALIDUZZAMAN et al., 2020). A detecção e identificação de vírus têm sido de grande interesse devido à sua associação com doenças graves e eventos recentes como a pandemia de Coronavírus (COVID-19).

4.4 Indústria de alimentos

Devido às características descritas, a identificação de moléculas por meio da agnição de ondas THz tem se mostrado inovadora e promissora, bastante explorada também na indústria alimentícia. A espectroscopia de THz tem sido utilizada para identificar proteínas em alimentos processados (XIE; YAO; YING, 2014). A espectroscopia de absorção de THz foi usada com sucesso em análises qualitativas para diferenciar três isômeros de Trehalose, um açúcar bi-glicose amplamente utilizado na indústria alimentícia (HUANG et al., 2020). Um exemplo clássico e pioneiro foram as aplicações da espectrometria THz na identificação de ovos fecundados (KHALIDUZZAMAN et al., 2020)

4.5 Agro

O THz pode ser capaz de determinar o estado hídrico das plantas em condições de seca (BROWNE et al., 2020). Sementes de arroz transgênico podem ser identificadas com eficiência devido a alterações estruturais de suas moléculas (ZHANG et al., 2020). Outro uso potencial da espectrometria de THz é o monitoramento e quantificação de moléculas de carboidratos através da "impressão digital Thz".

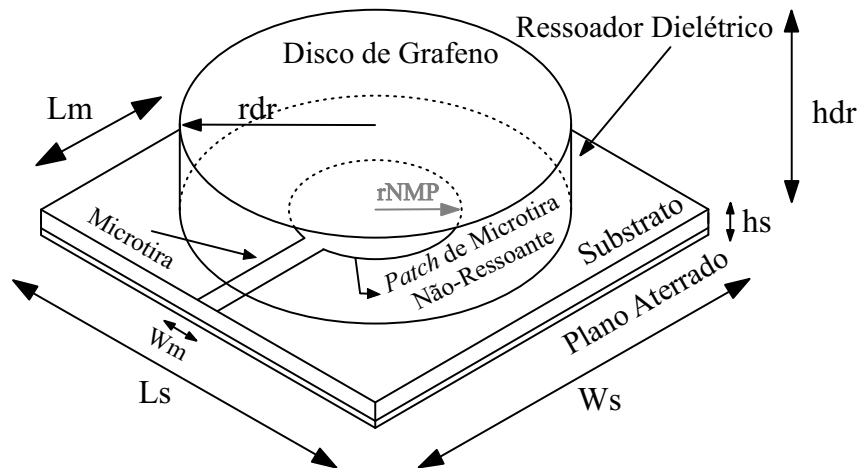
4.6 Tecnologia promissora ?

Aplicações pioneiras da tecnologia THz se abstiveram principalmente à ciência espacial e espectroscopia molecular (WALKER; KULESA, 2005; DAVIES; LINFIELD, 2007), no entanto o interesse em aplicações biomédicas tem aumentado desde a primeira introdução da imagem pulsada THz (TPI) por Hu e Nuss (1995). Dessa maneira abre-se um leque de possibilidades e necessidades a serem sanadas, seja no desenvolvimento de bons transmissores/receptores de sinal THz (antenas) ou no desenvolvimento de novos materiais capazes de suprir a necessidade de tecnologia e eficiência.

5 GEOMETRIA DA ANTENA: UM PROJETO

O modelo inicial de antena obedece às equações padrões para antenas DRA (RICHTMYER, 1939; MONGIA; ITTIPIBOON, 1997; LUK, 2003; PETOSA, 2007; YADUVANSHI et al., 2021) tendo seus parâmetros espelhados em calculo e também analisados com base em literatura (VARSHNEY, 2021). A antena ilustrada na Figura 20., de modo geral, possui seus componentes listados e especificados na Tabela Tabela 2. Onde ao decorrer do trabalho apenas modificaram-se características como estrutura NMP e potencial químico do grafeno. A antena foi simulada com um substrato feito de dióxido de silício com permissividade relativa (ϵ_r) de 4 com espessura de 2.4 micrômetros e ressoador dielétrico feito de silício ($\epsilon_r = 11.9$).

Figura 20 – Projeto de antena dielétrica ressoadora cilíndrica com camada de grafeno recobrendo o ressoador dielétrico e estrutura seletora de modo eletromagnético de resposta NMP. (Autor 2022).



Não havendo uma solução matemática analítica com exatidão para análise de ressoadores dielétricos cilíndricos, houveram vários métodos aproximados desenvolvidos por muitos pesquisadores para determinar a frequência para esse tipo de estrutura, é comum o cálculo da frequência de ressonância para modos como o eletromagnético híbrido fundamental ($HEM_{11\delta}$) através da equação Equação 5.1 e Equação 5.2 (STUTZMAN; THIELE, 2012).

$$f_r \simeq \frac{c}{\sqrt{\epsilon_r + \chi}} \frac{1}{2\pi a} k_1 \quad (5.1)$$

$$k_1 = 6.324 \left[0.27 + 0.36 \left(\frac{a}{H} \right) + 0.02 \left(\frac{a}{H} \right)^2 \right] \quad (5.2)$$

Os valores de χ são encontrados empiricamente ($1 \leq \chi \leq 2$), a é o raio do DR e H a altura. Neste trabalho em questão, foi utilizado uma outra expressão (Equação 2.3 proposta por (LUK, 2003) para o modo de irradiação de ordem superior ($HEM_{12\delta}$). Essas expressões tem intuito de acelerar o processo de computação do valor de frequência

de ressonância ao passo que fornece uma precisão aceitável, uma melhor explicação para entendimento dessas abordagens pode ser encontrada nas referências: (LUK, 2003; PETOSA, 2007; STUTZMAN; THIELE, 2012).

Por outro lado, a configuração para a estrutura seletora de modo eletromagnético consiste em uma abordagem mais complexa da estrutura de alimentação da antena, muitos trabalhos abordam antenas somente alimentadas por microfita como o de Stutzman e Thiele (2012). Neste trabalho em questão é abordado um patch de microfita não ressoante, a microfita alimenta o patch não ressoante, e este opera como uma fita de corrente equivalente, de acordo com Guha et al. (2011), essa estrutura NMP é usada para atingir a condição adequada para excitar a antena no modo de ordem superior além de possibilitar um ganho melhor e conseqüentemente melhor eficiência, assume-se que a estrutura NMP para baixos espectros de frequência THz é feito de prata e tem suas propriedades de acordo com Michalski e Zheng (1992).

Tabela 2 – Parâmetros e dimensões da antena DRA e estrutura NMP (Autor, 2022).

Parâmetros de Design	Medidas μm
Ws/Ls	60 x 60
hs	2.4
rdr	25
hdr	13.4
Wm/Lm	3.8 x 20
rNMP	12.7
Rad. Box	$\lambda/4$

Para melhor entendimento, foram adotados os nomes de CDRA Graphene para antena com camada/disco de grafeno sobre o DR e CDRA NoGraphene para antena que não possui a fina camada de grafeno. Na Figura 20., é possível observar o modelo de antena, visível também a camada de grafeno previamente calculada pela condutividade e impedância superficial no software MATLAB (2022) através de simulação numérica e também o modelo de alimentação NMP que produz uma corrente que possibilita a condição de contorno adequada para a excitação da antena. (RANA; PARUI, 2014).

O segundo modelo de antena denominado MicroDRA, basicamente segue o mesmo esquema ilustrativo disposto na Figura 20., apenas desconsiderando-se a estrutura NMP e havendo a variação das dimensões da antena, temperatura e porta química do grafeno, de forma a ser uma antena de menor tamanho e operante no espectro com maior comprimento de onda quando comparadas (7.24 - 7.27 THz) . Outra distinção é a forma como a antena foi desenvolvida, sendo por método de escalonamento por comprimento de onda. Na Tabela 3 são dispostos os parâmetros de construção e análise do protótipo simulável desenvolvido para a MicroDRA.

O cálculo da condutividade e da impedância do material grafeno foi realizada através de simulação numérica de forma a gerar inputs posteriormente utilizados

Tabela 3 – Parâmetros de Design modelo de antena 2, MicroDRA (Autor, 2022).

Parâmetros de Design	Medidas μm
Ws/Ls	45 x 45
hs	10
rdr	9.5
hdr	3
Wm/Lm	22.5 x 3

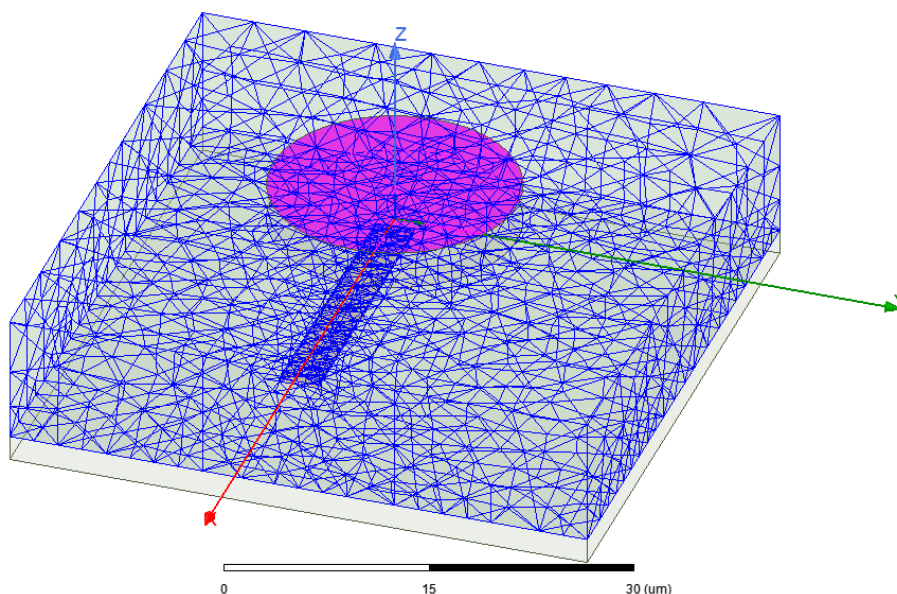
no software HFSS para implementação no modelo de antena e análise simulada de resultados com variação de frequência em função da impedância.

5.1 Software de Simulação

O HFSS é um programa que calcula os parâmetros S (parâmetros de dispersão) de estruturas passivas e ainda a distribuição em 3D de campos dessas estruturas, parâmetros estes os quais representam as características lineares de circuitos e componentes eletrônicos de RF, em outras palavras, os parâmetros S são relações entre ondas transitoriais nos terminais de determinados dispositivos a se caracterizar (ANSYS, 2022).

O HFSS utiliza como base os métodos de elementos finitos (MEF) o qual simplifica e torna factível o cálculo de estruturas complexas de engenharia. Este divide os objetos presentes no modelo em um grande número de pequenas regiões, as quais são denominadas de elementos finitos, e cada elemento é um tetraedro formada por quatro triângulos equiláteros (Figura 21), a isso é dado o nome de malha (*mesh*) (ANSYS, 2022).

Figura 21 – Malha distribuída no substrato, exemplificação dos tetraedros (Autor, 2022).



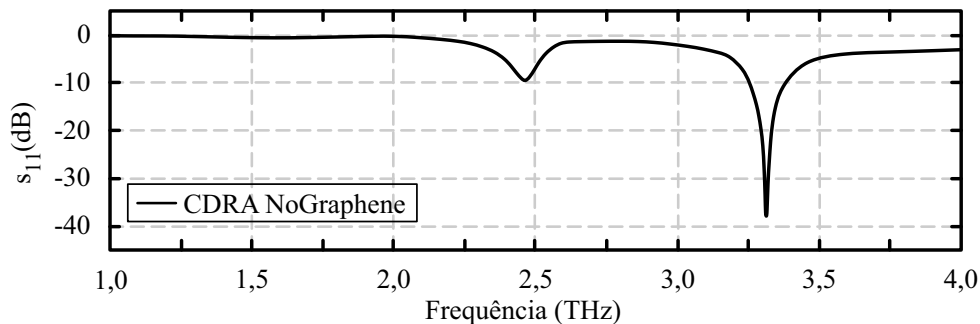
5.1.1 Nano-Disco de Grafeno modelado no HFSS

O nano-disco de Grafeno pode ser implementado no software através de condição de contorno de impedância, gera-se um código através do disposto no Capítulo 4 seção 3.2, o mesmo responsável pelos valores dispostos na Figura 14, com esse código é possível gerar arquivos de tabela (.tab) os quais podem ser importados no *solver* do software através dos comandos (*pwl*), dessa maneira, modelando a folha de grafeno.

5.2 Resultados e Discussões

A antena, inicialmente com o modelo CDRA NoGraphene foi simulada com a estrutura seletora de modos, sendo analisada através de parâmetros como perdas de retorno, resistência, reatância, padrões de radiação e eficiência, na Figura 22 é possível ver os resultados encontrados para perda de retorno no range de frequência adotado, larguras de banda e valores para faixa de frequência ressoante.

Figura 22 – Coeficiente de reflexão para antena CDRA sem camada de grafeno, apresentando ponto de ressonância dentro do espectro selecionado e almejado assim como estrutura seletora de modos (Autor 2022).

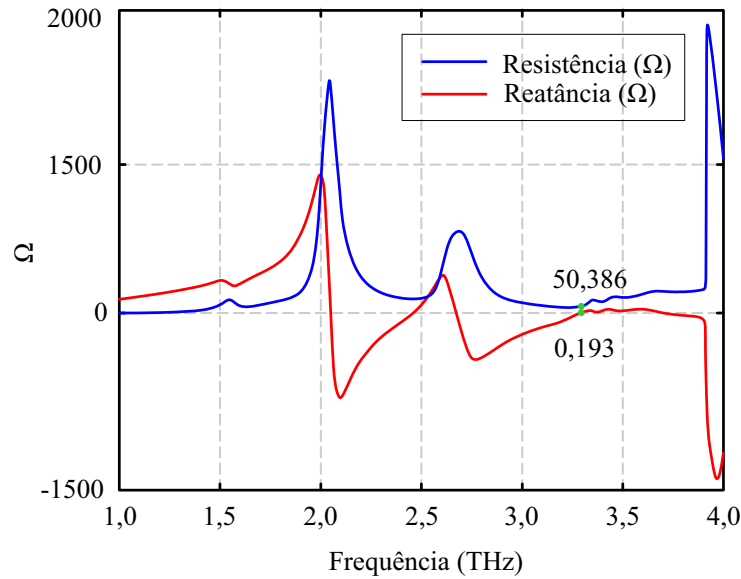


Os resultados encontrados para o modelo CDRA NoGraphene com estrutura NMP se mostraram promissores, tendo valores de resistência e reatância muito próximos ao ideal, além de apresentar largura de banda ampla com valor de 150 GHz, operante no ponto de 3,31 THz o modelo de antena também apresentou bom coeficiente de reflexão como mostra a Figura 22 e Tabela 4. Todos esses resultados sendo cruciais para posterior definição e aplicação do grafeno em camada sobre o ressoador da antena. Os gráficos mostram que os valores de resistência e reatância estão de acordo com o esperado, para resistência, o valor de 50 ou muito próximo e para reatância valor igual a zero ou muito próximo.

Tabela 4 – Valores de resultado encontrados para o modelo CDRA NoGraphene (Autor, 2022).

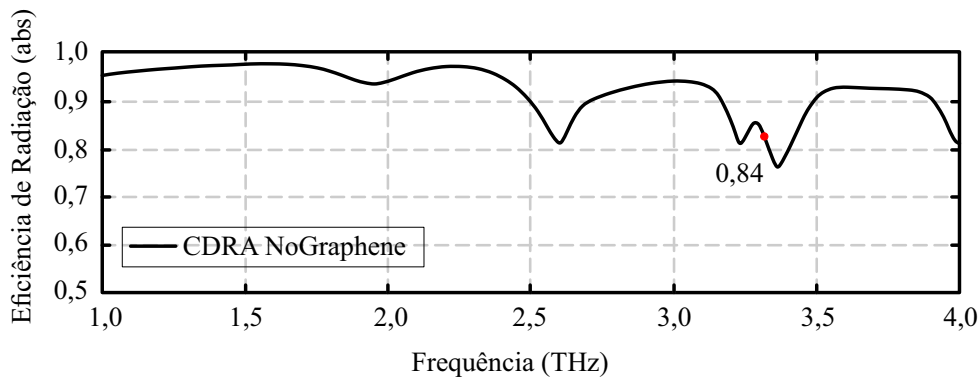
Frequência (THz)	Resistência ($Re\Omega$)	Reatância ($Im\Omega$)	S_{11} (dB)	Largura de banda (GHz)	Ganho (dB)
3.31	50.386	0.193	-37.9729	150	7.9

Figura 23 – Valores encontrados para a Resistência e Reatância CDRA NoGraphene (Autor 2022).



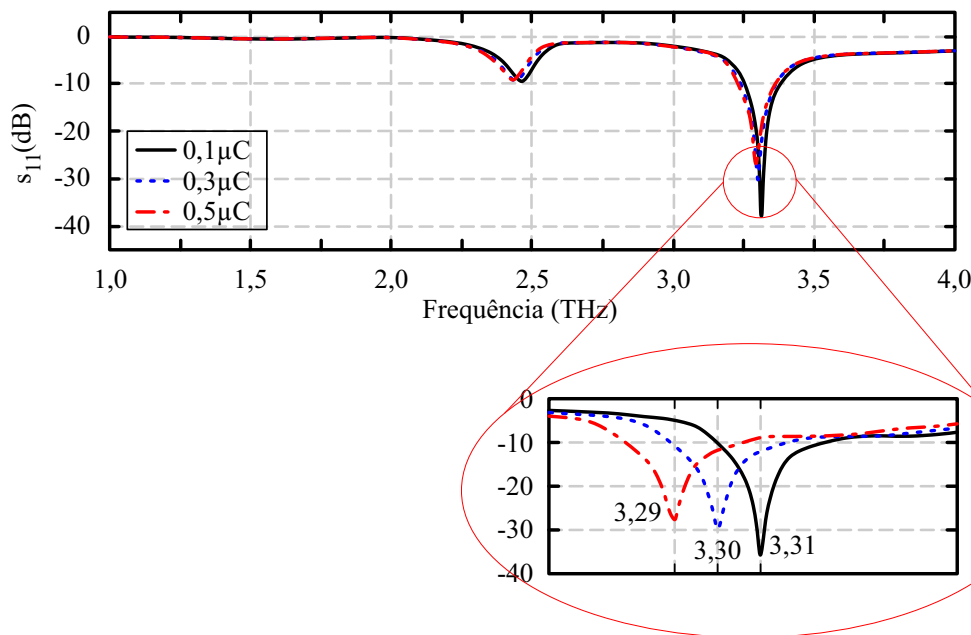
De acordo com os resultados encontrados, a antena obteve uma eficiência de radiação muito boa superando a casa dos 84% o que mostra que a energia de excitação foi irradiada e houveram poucas perdas prejudiciais ao desempenho da antena.

Figura 24 – Eficiência de radiação da antena CDRA sem camada de grafeno (Autor 2022).



Através das equações dispostas nos capítulos precedentes, obtiveram-se os valores de impedância e condutividade do grafeno que foram usados para alimentação no software ANSYS (2022), e então realizada a simulação do modelo de antena com variações de 0,1 até $1 \mu_c$ do potencial químico da camada de grafeno com espessura de $0,34 \text{ nm}$, dessa vez adotando-se o nome de CDRA Graphene. Na Figura 25 são mostrados os valores para perda de retorno e frequência de ressonância encontrados neste range de variação de valor de porta química da camada de grafeno, para melhor visualização a Figura 25 mostra alguns dos valores ímpares desconsiderando-se o valor nulo de potencial químico, por outro lado todos os valores são dispostos na Tabela 5, haja visto que os pontos de ressonância ficaram muito próximos o que dificulta a identificação dos demais valores de frequência.

Figura 25 – Coeficiente de reflexão para antena CDRA Graphene com aproximação dos pontos de ressonância (*zoom*) para melhor visualização da frequência de resposta em função do potencial químico. (Autor 2022).



A antena CDRA Graphene com potencial químico do grafeno variante, ressoou diferindo de 3.27 THz a 3.31 THz, congruente com o esperado, comprovando a capacidade de sintonização da resposta de frequência no espectro selecionado da antena através do grafeno, tal variação ocorreu em pares, a cada duas variações do potencial químico do grafeno a antena ressoou em um valor de frequência diferente, neste caso, modificando o ponto de ressonância em aproximadamente 0.25% a cada $0.2 \mu_c$, sendo a antena com $0.1 \mu_c$ a que obteve melhor parâmetro de perda de retorno cerca de -35.3910 dB e a com $0.9 \mu_c$ obtendo melhor largura de banda, 180 GHz. Na Tabela 5 são mostrados todos os valores para a antena CDRA Graphene. A adição da camada de grafeno neste trabalho operou reduzindo os valores de frequência, conforme houve o aumento do potencial químico houve a variação inversa dos pontos de ressonância.

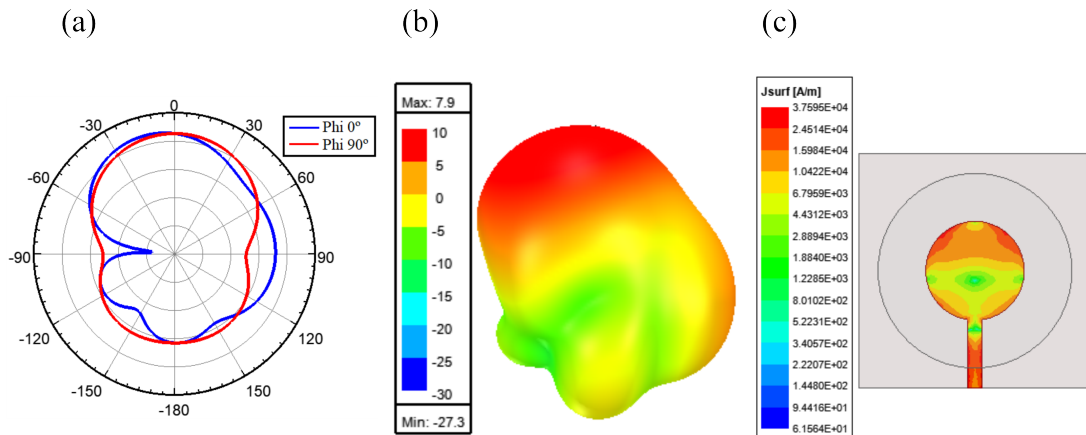
Tabela 5 – Valores de resultados mediante superfície seletora de frequência variante em sua porta química (Autor 2022).

Potencial Químico μ_c	Frequência (THz)	S_{11} (dB)	Largura de banda (GHz)	Ganho (dB)
0.1	3.31	-35.3910	160	7.8
0.3	3.30	-30.2727	170	7.7
0.5	3.29	-26.8098	170	7.7
0.7	3.28	-24.3833	170	7.7
0.9	3.27	-21.9707	180	7.6
1	3.27	-21.4915	170	7.6

Dos modelos onde variou-se o potencial químico da camada/disco de grafeno, o que apresentou maior ganho foi o com $0.1 \mu_c$, o restante manteve de maneira sucinta

um mesmo padrão para o ganho. Na Figura 26 é mostrado o padrão de radiação para a antena simulada com e sem camada de grafeno sobreposta ao DR assim como o gráfico de ganho e o padrão de densidade de corrente da estrutura *patch* de microfita não ressoante.

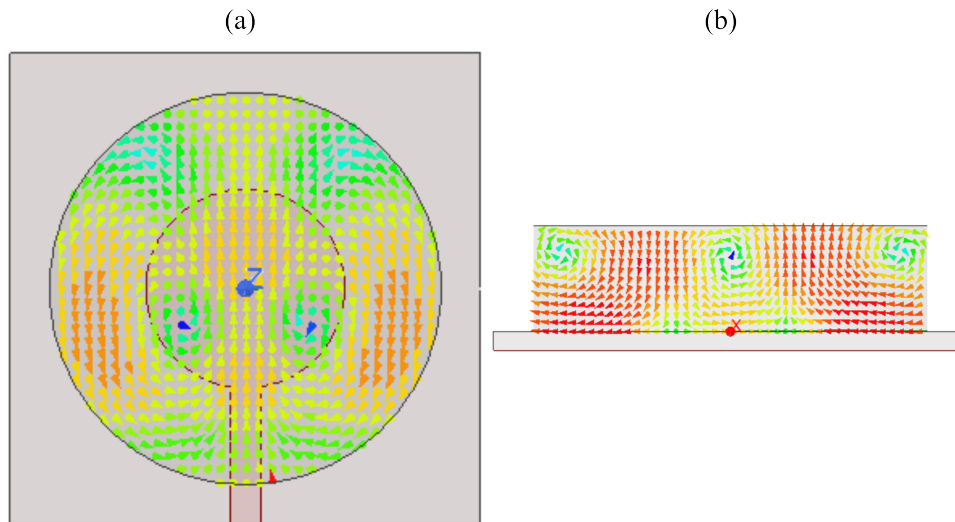
Figura 26 – Padrão de radiação apresentado pela antena, tendo lóbulos mais expressivos em -30 a 30 , 60 a 90 e 90 a -180° , gráfico de ganho total e ilustração da distribuição de corrente na estrutura NMP respectivamente (Autor 2022).



Na Figura 26 - (b) é mostrado o gráfico de ganho total para os modelos onde se implementou a fina camada de grafeno havendo inexpressiva mudança de padrão conforme mudança de potencial químico, considerando que o ganho para todas as antenas ficou entre 7.8 e 7.6 dB, variando no máximo 2.56% entre o menor e maior valor, todos os gráficos de ganho apresentaram os mesmos padrões de radiação, tendo variação máxima de 0.2, logo, são mostrados apenas os gráficos de ganho do modelo CDRA NoGraphene, o qual pode-se afirmar que representa todos os demais. Ainda na Figura 26 - (c) é mostrado também a densidade de corrente para o modelo, essas variações de corrente (impedância) levam a diferentes comprimentos de *Patch* elétricos equivalentes, onde o *Patch* opera de forma diferente conforme o comprimento elétrico correspondente, quanto mais valores de corrente em um condutor maior é a densidade de corrente e quanto mais forte a corrente mais intenso é o campo magnético gerando a propagação de sinal por conseguinte, neste caso o *Patch* não ressoante opera como uma fita (*ribbon*) equivalente sendo alimentado pela microfita. Na Figura 27 é mostrado o campo elétrico e campo magnético para o modo operante na antena, o modo excitado através da estrutura NMP, o $HEM_{12\delta}$, comprovado através da orientação dos campos eletromagnéticos.

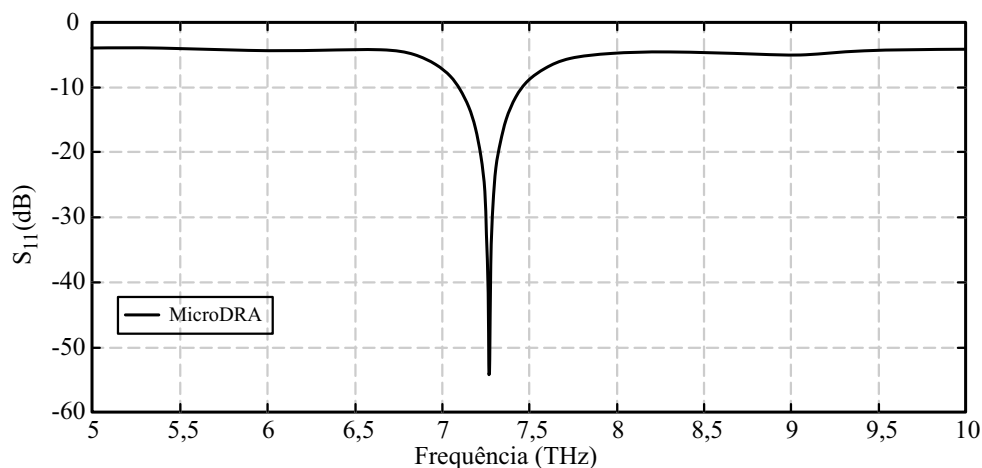
Por outro lado, o modelo denominado MicroDRA o qual foi abordado através de escalonamento, a nível comparativo obteve resultados superiores, outro resultado foi a análise a nível empírico da efetividade do código de simulação numérica quando observado a influência da variável temperatura na forma como a condução e impedância do grafeno se modificavam ou não empenhavam mudanças na forma como o material

Figura 27 – (a) E -field modo $HEM_{12\delta}$ em corte transversal para antena CDRA NoGraphene e (b) H -field modo $HEM_{12\delta}$ em corte axial para antena CDRA NoGraphene. (Autor 2022).



operava. A antena MicroDRA desenvolvida visando aplicações a nível de biomedicina, imagenologia e também para elevado tráfego de dados obteve bons parâmetros para estes campos de aplicação, operando no espectro THz o qual tem baixa incidência de potência quando comparado com raios X, oferece boa capacidade de imagem além de possuir dimensões micro. Na Figura 28 é mostrado o gráfico de perda de retorno e largura de banda para a MicroDRA, num primeiro momento não havendo aplicação da camada de grafeno sob o DR.

Figura 28 – Coeficiente de reflexão para antena MicroDRA, sendo possível mensurar a largura de banda em -10 dB (Autor, 2022).



Já os valores de resistência e reatância mostraram que a antena obteve excelente desenvoltura e comprovou a eficiência do modelo MicroDRA evidenciando que as dimensões e o comportamento da antena são congruentes com protótipos físicos. Na Figura 29 são dispostos os valores em gráfico dessas componentes e na Tabela 6 os demais resultados encontrados.

Figura 29 – Valores de resistência e reatância para antena MicroDRA (Autor 2022).

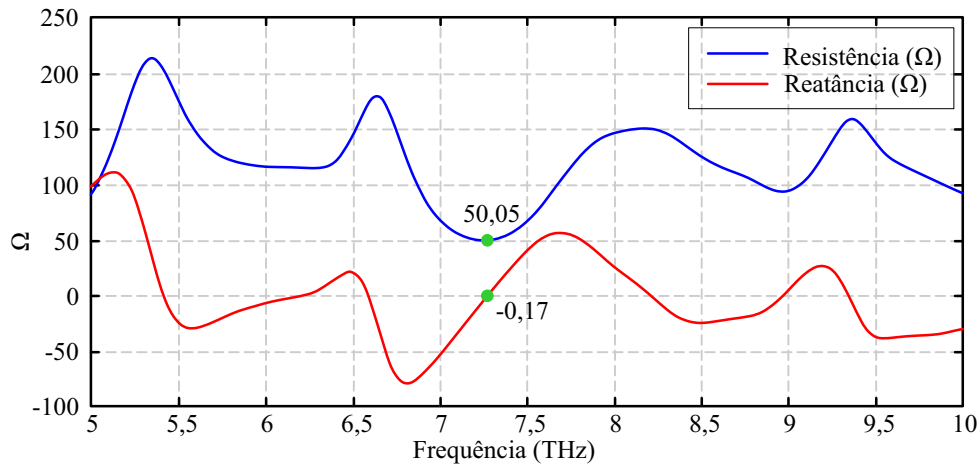


Tabela 6 – Valores de resultado do modelo MicroDRA (Autor 2022).

Frequência (THz)	Resistência ($Re\Omega$)	Reatância ($Im\Omega$)	S_{11} (dB)	Largura de banda (GHz)	Ganho (dB)
7.27	50.05	-0.17	-54.9501	350	5.9

Realizadas as simulações iniciais sem recobrimento por grafeno, partiu-se então para as análises com a antena sendo “dopada” com camada de grafeno recobrindo a componente responsável pela irradiação de sinal, nesta etapa observou-se e se levou em conta algumas limitações do equacionamento precedente do grafeno, sendo então considerado algumas predisposições como por exemplo: o potencial químico passando a ser uma constante fixa, mantendo-se o tempo de relaxação em 1 ps e modificando-se os valores de temperatura na formulação matemática, além de modificar a temperatura também no software Ansys HFSS, sendo valores pré-determinados em 273 K , 300 K e 373 K respectivamente.

Dessa forma a antena teve comportamento similar quando modificado o potencial químico do grafeno, em outras palavras, a variação de temperatura forneceu condições de contorno na camada de grafeno que fizeram esta operar como superfície seletora de frequência. A Figura 30 exemplifica os resultados de frequência obtidos. Como observado houve a modificação de como a antena ressoou, no entanto, sendo em pontos muito próximos e tais resultados foram obtidos através de simulação extensiva haja visto que os valores de frequência diferem-se entre si somente em 1 GHz de acordo como mostra a Tabela 7. Dessa forma os dois modelos de antena foram simulados e analisados, cada um com suas peculiaridades e resultados, chama-se atenção para o modo como a antena CDRA NoGraphene irradiou sinal através da superfície seletora de modos de resposta, assim como, a largura de banda obtida pelo modelo MicroDRA.

Na Tabela 8 são expostas algumas das características de ambos modelos e na Figura 31 e Figura 32 ambos modelos e proporções de irradiação de sinal.

Figura 30 – Valores de frequência em função da modificação de temperatura na simulação da camada de grafeno em conjunto com a simulação da antena (Autor 2022).

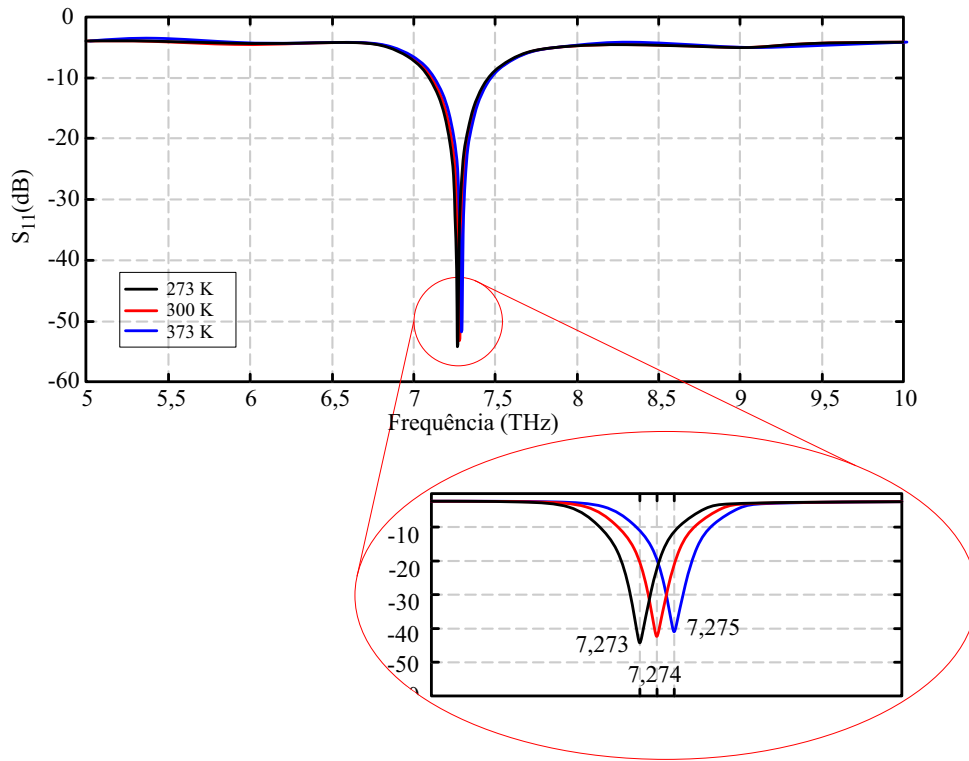


Tabela 7 – Resultados da MicroDRA em função da variação de temperatura do nano disco de grafeno (Autor 2022).

Temperatura (K)	Frequência (THz)	S_{11} (dB)	Resistência ($Re\Omega$)	Reatância ($Im\Omega$)
273	7.273	-43.4716	49.34	-0.05
300	7.274	-43.4977	49.13	-1.00
373	7.275	-41.5535	49.31	-0.65

Tabela 8 – Apanhado de características dos modelos de antena (Autor 2022).

Características	CDRA	MicroDRA
Dimensões máxima/mínima	60 μm /0,34 nm	45 μm / 0,34 nm
N° de Componentes do modelo	6	5
N° de protótipos simulados	7	4
Horas aproximadas de simulação	80 hs	50 hs
Memória ocupada	141 Gb	50 Gb
Principais Materiais	Si, Grafeno e Ag	Si, Grafeno e Ag
Diferencial	NMP e Disco de Grafeno	Disco de Grafeno

Figura 31 – Modelos de antena simulados neste trabalho, (a) CDRA No/Graphene e (b) MicroDRA, ambos com modelo de padrão de radiação e padrão de malha (Autor 2022).

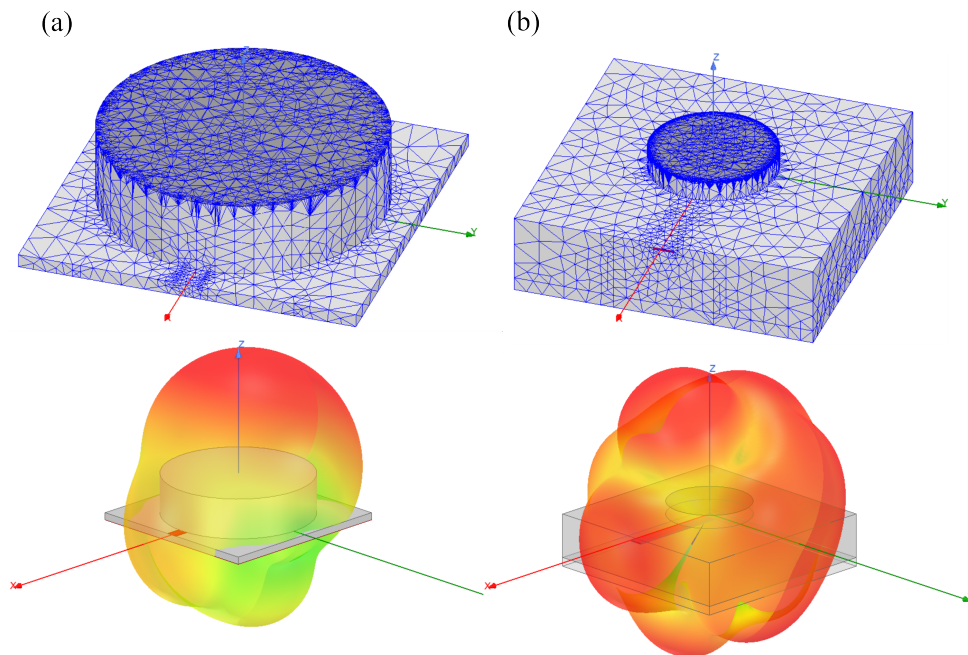
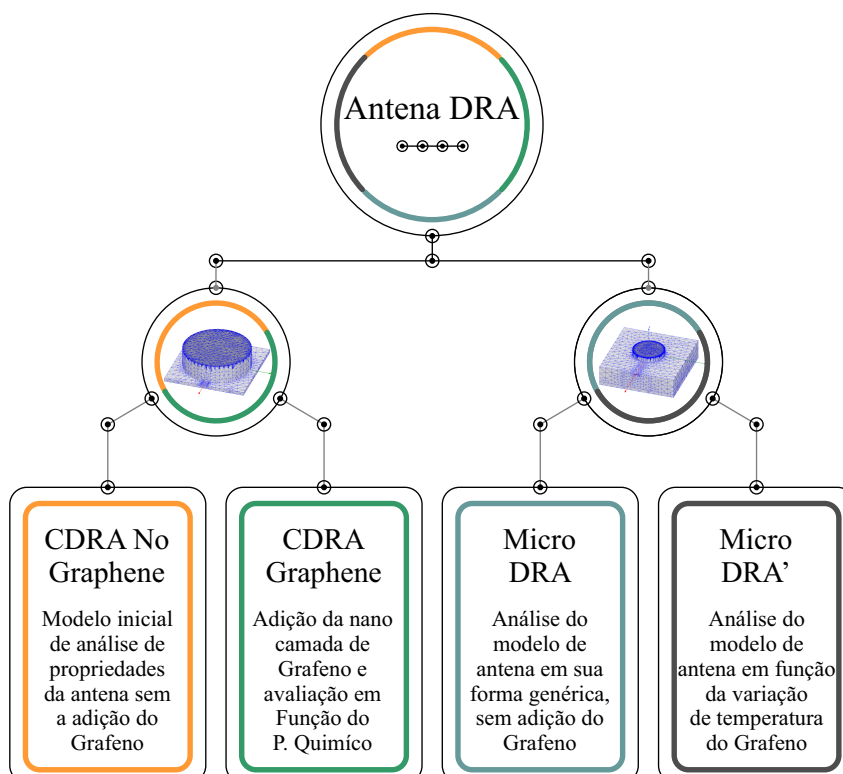


Figura 32 – Esquema dos modelos de antena simulados neste trabalho, (a) CDRA No/Graphene e (b) MicroDRA (Autor 2022).



6 CONSIDERAÇÕES FINAIS

6.1 Conclusões

Neste trabalho foram apresentadas variações para o modelo de antena proposto, primeiramente variando o potencial químico da camada de grafeno sobreposta ao ressoador dielétrico de Silício, a alimentação da antena foi parcialmente modificada através da utilização da estrutura *patch* de microfita não ressoante (NMP). Feita a adição da camada de grafeno através da implementação de equacionamento matemático e simulação numérica, o modelo com $0.1 \mu_c$ foi o qual obteve melhor perda de retorno, o de $0.9 \mu_c$ o qual obteve melhor largura de banda e novamente o modelo com $0.1 \mu_c$ o qual obteve melhor valor de ganho. A adição da camada de grafeno possibilitou a sintonização da antena para operação em diferentes pontos de ressonância conforme modificação do potencial químico, nas antenas que houve variação do potencial químico os resultados de ganho e largura de banda ficaram congruentes, assim como, gráficos de radiação e ganho, havendo uma inversão proporcional ao valor de potencial químico e ponto de ressonância, característica interessante encontrada para este modelo de antena. A estrutura MNP forneceu a condição de contorno adequada para que a antena aduzisse seus campos E e M em diferentes direções internamente no DR, abrindo novas possibilidades de aplicação e resultado.

Já o segundo modelo de antena simulado, assim como o primeiro teve suas características de radiação modificadas pelo material grafeno, tendo parâmetros de design relativamente menores em escala, obtendo valores de largura de banda muito superiores além de apresentar melhor perda de retorno, apenas apresentando baixa eficiência de radiação, dessa forma, dadas circunstâncias comparativas, o modelo MicroDRA apresentou melhores características em função dos parâmetros analisados.

6.2 Propostas Futuras

Como objetivos para trabalhos futuros, realizar uma análise mais aprofundada na forma como a estrutura NMP interage e opera como componente da antena e estudar os padrões de campo gerados ao introduzir tal estrutura. Implementar novos materiais como componentes nas antenas, principalmente Perovskitas do tipo Iodeto de Chumbo Metilamônio como material componente do substrato ou do ressoador dielétrico, dadas as características de fácil síntese e propriedades elétricas desse material.

REFERÊNCIAS

- AKYILDIZ, I. F.; JORNET, J. M.; HAN, C. Terahertz band: Next frontier for wireless communications. **Physical communication**, Elsevier, v. 12, p. 16–32, 2014. Citado 2 vezes nas páginas 19 e 21.
- AMANATIADIS, S. A.; KARAMANOS, T. D.; KANTARTZIS, N. V. Radiation efficiency enhancement of graphene thz antennas utilizing metamaterial substrates. **IEEE Antennas and Wireless Propagation Letters**, IEEE, v. 16, p. 2054–2057, 2017. Citado 2 vezes nas páginas 20 e 22.
- ANDREI, E. Y.; LI, G.; DU, X. Electronic properties of graphene: a perspective from scanning tunneling microscopy and magnetotransport. **Reports on Progress in Physics**, IOP Publishing, v. 75, n. 5, p. 056501, 2012. Citado na página 19.
- ANSYS. **HFSS 3D Electromagnetic Field Simulator for RF and Wireless Design**. 2022. Disponível em: <<https://www.ansys.com/products/electronics/ansys-hfss>>. Citado 3 vezes nas páginas 23, 50 e 52.
- ASTAKHOV, V. P. Mechanical properties of engineering materials: relevance in design and manufacturing. In: **Introduction to mechanical engineering**. [S.l.]: Springer, 2018. p. 3–41. Citado 2 vezes nas páginas 10 e 42.
- AVOURIS, P. Graphene: electronic and photonic properties and devices. **Nano letters**, ACS Publications, v. 10, n. 11, p. 4285–4294, 2010. Citado 3 vezes nas páginas 9, 35 e 37.
- BABURIN, A. S. et al. Silver-based plasmonics: golden material platform and application challenges. **Optical Materials Express**, Optica Publishing Group, v. 9, n. 2, p. 611–642, 2019. Citado 2 vezes nas páginas 12 e 43.
- BLEU, Y. et al. Review of graphene growth from a solid carbon source by pulsed laser deposition (pld). **Frontiers in chemistry**, Frontiers Media SA, v. 6, p. 572, 2018. Citado 2 vezes nas páginas 31 e 32.
- BOCK, J. et al. Mammalian stem cells reprogramming in response to terahertz radiation. **PloS one**, Public Library of Science San Francisco, USA, v. 5, n. 12, p. e15806, 2010. Citado na página 45.
- BROWNE, M. et al. Prediction of leaf water potential and relative water content using terahertz radiation spectroscopy. **Plant direct**, Wiley Online Library, v. 4, n. 4, p. e00197, 2020. Citado na página 46.
- CALLISTER, W. R. **Dg: ciência e engenharia de materiais: uma introdução**. 9. Ed. **Rio de Janeiro: LTC**, 2016. Citado 2 vezes nas páginas 10 e 41.
- CHATTOPADHYAY, G. Terahertz science, technology, and communication. In: **IEEE. 2012 5th International Conference on Computers and Devices for Communication (CODEC)**. [S.l.], 2012. p. 1–4. Citado na página 19.
- CHENG, X. et al. Circular beam-reconfigurable antenna base on graphene-metal hybrid. **Electronics letters**, Wiley Online Library, v. 52, n. 7, p. 494–496, 2016. Citado na página 21.

DAVIES, A.; LINFIELD, E. Molecular and organic interactions. In: **Terahertz Frequency Detection and Identification of Materials and Objects**. [S.l.]: Springer, 2007. p. 91–106. Citado na página 47.

DOVE, M. T.; DOVE, M. T. **Structure and dynamics: an atomic view of materials**. [S.l.]: Oxford University Press, 2003. v. 1. Citado 2 vezes nas páginas 9 e 35.

ENOKI, T.; ANDO, T. **Physics and chemistry of graphene: graphene to nanographene**. [S.l.]: CRC Press, 2019. Citado 2 vezes nas páginas 9 e 36.

ESSS. **Qual a importância do engenheiro na simulação computacional?** 2022. Disponível em: <<https://www.esss.co/blog/qual-a-importancia-do-engenheiro-na-simulacao-computacional/>>. Citado na página 69.

FERRARI, A. C. et al. Science and technology roadmap for graphene, related two-dimensional crystals, and hybrid systems. **Nanoscale**, Royal Society of Chemistry, v. 7, n. 11, p. 4598–4810, 2015. Citado na página 31.

FRADKIN, E. Critical behavior of disordered degenerate semiconductors. i. models, symmetries, and formalism. **Physical Review B**, APS, v. 33, n. 5, p. 3257, 1986. Citado na página 20.

GALATAGE, S. T. et al. Silver nanoparticles: properties, synthesis, characterization, applications and future trends. **Silver micro-nanoparticles-properties, synthesis, characterization, and applications**. London: IntechOpen, p. 61–80, 2021. Citado 2 vezes nas páginas 12 e 43.

GEIM, A. K.; NOVOSELOV, K. S. The rise of graphene. In: **Nanoscience and technology: a collection of reviews from nature journals**. [S.l.]: World Scientific, 2010. p. 11–19. Citado 4 vezes nas páginas 20, 31, 36 e 37.

GIANCHANDANI, Y. B.; TABATA, O.; ZAPPE, H. P. **Comprehensive microsystems**. [S.l.]: Elsevier Amsterdam, 2008. v. 1. Citado na página 40.

GONÇALVES, P. A. D.; PERES, N. M. **An introduction to graphene plasmonics**. [S.l.]: World Scientific, 2016. Citado 3 vezes nas páginas 9, 36 e 37.

GROSSO, G.; PARRAVICINI, G. Chapter 2-geometrical description of crystals: Direct and reciprocal lattices. **Solid state physics**, p. 67–105, 2014. Citado na página 33.

GUHA, D. et al. Higher order mode excitation for high-gain broadside radiation from cylindrical dielectric resonator antennas. **IEEE Transactions on Antennas and Propagation**, IEEE, v. 60, n. 1, p. 71–77, 2011. Citado na página 49.

HANSON, G. W. Dyadic green's functions and guided surface waves for a surface conductivity model of graphene. **Journal of Applied Physics**, American Institute of Physics, v. 103, n. 6, p. 064302, 2008. Citado na página 38.

HIPPEL, A. R. V.; MORGAN, S. Dielectric materials and applications. **Journal of The Electrochemical Society**, IOP Publishing, v. 102, n. 3, p. 68Ca, 1955. Citado 2 vezes nas páginas 41 e 42.

- HOSSEININEJAD, S. E. et al. Terahertz dielectric resonator antenna coupled to graphene plasmonic dipole. *IET*, 2018. Citado na página 21.
- HU, B. B.; NUSS, M. C. Imaging with terahertz waves. **Optics letters**, Optica Publishing Group, v. 20, n. 16, p. 1716–1718, 1995. Citado na página 47.
- HUANG, L. et al. Studies on qualitative and quantitative detection of trehalose purity by terahertz spectroscopy. **Food Science & Nutrition**, Wiley Online Library, v. 8, n. 4, p. 1828–1836, 2020. Citado na página 46.
- JORNET, J. M.; AKYILDIZ, I. F. Graphene-based plasmonic nano-antenna for terahertz band communication in nanonetworks. **IEEE Journal on selected areas in communications**, IEEE, v. 31, n. 12, p. 685–694, 2013. Citado na página 19.
- JUANG, Z.-Y. et al. Graphene synthesis by chemical vapor deposition and transfer by a roll-to-roll process. **Carbon**, Elsevier, v. 48, n. 11, p. 3169–3174, 2010. Citado 2 vezes nas páginas 38 e 39.
- KAJFEZ, D.; GUILLON, P. Dielectric resonators. **Norwood**, 1986. Citado 3 vezes nas páginas 9, 26 e 27.
- KARABOYTCHEVA, M. K. Effects of 5g wireless communication on human health. EPRS: European Parliamentary Research Service, 2020. Citado 2 vezes nas páginas 10 e 45.
- KAZEMI, F. Dual band compact fractal thz antenna based on crlh-tl and graphene loads. **Optik**, Elsevier, v. 206, p. 164369, 2020. Citado 2 vezes nas páginas 20 e 22.
- KHALIDUZZAMAN, A. et al. A nondestructive eggshell thickness measurement technique using terahertz waves. **Scientific reports**, Nature Publishing Group, v. 10, n. 1, p. 1–5, 2020. Citado na página 46.
- LANDAU, L. D. Zur theorie der phasenumwandlungen ii. **Phys. Z. Sowjetunion**, v. 11, n. 545, p. 26–35, 1937. Citado na página 21.
- LI, C.-H.; CHIU, T.-Y. 340-ghz low-cost and high-gain on-chip higher order mode dielectric resonator antenna for thz applications. **IEEE Transactions on Terahertz Science and Technology**, IEEE, v. 7, n. 3, p. 284–294, 2017. Citado na página 22.
- LIN, C.; LI, G. Y. Indoor terahertz communications: How many antenna arrays are needed? **IEEE Transactions on Wireless Communications**, IEEE, v. 14, n. 6, p. 3097–3107, 2015. Citado na página 21.
- LIU, Z.; ZHOU, X. **Graphene: energy storage and conversion applications**. [S.l.]: CRC Press, 2014. Citado na página 21.
- LONG, S.; MCALLISTER, M.; SHEN, L. The resonant cylindrical dielectric cavity antenna. **IEEE Transactions on Antennas and Propagation**, IEEE, v. 31, n. 3, p. 406–412, 1983. Citado na página 25.
- LUK, K. M. Dielectric resonator antennas. **Research Studies Pr.**, 2003. Citado 9 vezes nas páginas 9, 25, 26, 27, 28, 29, 30, 48 e 49.

- MARTINEZ-VEGA, J. **Dielectric materials for electrical engineering**. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2013. Citado 2 vezes nas páginas 41 e 42.
- MATLAB. **MatLab MATrix LABoratory R2020a**. 2022. Disponível em: <<https://www.mathworks.com/products/matlab/student.html>>. Citado na página 49.
- MICHALSKI, K. A.; ZHENG, D. Analysis of microstrip resonators of arbitrary shape. **IEEE transactions on microwave theory and techniques**, IEEE, v. 40, n. 1, p. 112–119, 1992. Citado na página 49.
- MIKHAIL, I. Katsnelson. graphene: carbon in two dimensions. **Materials Today**, v. 10, n. 1-2, p. 20–27, 2007. Citado 3 vezes nas páginas 9, 32 e 33.
- MIKHAILOV, S. A.; ZIEGLER, K. New electromagnetic mode in graphene. **Physical review letters**, APS, v. 99, n. 1, p. 016803, 2007. Citado 2 vezes nas páginas 37 e 38.
- MILOVANOVIĆ, S.; PEETERS, F. M. Strained graphene structures: From valleytronics to pressure sensing. In: **Nanostructured Materials for the Detection of CBRN**. [S.l.]: Springer, 2018. p. 3–17. Citado 2 vezes nas páginas 9 e 34.
- MONGIA, R. K.; ITTIPIBOON, A. Theoretical and experimental investigations on rectangular dielectric resonator antennas. **IEEE Transactions on antennas and propagation**, IEEE, v. 45, n. 9, p. 1348–1356, 1997. Citado 2 vezes nas páginas 30 e 48.
- MOURAS, S. et al. Synthesis of first stage graphite intercalation compounds with fluorides. **Revue de chimie minérale**, v. 24, n. 5, p. 572–582, 1987. Citado na página 20.
- NAYFEH, M. H. Fundamentals and applications of nano silicon in plasmonics and fullerenes: current and future trends. Elsevier, 2018. Citado 3 vezes nas páginas 9, 40 e 41.
- NETO, A. C. et al. The electronic properties of graphene. **Reviews of modern physics**, APS, v. 81, n. 1, p. 109, 2009. Citado 2 vezes nas páginas 9 e 36.
- NOVIN, S. N. et al. Field enhancement in metamaterial split ring resonator aperture nano-antenna with spherical nano-particle arrangement. **Silicon**, Springer, v. 11, n. 1, p. 293–300, 2019. Citado 2 vezes nas páginas 20 e 22.
- NOVOSELOV, K. S. et al. Electric field effect in atomically thin carbon films. **science**, American Association for the Advancement of Science, v. 306, n. 5696, p. 666–669, 2004. Citado 2 vezes nas páginas 20 e 21.
- NOVOSELOV, K. S. et al. Two-dimensional gas of massless dirac fermions in graphene. **nature**, Nature Publishing Group, v. 438, n. 7065, p. 197–200, 2005. Citado na página 21.
- OXTOBY, D. W.; GILLIS, H. P.; BUTLER, L. J. **Principles of modern chemistry**. [S.l.]: Cengage learning, 2015. Citado 4 vezes nas páginas 9, 32, 33 e 40.
- PEIERLS, R. Quelques propriétés typiques des corps solides. In: **Annales de l'institut Henri Poincaré**. [S.l.: s.n.], 1935. v. 5, n. 3, p. 177–222. Citado na página 21.
- PETOSA, A. **Dielectric resonator antenna handbook**. [S.l.]: Artech, 2007. Citado 5 vezes nas páginas 27, 29, 30, 48 e 49.

RANA, B.; PARUI, S. Nonresonant microstrip patch-fed dielectric resonator antenna array. **IEEE Antennas and Wireless Propagation Letters**, IEEE, v. 14, p. 747–750, 2014. Citado na página 49.

RICHTMYER, R. Dielectric resonators. **Journal of applied physics**, American Institute of Physics, v. 10, n. 6, p. 391–398, 1939. Citado 5 vezes nas páginas 25, 26, 27, 30 e 48.

RUDRAPATI, R. Graphene: Fabrication methods, properties, and applications in modern industries. **Graphene Production and Application**, IntechOpen Rijeka, Croatia, p. 9–22, 2020. Citado na página 39.

SAEED, M. et al. Chemical vapour deposition of graphene—synthesis, characterisation, and applications: A review. **Molecules**, MDPI, v. 25, n. 17, p. 3856, 2020. Citado na página 39.

SAMANTA, G.; MITRA, D. Wideband thz antenna using graphene based tunable circular reactive impedance substrate. **Optik**, Elsevier, v. 158, p. 1080–1087, 2018. Citado 2 vezes nas páginas 20 e 22.

SEYEDSHARBATY, M. M.; SADEGHZADEH, R. A. Antenna gain enhancement by using metamaterial radome at thz band with reconfigurable characteristics based on graphene load. **Optical and Quantum Electronics**, Springer, v. 49, n. 6, p. 1–13, 2017. Citado 2 vezes nas páginas 20 e 22.

SHAFRANIUK, S. **Graphene: Fundamentals, Devices, and Applications**. [S.l.]: CRC Press, 2015. Citado 2 vezes nas páginas 9 e 33.

SHARMA, T. et al. Obtaining the tunable band-notch in ultrawideband thz antenna using graphene nanoribbons. **Optical Engineering**, SPIE, v. 59, n. 4, p. 047103, 2020. Citado 2 vezes nas páginas 20 e 22.

SIEGEL, P. H. Terahertz technology. **IEEE Transactions on microwave theory and techniques**, IEEE, v. 50, n. 3, p. 910–928, 2002. Citado na página 19.

SIEGEL, P. H. Terahertz technology in biology and medicine. **IEEE transactions on microwave theory and techniques**, IEEE, v. 52, n. 10, p. 2438–2447, 2004. Citado na página 22.

SINGHWAL, S. S. et al. Application of dielectric resonator antenna in implantable medical devices. In: IEEE. **2021 IEEE International Symposium on Antennas and Propagation and USNC-URSI Radio Science Meeting (APS/URSI)**. [S.l.], 2021. p. 80–81. Citado na página 22.

SINGHWAL, S. S. et al. A study on application of dielectric resonator antenna in implantable medical devices. **IEEE Access**, IEEE, v. 10, p. 11846–11857, 2022. Citado na página 19.

SOUSA, F. M. et al. Graphene patch antenna with lateral edges defined by armchair or zigzag structures and pbg substrate. **Journal of Computational Electronics**, Springer, v. 19, n. 2, p. 700–708, 2020. Citado na página 20.

STUTZMAN, W. L.; THIELE, G. A. **Antenna theory and design**. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2012. Citado 2 vezes nas páginas 48 e 49.

- TAI, L. et al. Direct growth of graphene on silicon by metal-free chemical vapor deposition. **Nano-micro letters**, Springer, v. 10, n. 2, p. 1–9, 2018. Citado na página 39.
- TIWARI, S. K. et al. Graphene research and their outputs: Status and prospect. **Journal of Science: Advanced Materials and Devices**, Elsevier, v. 5, n. 1, p. 10–29, 2020. Citado 2 vezes nas páginas 31 e 32.
- VARSHNEY, G. Tunable terahertz dielectric resonator antenna. **Silicon**, Springer, v. 13, n. 6, p. 1907–1915, 2021. Citado na página 48.
- VARSHNEY, G. et al. Obtaining the circular polarization in a nano-dielectric resonator antenna for photonics applications. **Semiconductor Science and Technology**, IOP Publishing, v. 34, n. 7, p. 07LT01, 2019. Citado na página 22.
- VIEIRA, J. M. Estudo de antenas dielétricas ressoadoras para nanossatélites. Universidade Federal do Pampa, 2019. Citado 2 vezes nas páginas 9 e 26.
- WALKER, C. K.; KULESA, C. A. Terahertz astronomy from the coldest place on earth. In: IEEE. **2005 Joint 30th International Conference on Infrared and Millimeter Waves and 13th International Conference on Terahertz Electronics**. [S.l.], 2005. v. 1, p. 3–4. Citado na página 47.
- WALLACE, P. R. The band theory of graphite. **Physical review**, APS, v. 71, n. 9, p. 622, 1947. Citado na página 20.
- WANG, K. Laser based fabrication of graphene. **Advances in Graphene Science**, IntechOpen London, UK, v. 5772, p. 55821, 2013. Citado na página 39.
- WILSON, J. N. et al. Dielectric and ferroic properties of metal halide perovskites. **APL Materials**, AIP Publishing LLC, v. 7, n. 1, p. 010901, 2019. Citado na página 19.
- WONG, H.-S. P.; AKINWANDE, D. **Carbon nanotube and graphene device physics**. [S.l.]: Cambridge University Press, 2011. Citado 2 vezes nas páginas 9 e 34.
- WU, Y. et al. Graphene electronics: Materials, devices, and circuits. **Proceedings of the IEEE**, IEEE, v. 101, n. 7, p. 1620–1637, 2013. Citado na página 34.
- XIE, L.; YAO, Y.; YING, Y. The application of terahertz spectroscopy to protein detection: a review. **Applied Spectroscopy Reviews**, Taylor & Francis, v. 49, n. 6, p. 448–461, 2014. Citado na página 46.
- YADUVANSHI, R. S. et al. Conical dielectric resonator antenna for terahertz applications. **Frequenz**, De Gruyter, v. 75, n. 5-6, p. 211–220, 2021. Citado 3 vezes nas páginas 22, 30 e 48.
- ZAIDI, B.; BELGHIT, S. **Silicon Materials**. [S.l.]: BoD–Books on Demand, 2019. Citado 2 vezes nas páginas 40 e 41.
- ZARRABI, F. B. et al. Wide band yagi antenna for terahertz application with graphene control. **Optik**, Elsevier, v. 140, p. 866–872, 2017. Citado 2 vezes nas páginas 20 e 22.
- ZHANG, B. et al. Rectangular dielectric resonator antennas with a thin graphene film. In: IEEE. **2017 International Symposium on Antennas and Propagation (ISAP)**. [S.l.], 2017. p. 1–2. Citado na página 21.

ZHANG, J. et al. Identification of bacterial blight resistant rice seeds using terahertz imaging and hyperspectral imaging combined with convolutional neural network. **Frontiers in Plant Science**, Frontiers Media SA, v. 11, p. 821, 2020. Citado na página 46.

ZHANG, Y. et al. Experimental observation of the quantum hall effect and berry's phase in graphene. **nature**, Nature Publishing Group, v. 438, n. 7065, p. 201–204, 2005. Citado na página 21.

ZOU, L. **Dielectric resonator antennas: from multifunction microwave devices to optical nano-antennas**. Tese (Doutorado), 2013. Citado 3 vezes nas páginas 9, 28 e 30.

Apêndices

APÊNDICE A – IMAGENS ADICIONAIS

Figura 33 – Modelo de malha e exemplificação de estrutura responsável por mudança de modos EM nos modelos de antenna (Autor 2022).

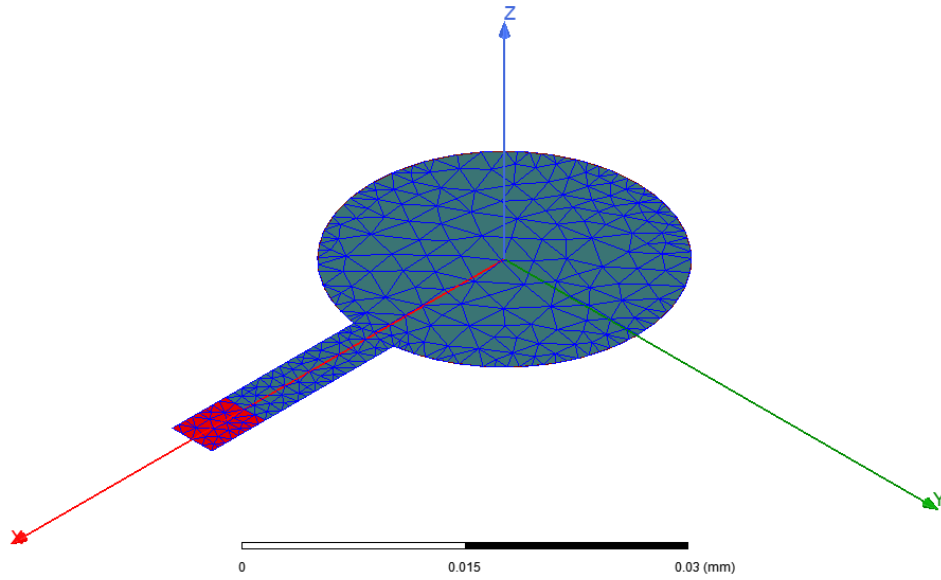
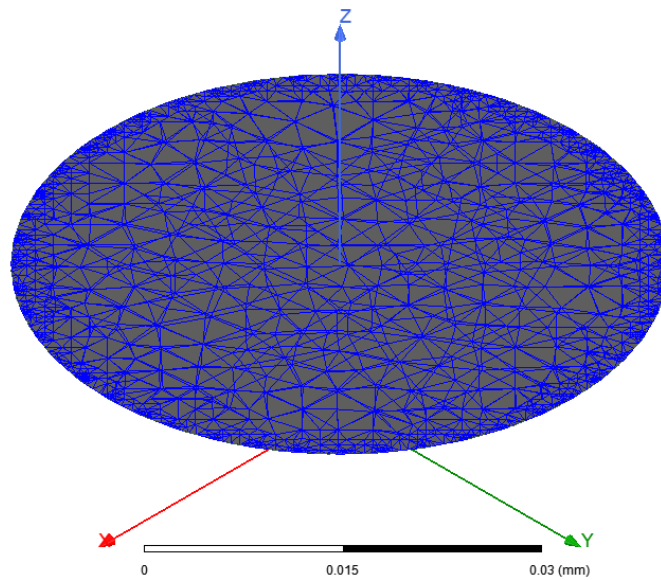


Figura 34 – Nanodisco/camada/carregamento de Grafeno, estrutura responsável por operar como seletor de frequência (Autor 2022).



APÊNDICE B – SIMULAÇÃO EM FOCO

A simulação computacional é uma tecnologia que transformou a indústria, graças à qual engenheiros e especialistas podem trabalhar com protótipos digitais para o desenvolvimento de novos produtos, projetos, processos e entender, entre outras coisas, o comportamento dos materiais. A simulação e a modelagem, em geral, são atividades muito importantes e necessárias nas engenharias, pois permitem maior flexibilidade de alterações sem a necessidade de parada de sistemas operantes, além de fornecer visualização de detalhes e previsão de resultados, reduzindo custos e agilizando projetos, além da opção de observar fenômenos e situações com ampla exatidão e maior ênfase em detalhes seletivos.

Produzir e executar um determinado experimento, repetidas vezes, pode ser inviável pelo ponto de vista econômico ou devido às dimensões dos elementos envolvidos. No entanto, através da CAE (*Computer Aided Engineering*) essa tarefa se torna corriqueira e de simples implemento, trazendo mais segurança e melhores resultados em qualquer que seja o campo de aplicação, não sendo diferente na Ciência e Engenharia de Materiais. (ESSS, 2022)

APÊNDICE C – CAUSA E EFEITO PARA UMA BOA SIMULAÇÃO

Figura 35 – Diagrama de Ishikawa para simulação neste trabalho (Autor 2022).

