



Universidade federal do Pará

Instituto de Tecnologia

Programa de Pós-Graduação em Engenharia Elétrica

**Implementação do Phagrafeno no Patch de uma antena de  
Microfita**

Darlan Holanda Cardoso

DM: 28/2023

UFPA / ITEC / PPGEE

Campus Universitário do Guamá

Belém-Pará-Brasil

2023



Universidade federal do Pará

Instituto de Tecnologia

Programa de Pós-Graduação em Engenharia Elétrica

Darlan Holanda Cardoso

## **Implementação do Phagrafeno no Patch de uma antena de Microfita**

Dissertação de mestrado submetida à Banca Examinadora do Programa de Pós-Graduação Em Engenharia Elétrica da UFPA para a obtenção do grau de Mestre em Engenharia elétrica na área de Telecomunicações

UFPA / ITEC / PPGEE

Campus Universitário do Guamá

Belém-Pará-Brasil

2023

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP) de acordo com ISBDSistema de Bibliotecas da Universidade Federal do Pará

Gerada automaticamente pelo módulo Ficat, mediante os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

---

H722i Holanda Cardoso, Darlan.  
Implementação do Phagrafeno no Patch de uma antena de Microfita / Darlan Holanda Cardoso. — 2023.  
67 f. : il. color.

Orientador(a): Prof. Dr. Jordan Del Nero  
Coorientação: Prof<sup>ª</sup>. Dra. Shirsley Joany dos Santos da Silva  
Dissertação (Mestrado) - Universidade Federal do Pará,  
Instituto de Tecnologia, Programa de Pós-Graduação em  
Engenharia Elétrica, Belém, 2023.

1. Propriedades Ópticas. 2. Phagrafeno. 3. Atena de Microfita. 4. Patch. I. Título.

CDD 537

---

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

**“IMPLEMENTAÇÃO DE PHAGRAFENO NO PATCH DE UMA ANTENA DE MICROFITA”**

**AUTOR: DARLAN HOLANDA CARDOSO**

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

APROVADA EM: 25/08/2023

**BANCA EXAMINADORA:**

Documento assinado digitalmente  
 **JORDAN DEL NERO**  
Data: 25/08/2023 16:58:04-0300  
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

---

**Prof. Dr. Jordan Del Nero**  
(Orientador – PPGEE/UFPA)

Documento assinado digitalmente  
 **SHIRSLEY JOANY DOS SANTOS DA SILVA**  
Data: 28/08/2023 11:26:53-0300  
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

---

**Prof.<sup>a</sup> Dr.<sup>a</sup> Shirsley Joany dos Santos Silva**  
(Coorientadora – CAMPUS ANANINDEUA/UFPA)

Documento assinado digitalmente  
 **MIERCIO CARDOSO DE ALCANTARA NETO**  
Data: 28/08/2023 23:27:39-0300  
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

---

**Prof. Dr. Miércio Cardoso de Alcântara Neto**  
(Avaliador Interno – PPGEE/UFPA)

Documento assinado digitalmente  
 **CARLOS ALBERTO BRITO DA SILVA JUNIOR**  
Data: 27/08/2023 12:29:55-0300  
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

---

**Prof. Dr. Carlos Alberto Brito da Silva Júnior**  
(Avaliador Externo ao Programa – CAMPUS ANANINDEUA/UFPA)

**VISTO:**

---

**Prof. Dr. Diego Lisboa Cardoso**  
(Coordenador do PPGEE/ITEC/UFPA)

## **Agradecimento**

Primeiramente agradecer a Deus, pois foi ele quem me deu sabedoria, saúde e perseverança para realizar meu sonho.

Aos meus pais, Antonio Carlos Cardoso e em especial a minha mãe, Antonia Maria Holanda Cardoso. Estes que me ensinaram valores humanos como honestidade, respeito, foco e deram todo o seu melhor para que eu pudesse realizar meu sonho, no qual é muito gratificante, pois também era o sonho deles, muito obrigado! amo vocês. A todos os meus familiares, em especial a minha prima Betânia Holanda e minha irmã Faelly Holanda, que contribuíram direta e indiretamente para minha formação.

Aos colegas de trabalho, em especial a Igor Miranda (Técnico do Laboratório de Física – UFPA, Campus Ananindeua), Lucas Pessoa e Jonas Duarte, com a parceria de vocês pude chegar até o fim, pois vocês me deram muito incentivo, dividindo seus conhecimentos acadêmicos. Quero agradecer meu querido professor Sebastião Rodrigues, pelos seus incentivos.

Também dedico esse trabalho para minha vó, Lucimar Ferreira Holanda, eu amo você eternamente! Sei que você intercedeu e está intervendo pelos meus sonhos e meus trabalhos com suas orações.

Aos professores da faculdade de Física - UFPA, Campus Ananindeua, em especial o Prof. Dr. Carlos Alberto, que acompanhou parte de trabalho e contribuiu com sua experiência. Quero Agradecer meu compadre Junior Lima, pela sua ajuda com os desines das imagens.

A professora Dr.<sup>a</sup> Shirsley Santos, coorientadora desta dissertação. Sua postura, determinação é admirável e inspirador! Você é um exemplo para mim. A forma que vem desenvolvendo o seu trabalho é algo que surpreende qualquer pessoa. Ao Prof. Dr. Jordan Del Nero, pela oportunidade de trabalhar em seu grupo e suas orientações acadêmicas.

Agradecer a Universidade Federal do Pará – UFPA, o Programa de Pós-graduação em Física, e de Engenharia elétrica, por ser instituições de ensino de qualidade e a CAPES pelo fomento.

## Resumo

Esta pesquisa corresponde à implementação do Phagrafeno no *Patch* de uma antena de microfita, a partir das perspectivas analisadas de uma antena microfita de grafeno. O Phagrafeno, é um novo alótropo de carbono e sua estrutura distorce os cones de Dirac, tendo características de ligação e densidade de empacotamento compatíveis com a do grafeno. Neste trabalho, o simulador usado é o software COMSOL multifysics, onde ele realiza modelagem multifísica, no qual para implementar o Phagrafeno na biblioteca do programa, é necessário ter as propriedades ópticas, como: condutividade elétrica, permissividade relativa e permeabilidade relativa. Usou-se o pacote SIESTA, para otimização da geometria e determinação das propriedades ópticas a partir da célula unitária do Phagrafeno. Os resultados obtidos do Phagrafeno, comparados com grafeno, expõem que propriedades eletrônicas e magnéticas se tornam úteis para o designer de antenas microfita. Dessa forma, foi simulado duas antenas de microfita: uma com o *Patch* feito de Phagrafeno e a outra de grafeno. O objetivo era fazer um termo comparativo entre elas e assegurar que o Phagrafeno é mais estável numa largura de banda em THz. Como os resultados obtidos (Perda de retorno, Impedância, *Voltage Standing Wave Ratio* (VSWR) e diagrama de radiação de ganho) da antena de Phagrafeno foram satisfatórios, foi realizado mais três simulações, variando seu *designer*: (i) uma com estruturas periódicas, com furos de ar (Antena PBG), (ii) outra com a adição de duas *Nanofitas* de Phagrafeno nas bordas do *Patch* da antena (Antena Nano), e por fim, a última antena projetada (iii), a junção das antenas (i) e (ii) chamada de (Antena PBG+Nano). Portanto o uso dessas variações exibiu bons resultados na faixa de frequência em THz por obter resultados bons, abrindo um leque de aplicabilidade na área de telecomunicações.

**Palavras-chave:** Propriedades Ópticas, Phagrafeno, Antena de Microfita, Patch

## Abstract

This research corresponds to the implementation of Phagraphene in the Patch of a microstrip antenna, from the perspectives analyzed of a graphene microstrip antenna. Phagraphene is a new allotrope of carbon and its structure distorts the Dirac cones, having binding characteristics and packing density compatible with that of graphene. In this work, the simulator used is the COMSOL multifysics software, where it performs multiphysics modeling, in which to implement Phagraphene in the program library, it is necessary to have the optical properties, such as: electrical conductivity, relative permittivity and relative permeability. The SIESTA package was used to optimize the geometry and determine the optical properties from the Phagraphene unit cell. The results obtained from Phagraphene, compared with graphene, show that electronic and magnetic properties become useful for the microstrip antenna designer. In this way, two microstrip antennas were simulated: one with the patch made of Phagraphene and the other of graphene. In this way, two microstrip antennas were simulated: one with patch made of Phagraphene and another of graphene. The aim was to make a comparative term between them and ensure that Phagraphene is more stable in a THz band width. As the results obtained (of Return Loss, Impedance, VSWR and gain radiation diagram) of the Phagraphene antenna were satisfactory, three more simulations were carried out, varying their designer: (i) one with periodic structures, one with air holes (PBG Antenna), (ii) another with the addition of two Phagraphene Nanoribbons on the edges of the antenna patch (Nano Antenna), and finally, the last projected antenna (iii), the junction of the antennas (i) and (ii) called (PBG+Nano Antenna). Therefore, the use of these variations proved to be interesting for applications in this frequency range, as they obtained good results, opening up a range of applicability.

**Keywords:** Optical Properties, Phagraphene, Microstrip Antenna, Patch

## Lista de ilustrações

<b>Figura 1.1</b> – Primeiro modelo da Antena retangular de Microfita [11]. .....	14
<b>Figura 2.1</b> – a) Diagrama de Radiação de campo elétrico normalizado em 3-D, onde campo elétrico está sendo projetado na direção z, tendo três componentes ( $E_r, E_\phi, E_\theta$ ). b) Diagrama de Radiação de campo elétrico normalizado em 2-D, onde o loop do plano varia de 0° a 90°[26]. .....	20
<b>Figura 2.2</b> – Exemplo de coeficiente de reflexão ( $S_{11}$ ) [6], linha na cor azul: A Largura de banda ( $BW$ ) é avaliada em -10 dB sinalizada com a linha tracejada na cor vermelha, pois coeficientes de reflexão menores que esse valor, significa que a antena entrega aproximadamente 90% da sua potência.....	21
<b>Figura 2.3</b> – Antena de microfita. ....	25
<b>Figura 3.1</b> – Rede cristalina, estrutura de banda e densidade de estado com DFT/LDA/PBE/SZP. a) PHA b) GRA .....	28
<b>Figura 3.2</b> – Parte real (painel superior) e parte imaginária (painel inferior) da Permissividade relativa do PHA e do GRA.....	30
<b>Figura 3.3</b> – Parte real (painel superior) e parte imaginária (painel inferior) da Permeabilidade relativa do PHA e do GRA.....	31
<b>Figura 3.4</b> – Parte real (painel superior) e parte imaginária (painel inferior) da Condutividade Elétrica do PHA e do GRA. ....	31
<b>Figura 4.1</b> – Exemplos de cristais Fotônicos a) Uma dimensão (1-D), O azul claro e o escuro, diferem os tipos de materiais com suas diferentes constantes dielétrica, b) duas dimensões (2-D) e c) Três dimensões (3-D). .....	33
<b>Figura 4.2</b> – Célula Unitária [46]. .....	34
<b>Figura 4.3</b> – Photonic Band Gaps a) Parcial; b) Completo [46]. .....	35
<b>Figura 5.1</b> – Designer da antena: <i>Patch</i> da antena com o material PHA onde o círculo em amarelo formado por uma rede de anéis caracteriza o PHA depositado no substrato. ....	37
<b>Figura 5.2</b> – Coeficiente de Reflexão( $S_{11}$ ) das antenas de GRA e PHA: As linhas lilás e verde destacam o valor de coeficiente de reflexão, enquanto a linha amarela, é a delimitação empregada pela literatura para a largura de Banda em -10 dB. ....	38
<b>Figura 5.3</b> – Análise dos resultados é feita para os valores próximos de 1.0 de VSWR na faixa de frequência de 3.27 THz: Para o GRA é 1.24 VSWR e para o PHA 1.04 VSWR, como observado no <i>insert</i> da figura. ....	39

<b>Figura 5.4</b> – a) Resultado da Simulação do ganho Plano E, linha cor vermelha indica os resultados da antena PHA, a cor preta é referente a antena GRA. b) Resultado da simulação do ganho Plano H, a de cor azul indica antena PHA e a de cor laranja indica antena GRA. ....	<b>40</b>
<b>Figura 5.5</b> – Impedância $\Omega$ da antena exibindo sua parte real e a imaginária das antenas: O <i>insert</i> superior evidencia que para 3.27 THz as impedâncias reais do (PHA) e (GRA) estão próximas de 50 $\Omega$ . O <i>insert</i> inferior evidencia que para 3.27 THz a impedância mais próxima de 0 $\Omega$ e a do Phagrafeno parte imaginária, linha de cor verde. ....	<b>41</b>
<b>Figura 5.6</b> – Designes das variações das antenas. a) modelo da antena PBG, b) modela da antena Nano, c) Estrura da Nanofita <i>Ziguezague</i> , ou seja, propriedade condutora tipo metálica usada nas simulações que teve o corte na rede cristalina na direção x e largura de 7 Å. ....	<b>42</b>
<b>Figura 5.7</b> – a) Design da Antena de Phagrafeno (Antena PHA), b) Antena de Phagrafeno com estrutura periódica (Antena PBG), c) Antena de Phagrafeno com <i>Nanofitas</i> (Antena Nano), e d) Antena de Phagrafeno com estrutura periódica e <i>Nanofitas</i> (Antena PBG+Nano). ....	<b>43</b>
<b>Figura 5.8</b> – Resultado do Coeficiente de Reflexão, apresentando as frequências ressoantes da Antena PHA, Antena PBG, Antena Nano e Antena PBG+Nano. As linhas tracejadas coloridas destacam o valor de coeficiente de reflexão ( $S_{11}$ ) de cada antena. ....	<b>43</b>
<b>Figura 5.9</b> – Resultado da Impedância Parte Real. O gráfico mostra a impedância de cada antena e é analisado em suas respectivas frequências centrais. 50 $\Omega$ é valor que de acordo com a literatura significa uma impedância perfeita. ....	<b>44</b>
<b>Figura 5.10</b> – Resultado Impedância Parte Imaginária. Lembrando que 0 $\Omega$ é a amplitude apresentada pela literatura para uma antena perfeita. ....	<b>45</b>
<b>Figura 5.13</b> – Resultado da Simulação do VSWR. O gráfico mostra os de valores de VSWR de cada antena, onde é analisado em suas respectivas frequências ressoantes. As antenas possuem os seguintes valores: A antena PHA 1.04, Antena PBG 1.11, Antena Nano 1.16 e a Antena PBG+Nano 1.24. ....	<b>45</b>
<b>Figura 5.14</b> – a) Ganho Plano-E, b) Ganho Plano-H. A linha cor Cinza indica os resultados da antena (PHA), a vermelha é referente a antena (PBG), a de cor azul é sobre antena (Nano) e a de cor verde é da antena (PBG+Nano). ....	<b>47</b>
<b>Figura 2.1</b> – Construção da zona de Brillouin (Anexo 2). ....	<b>63</b>
<b>Figura 3.1</b> – Estrutura de Banda Sílica [6] (Anexo 3). ....	<b>66</b>
<b>Figura 3.2</b> – Mapa de Gap da estrutura Sílica [6] (Anexo 3). ....	<b>67</b>

## Sumário

<b>1. Introdução.....</b>	<b>12</b>
1.1 Estado da Arte.....	14
1.2 Objetivos .....	16
1.3 Organização do Trabalho .....	17
<b>2. Teoria de Antenas .....</b>	<b>18</b>
2.1 Introdução .....	18
2.2 Parâmetros de análise de antenas .....	18
2.2.1 Coeficiente de reflexão.....	18
2.2.2 Impedância de entrada ( $Z_{in}$ ) .....	19
2.2.3 Diagrama de Radiação .....	19
2.2.4 Largura de banda.....	20
2.2.5 Eficiência ( $e$ ).....	21
2.2.6 Ganho .....	21
2.3 Antenas de Microfita .....	22
2.3.1 Design de antenas de microfita .....	23
2.4 Considerações Finais do Capítulo.....	25
<b>3. PhagraFeno, o novo material 2-D .....</b>	<b>26</b>
3.1 Introdução .....	26
3.2 Modelo e Método.....	27
3.3 Resultados de Caracterização Óptica Eletrônica Do PhagraFeno .....	30
3.4 Considerações finais do capítulo .....	32
<b>4. Cristais Fotônicos.....</b>	<b>33</b>
4.1 Introdução .....	33
4.1.1 Teoria eletromagnética.....	34
4.2 Descrição Matemática.....	34
4.2.1 Célula Unitária .....	34
4.2.2 Vetores de Rede .....	35
4.2.3 Photonic Band Gaps .....	35
4.3 Considerações finais .....	36
<b>5. Simulações e resultados .....</b>	<b>37</b>
5.1 Resultados da Antena de Grafeno e PhagraFeno.....	38
5.2 Resultados das Variações da antena PhagraFeno .....	42
5.2.2 Resultados e discussões: Antena PHA, Antena PBG, Antena Nano e Antena PBG+Nano. 43	

<b>6. Considerações Finais.....</b>	<b>48</b>
6.1 Propostas para trabalhos Futuros .....	48
<b>Referências.....</b>	<b>49</b>
<b>Anexos .....</b>	<b>55</b>
Anexo 1 .....	55
A.1.1 Teoria eletromagnética .....	55
A.1.2 Equação de onda.....	56
A.1.3 Ondas em meios dielétricos.....	57
A.1.4 Velocidade de grupo e velocidade de fase .....	58
Anexo 2 .....	60
A.2.1 Vetores de Redes .....	60
A.2.2 Rede Recíproca.....	61
A.2.3 Zona de Brillouin.....	62
A.2.4 Estrutura de Bandas.....	63
Anexo 3.....	65
A.3.1 Estrutura de Furos de ar.....	65

## 1. Introdução

Com demanda por transmissão de dados, especialmente em redes sem fio, as telecomunicações precisam de novos dispositivos móveis que transmitem dados em alta velocidade, exigindo novos circuitos integrados e materiais artificiais. Os meios de comunicação sem fio, incluem rádios, smartphones, receptores via satélite, dispositivos tipo *Global Positioning System (GPS)* e sistemas de *Radio Frequency Identification (RFID)*. Portanto, pesquisadores e engenheiros buscam projetar antenas que garantam um bom desempenho desses sistemas [1].

A forma de como a sociedade cria, compartilha e consome informações, fez com que o tráfego de dados adquirisse uma nova dinâmica, onde os sistemas de comunicações de última geração, como *ultra-wideband (UWB)* ou de ondas milimétricas (*mmWave*), são pouco eficazes, pela sua limitação em transferir dados no limite até 10 *Gigabit* por segundos (Gbps), tornando-se incapaz de atender transmissões de taxas informações superiores [2-3].

Neste contexto, a banda *Terahertz (THz)* que abrange as frequências entre 0,1 THz e 10 THz, é uma das mais promissoras alternativas, pois as tecnologias sem fio serão capazes de suporta links (canais de transmissão de dados) de *Terabit* por segundo (*Tbps*) e se difere das comunicações infravermelho (IR) ou da luz visível (LV), pois o THz oferece uma menor perda, uma vez se obtém uma baixa atenuação do sinal dentro das condições atmosféricas, como neblina, poeira e chuva [4]. No entanto, ainda existe muitos obstáculos em garantir a comunicação sem fio na banda Terahertz (THz), devido às restrições de propagação que são muito altas. Um dos principais obstáculos são as perdas atmosféricas, pois nestas quanto maior a frequência, maior é atenuação, portanto faz-se necessário a implementação de um sistema de comunicação robusto, relativamente de baixo custo e capaz de explorar totalmente as características da banda THz [5].

As antenas de microfita têm sido amplamente aplicadas nos sistemas comunicações citadas acima. Essas antenas oferecem vantagens para essas aplicações por serem pequenas, de designer simples, econômicas e mais versáteis quando comparadas com outras antenas de mesma função. Entretanto, essas antenas apresentam algumas desvantagens como baixa eficiência, largura de banda estreita, entre outros. Sendo assim, é importante a utilização

de algumas técnicas para melhorar tais parâmetros como trocar o material de seus componentes e alterações geométricas da antena [6].

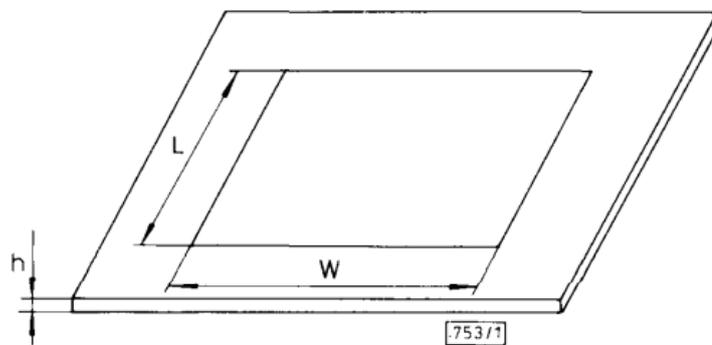
As investigações atuais mostram que materiais bidimensionais (2-D), compostos de apenas uma camada de um átomo de espessura, tem forte potencial para aplicações eletrônicas. Um dos materiais 2-D que atraiu a comunidade científica devido suas propriedades únicas é o grafeno GRA, um material de estrutura simples e com ótimas propriedades físicas, como a mobilidade dos elétrons excessivamente alta e a espessura de uma camada atômica que possibilita a miniaturização de antenas.

Azevedo *et.al.*, [7] fez um análise teórica de uma antena dipolo retangular feita de (GRA), e relata que além de contribuir com uma integração monolítica em nanoeletrônicos, oferece também baixas perdas na banda THz, operando na faixa de 0,5 THz a 2 THz. Lavadiya *et al.*, [8], usou o cobre no *designe* de uma antena de microfita e quando se compara os resultados com o do Azevedo *et.al* [7], é notável que a antena dipolo retangular feita de grafeno possui perdas de retornos menores e largura de banda maiores do que a feita de cobre, características muito vantajosas para a operação na faixa de THz, ou seja, antena microfita de cobre obteve coeficiente de reflexão de -15 dB e frequência ressoante de 4 GHz, enquanto um antena de dipolo de grafeno um coeficiente de reflexão de -16 dB e frequência ressoante de 1 THz.

O Phagrafeno (PHA) é um alótropo do carbono proposto por Wang *et al.*, [9], destaca-se como um novo material entre os demais formados pelo carbono. Nesse contexto, as propriedades físicas do PHA permitem que o mesmo seja utilizado como condutor em antenas de dimensões micrométricas, possibilitando a comunicação sem fio na banda THz cada vez mais próxima da realidade. Tais condições são favoráveis devido à sua densidade planar atômica ser de  $0.37 \text{ atom}/\text{\AA}^2$  e ligeiramente menor que do grafeno que é de  $0.38 \text{ atom}/\text{\AA}^2$ . Sua estrutura é interessante porque distorce os cones de Dirac e suas características como densidade de empacotamento, são compatíveis com o do grafeno, e o que os divergem é que sua célula unitária, pois o novo material é formado por anéis de 5-6-7 carbonos. Veremos sua importância no tópico 1.1

## 1.1 Estado da Arte

Em 1953, no terceiro Simpósio de pesquisa antenas, organizado pela força Aérea dos Estado Unidos, o Prof. Georges A. Deschamps apresentou um trabalho intitulado “Antenas de micro-ondas *Microstrip*”, revelando o primeiro conceito de uma antena *Patch* [10]. Porém de fato as caracterizações necessárias para projetistas de antenas, surgiu com o trabalho de Capelle e Nauwelars em 1989 [11], ver a Figura 1.1.



**Figura 1.1** – Primeiro modelo da Antena retangular de Microfita [11].

Esses trabalhos foram o estopim para que outros artigos de mesmo interesse surgissem, descrevendo sobre os materiais de circuito impresso utilizados na construção das antenas *patches* dimensionadas para dispositivos. Schaubert *et al.* [12], averiguaram teoricamente e experimentalmente o efeito da espessura do substrato dielétrico, variando o valor da permissividade elétrica no desempenho de antenas *Patches* excitadas por uma linha de microfita. Já Singh *et al.*, [13], sugeriu uma antena de microfita que tinha um quarto de comprimento de ondas ( $\lambda/4$ ), onde a antena tinha formato de H, com aplicações em micro-ondas monolítica (MMIC). Basilio *et al.*, [14], relata a dependência da impedância de entrada na posição da alimentação do *Patch* retangular de uma antena, por cabo coaxial e por linha de microfita. Trabalhos mais recentes, falam sobre as propriedades de antenas geométricas fractal e quase-fractal, tem o objetivo de diminuir o tamanho de uma antena *Patch*, sem prejudicar sua eficácia e efeitos de radiação [15-16].

Uma das maneiras de aumentar o desempenho de uma antena *Patch* é trocando os materiais de seus componentes. A descoberta do GRA experimentalmente, atraiu diversos estudiosos devido possuir propriedades elétricas, mecânicas, térmicas e ópticas únicas, que permitiu várias aplicações deste material [17]. Atualmente a telecomunicação demanda por

uma largura de banda ampla e miniaturização dos dispositivos, onde Tamagone *et al.* [18] utilizou o GRA em seu dispositivo, em que apresentou 7,5 dB de perda de inserção na frequência 2,9 THz, mostrando superioridade quando comparado com os demais metais.

Em 2012, Llatser *et al.* [19] investigaram numericamente a dispersão de radiação em THz, em uma antena *Pach* nanométrica. Pelo fato de propagar *Surface Plasmons-Polaritons* (SPP) em GRA, a antena mostrou um comportamento ressonante na banda THz, e nos seus resultados da simulação, foi identificado que o filme de GRA estruturado tem potencial para ser utilizado nas antenas THz sintonizáveis.

No ano de 2014, Zhou *et al.* [20] projetaram uma nano antena sintonizável, baseada de GRA, no qual eles variavam o potencial químico para verificar a frequência ressoante. Tiveram respostas favoráveis, conseguindo caracterizar uma reconfiguração dinâmica, com uma alta miniaturização, baixo coeficiente de reflexão e uma boa radiação omnidirecional.

Com as várias qualidades e aplicações do grafeno inspirou novas buscas por outros materiais 2-D como o siliceno. Porém em 2015, Wang *et al.* [9], utilizando um algoritmo evolucionário ab initio USPEX (*Universal Structure Predictor: Evolutionary Xtallography*), desvendou um novo alótropo do GRA feito de 5-6-7 anéis de carbono chamado de PHA.

Ele é um material 2-D, onde os cones de Dirac se manifestam na primeira Zona de Brillouin (ZB), de forma distorcida, pelo fato de possuir diferentes números de anéis de carbono, facilitando para que os elétrons se movimentem de forma similar a partículas sem massa, viajando com velocidades diferentes, pois depende da direção, distinguindo assim do grafeno. Além disso o PHA, dispõe de todas as outras características do GRA, tornando-se considerado um material avançando para dispositivos eletrônicos flexíveis, transistores, baterias solares e antenas.

Em 2017, Nisioka *et al.* [21] decidiram investigar as propriedades de transporte eletrônico e *Transition-Voltage Spectroscopy* (TVS) de junções moleculares compostas por Nanofitas *ZigueZague* de GRA (NZZG) e PHA (NZZF). Como resultado tiveram, que as *Nanofitas* possuem comportamento de um condutor com características de um diodo túnel. Em 2018, Da Silva *et al.*, [22], ao revisitar os resultados de Nisioka *et al.* [21], para a NZZF verificou-se que a *Nanofita* de PHA, exibiu características de um isolante topológico comprovados pelos Orbitais Moleculares de Fronteira (OMFs).

Recentemente Xie e Quin [23], investigaram as propriedades ópticas do Phagrafeno, como constante dielétrica, espectro de absorção e reflexão, em que os cálculos foram baseados em Teoria do Funcional Densidade (DFT), usando *Vienna ab initio simulation Package* (VASP). Os resultados mostraram que o material tem considerável mobilidade e condutividade,

como também possui uma alta constante dielétrica estática, ainda melhor que o grafeno convencional.

Reunindo os conceitos abordados acima, no qual os cientistas buscam fortemente por uma largura de banda e miniaturização dos dispositivos de comunicação sem fio, serão discutidas o potencial e aplicação do PHA em uma antena *Patch* para um sistema de transmissão de dados em THz.

Nesse trabalho é apresentado uma antena de PHA, e analisando os seguintes resultados: Coeficiente de Reflexão ( $S_{11}$ ), *Voltage Standing Wave Ratio* (VSWR), Ganho (G) e Impedância ( $Z_{in}$ ). A simulação foi realizada no software COMSOL *multifysics*, um simulador que realiza modelagem multifísicas.

Foi obtido as propriedades ópticas do material, como: condutividade elétrica ( $\sigma$ ), permissividade relativa ( $\epsilon_r$ ) e permeabilidade relativa ( $\mu_r$ ). Uma das maneiras de se obter essas características, é através da função dielétrica, que revela a permissividade, contribuindo assim para encontrar o restante. Usa-se o pacote SIESTA, para otimização da geometria e determinação das propriedades eletrônicas, a partir da célula unitária do Phagrafeno. Portanto, os resultados obtidos, expõem uma expectativa de operação na frequência THz, de uma forma otimizada, baseada na literatura os resultados das propriedades eletrônicas e magnéticas se tornam úteis para o designer de antenas microfítas.

## 1.2 Objetivos

Esta dissertação busca explorar as propriedades do PHA para viabilizar o designer de uma antena *Patch* e assim enfrentar os desafios que uma comunicação sem fio na banda THz fornece, mostrando ser uma possível aplicação mais moldável, que atende a demanda das comunicações multimídias. Serão analisadas algumas configurações da antena e do material, comparando-as com as referências citadas acima. Portanto o trabalho proposto é realizado com os seguintes objetivos:

1. Avaliação das Propriedades Ópticas do PHA.
2. Projetar e simular uma antena de PHA para operação em THz.
3. Avaliar o desempenho de parâmetros de análise das antenas, comparando o Coeficiente de Reflexão ( $S_{11}$ ), ganho (G), VSWR e Impedância ( $Z_{in}$ ).

### 1.3 Organização do Trabalho

A dissertação obedece à organização descrita nos parágrafos seguintes: no segundo capítulo, é feita uma introdução dos conceitos básicos sobre teoria de antenas, onde são apresentados os parâmetros necessários para simular uma antena de microfita.

No terceiro capítulo o PHA é detalhado, onde é apresentado as metodologias usadas para calcular suas propriedades ópticas. A parte final deste capítulo trata dos resultados, como condutividade elétrica, permissividade relativa e permeabilidade relativa, que são fundamentais para a implementação do mesmo no COMSOL.

No quarto capítulo é apresentado a parte básica para o entendimento de cristais fotônicos, sendo introduzido com sua evolução histórica até suas aplicações em dispositivos atuais. Também é mostrado suas possíveis formas dimensionais, seguindo de um formalismo matemático que descreve os cristais fotônicos, que são conceitos necessários para o entendimento de uma estrutura periódica, com furos de ar.

No quinto capítulo é apresentado o projeto da antena proposta, mostrando suas características bem como os resultados da simulação realizada com o software comercial COMSOL.

Por fim, as conclusões obtidas a partir de todo o desenvolvimento desta dissertação apresentada, seguida pelas sugestões de trabalhos futuros, pelas referências.

## 2. Teoria de Antenas

### 2.1 Introdução

As antenas são essenciais para obter uma comunicação sem fio, pois são estruturas metálicas capazes de irradiar e receber energia eletromagnéticas [24]. Uma antena é projetada para vincular o espaço livre e o circuito de comunicação e reciprocamente, onde durante o processo de comunicação, a antena transmissora transforma a corrente elétrica em ondas eletromagnéticas, já a antena receptora é responsável por recebe-las e converter em sinal de corrente elétrica, para adquirir informações [25]. É válido ressaltar que as antenas possuem aplicações distintas, sendo caracterizada da maneira que propaga e recebe sinais. Dessa forma, neste capítulo são apresentados os parâmetros para analisar uma antena comum, e quais os componentes necessários para a projeção de antenas de microfita.

### 2.2 Parâmetros de análise de antenas

Para verificar a eficácia de uma antena, é necessário analisar alguns parâmetros fundamentais nos resultados coletados, pois através deles é possível identificar e compreender o funcionamento dos campos irradiados pela antena. Sendo assim, nesta seção serão conceituados os principais parâmetros para o balanço de uma antena e para o entendimento dos produtos ilustrados no capítulo 5 desse trabalho.

#### 2.2.1 Coeficiente de reflexão

O Coeficiente de reflexão ( $S_{11}$ ), é um dos parâmetros mais importantes, pois determina não só a frequência de atenuação de uma antena, como também a sua largura de banda. Uma das maneiras de definir este parâmetro, é pela relação direta com o casamento de impedâncias entre a linha de alimentação e a antena como é estabelecido na equação 2.1

$$S_{11} = \frac{Z_{in} - Z_0}{Z_{in} + Z_0} \quad (2.1)$$

onde  $Z_{in}$  é a impedância de entrada da antena e  $Z_0$  é a impedância que caracteriza a linha de alimentação. Sendo assim, um bom casamento das impedâncias, torna a antena mais eficiente, pois terá um coeficiente de reflexão ( $S_{11}$ ) e eficiência alinhados [26]. A seção 2.3, detalha a forma que é feito o cálculo que ajusta as impedâncias para uma antena de microfita, e a figura 2.2 retrata um exemplo de gráfico do coeficiente de reflexão ( $S_{11}$ ).

### 2.2.2 Impedância de entrada ( $Z_{in}$ )

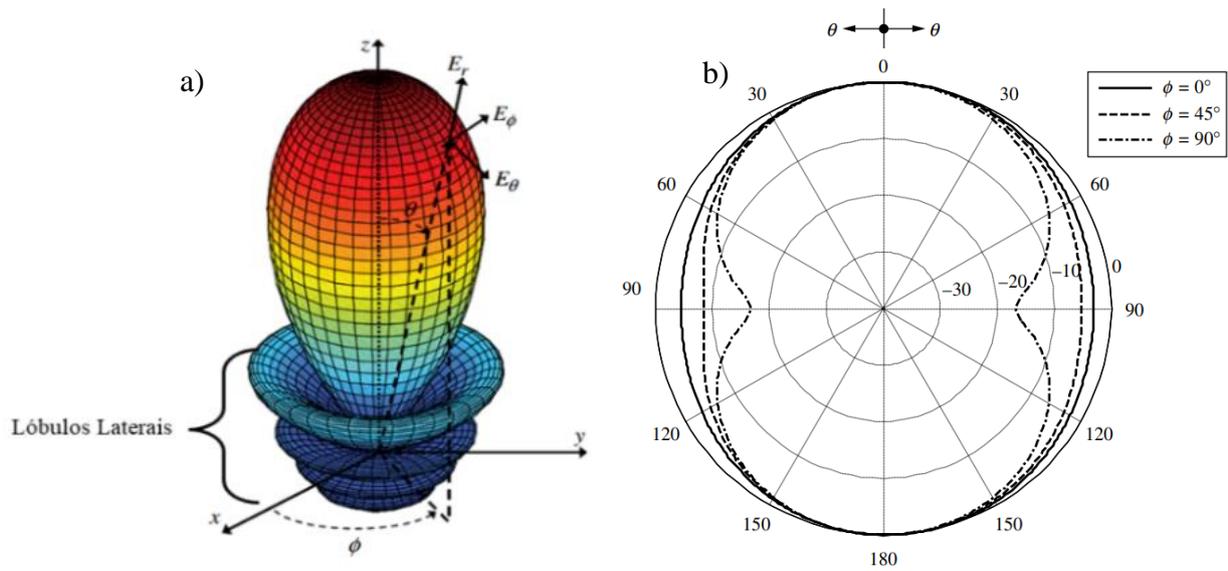
A impedância de entrada ( $Z_{in}$ ) pode ser compreendida como um parâmetro apresentada pelos terminais de uma antena sem carga conectada, podendo ser calculado através da equação (2.2)

$$Z_{in} = R_A + jX_A \quad (2.2)$$

Onde  $R_A$ , é a resistência da antena,  $X_A$  é a reatância da antena. Teoricamente é relatado que para a antena ter um bom rendimento, o ideal é que o casamento de impedâncias chegue a 50 Ohms, visto que geralmente as linhas de alimentação possuem esse valor de resistência de entrada em determinadas aplicações.

### 2.2.3 Diagrama de Radiação

O diagrama de radiação é definido como a correspondência gráfica, que pode ser em duas ou três dimensões (2-D ou 3-D), de forma retangular ou polar, das propriedades de radiação (campo distante), ou seja, é conceituado como a variação de potência irradiada por uma antena em relação da direção da antena. Além disso, pode representar as direções dos campos elétricos e magnéticos irradiados e os resultados mostram a intensidade de radiação normalizada (dB) em função dos ângulos ( $\theta$ ). A Figura 2.1 remete uma exemplificação de um, diagrama 3-D de um arranjo de 10 elementos com  $d = 0.25\lambda$ , distância de separação entre as antenas do conjunto, no qual mostra o comportamento de um campo irradiado pela antena junto com seus lóbulos laterais, revelando a importância desse parâmetro para uma análise de uma antena e na identificação da atuação dos campos irradiados ou na potência [26].



**Figura 2.1** – a) Diagrama de Radiação de campo elétrico normalizado em 3-D, onde campo elétrico está sendo projetado na direção z, tendo três componentes ( $E_r, E_\phi, E_\theta$ ). b) Diagrama de Radiação de campo elétrico normalizado em 2-D, onde o loop do plano varia de  $0^\circ$  a  $90^\circ$  [26].

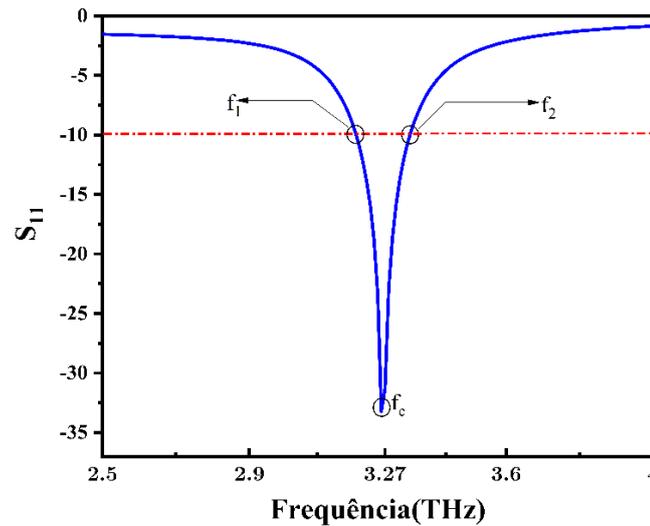
2.2.4 Largura de banda

A largura de banda ( $BW$ ) pode ser conceituada como uma faixa de frequência, onde o sistema tem potencial de irradiar ou receber energia corretamente. Uma vez que dada a frequência de atenuação, a sua largura de banda ( $BW$ ) é dada pela diferença entre a maior e menor frequência. Esse parâmetro atende os requisitos que mostra a eficiência de uma antena, assim como coeficiente de reflexão, e outros. Quando se usa o gráfico de coeficiente de reflexão  $S_{11}$ , a medição da faixa começa quando for menor ou igual a -10 dB, pois significa que 90% da energia fornecida pela alimentação é entregue à antena, como demonstra a Figura 2.2 a seguir.

A equação (2.3) expressa como calcular a largura de banda em percentual ( $B_p$ )

$$B_p = \frac{BW}{f_c} \times 100 = 2 \frac{f_2 - f_1}{f_2 + f_1} \tag{2.3}$$

Onde  $BW = f_2 - f_1$  é a largura de banda, e a frequência de ressonância é  $f_c = \frac{f_2 + f_1}{2}$ , que também é conhecida como frequência central.



**Figura 2.2** – Exemplo de coeficiente de reflexão ( $S_{11}$ ) [6], linha na cor azul: A Largura de banda ( $BW$ ) é avaliada em -10 dB sinalizada com a linha tracejada na cor vermelha, pois coeficientes de reflexão menores que esse valor, significa que a antena entrega aproximadamente 90% da sua potência.

Um dos parâmetros relacionado a largura de banda é VSWR, que medi a taxa do coeficiente de ondas estacionária com a frequência, que pode ser dado por  $VSWR = (1 + |S_{11}|)/(1 - |S_{11}|)$ .

### 2.2.5 Eficiência ( $e$ )

A eficiência ( $e$ ) é uma caracterização muito importante, pois esse parâmetro leva em consideração as perdas de entrada e do interior das antenas, no qual nas maiorias das vezes, as perdas se relacionam com as reflexões, devido o descasamento da linha de alimentação e antena, considerando as perdas nos condutores e dielétricos [27]. Matematicamente, a eficiência total ( $e_0$ ) é expressa pela equação (2.4)

$$e_0 = e_r e_c e_d \quad (2.4)$$

Onde  $e_r$  é a eficiência de reflexão ( $1 - |S_{11}|^2$ ),  $e_c$  é a eficiência de condução e  $e_d$  a eficiência dielétrica.

### 2.2.6 Ganho

Para a compreensão do Ganho ( $G$ ), é necessário ter o conceito sobre diretividade. Sendo assim, diretividade representa a relação entre a intensidade de radiação de uma antena em certa

direção, com a mesma propriedade de uma antena isotrópica, que seja alimentada com o mesmo potencial. Em outras palavras, essa caracterização compara a intensidade de potência irradiada da antena em questão, em dada direção, com uma antena referência na mesma direção. A diretividade ( $D$ ) é expressa numericamente pela equação (2.5)

$$D = \frac{U}{U_0} = \frac{4\pi U}{P_{rad}} \quad (2.5)$$

Onde,  $U$  a intensidade de radiação,  $U_0$  intensidade de radiação de uma antena isotrópica,  $P_{rad}$  a potência radiada total. A seguinte equação 2.6, mostra que o ganho ( $G$ ) está diretamente relacionado à eficiência total e a diretividade ( $D$ ).

$$G_0(\theta, \phi) = e_0 D_0(\theta, \phi) \quad (2.6)$$

Os conceitos de ganho ( $G$ ) e diretividade ( $D$ ) são parecidos, porém a diretividade é relacionado com a potência radiada pela antena em dada direção, portanto tem relação com diagrama de radiação. No entanto, o ganho tem correlação com a potência de entrada (energia de entrada de uma antena), assim tendo ligação com a eficiência de reflexão. Já a definição de ganho ou ganho absoluto, leva em consideração a eficiência de condução, dielétrica e reflexão [28].

### 2.3 Antenas de Microfita

Na sua forma primária, uma antena *Patch*, contém basicamente duas placas metálicas condutoras, paralelas, conectadas a um substrato dielétrico isolador da mesma forma que uma placa de circuito impresso, onde uma das placas é o elemento irradiador (*Patch*) e outra camada metálica é ligada na parte contrária do substrato, formando um plano terra, como mostra a Figura 2.3 [27]. O *Patch* pode assumir várias formas geométrica, mas em termo de análise e previsão do desempenho, normalmente são utilizadas as formas convencionais, como: retangulares, circulares e mais recentes formas *factais*.

O *Patch* da antena microfita, apresenta um comprimento que se aproxima da metade da extensão da onda no dielétrico, tendo uma relação direta com a frequência de ressonância [29]. Para diminuir as dimensões da antena, é necessário utilizar um material de alta permissividade, porém, pode resultar em larguras de bandas pequenas, quando comparado com dielétricos de

baixa permissividade. Dessa maneira, dependendo do caso, as técnicas para alimentação da antena podem variar, podendo ser: alimentação por guia de onda, cabo coaxial, microlinha utilizado a técnica de reentrância (*inset feed technique*), que facilita o casamento de impedâncias.

### 2.3.1 Design de antenas de microfita

Para a projeção de uma antena de microfita, é necessário incluir os efeitos de bordas, pelo fato do comprimento do *patch* está relacionado com a altura do substrato  $L_p/h$ , e também por possuir uma dependência com constante dielétrica do substrato  $\epsilon_s$  [26-29]. Esse efeito é consequência das dimensões finitas da largura e comprimento do patch, resultando que os campos sofram os *efeitos de franjas*. Esses efeitos ocorrem no *Patch* e na linha de alimentação da antena, fazendo que eles sejam fisicamente maiores, onde esses efeitos podem ser corrigidos através do cálculo da constante dielétrica relativa efetiva ( $\epsilon_{eff}$ ). Desse modo, para a projeção de uma antena, é fundamental os seguintes passos:

- O primeiro passo é determinar a frequência de ressonância ( $f_c$ ), a permissividade elétrica do substrato ( $\epsilon_s$ ) e a espessura do mesmo ( $h$ ).
- Sendo assim, já podemos calcular a largura do patch ( $W_p$ ) expressa pela equação (2.7)

$$W_p = \frac{1}{2f_c\sqrt{\mu_0\epsilon_0}} \sqrt{\frac{2}{\epsilon_s + 1}} \quad (2.7)$$

- Com essas informações, já se pode calcular a constante dielétrica relativa efetiva, através da equação (2.8)

$$\epsilon_{eff} = \frac{\epsilon_s + 1}{2} + \frac{\epsilon_s - 1}{2} \left[ 1 + 12 \frac{h}{W_p} \right]^{-1/2} \quad (2.8)$$

- Em seguida se calcula o comprimento efetivo do patch ( $L_p$ ), mas para se obter esse parâmetro é preciso determinar primeiro o incremento normalizado ( $\frac{\Delta L}{h}$ ), expressa pela equação (2.9)

$$\frac{\Delta L}{h} = 0.412 \frac{(\epsilon_{erff} + 0.3) \left( \frac{W_p}{h} + 0.264 \right)}{(\epsilon_{erff} - 0.258) \left( \frac{W_p}{h} + 0.8 \right)} \quad (2.9)$$

- Dado isso, calcula-se o comprimento efetivo do patch  $L_p$  pela equação (2.10)

$$L_p = \frac{1}{2f_c \sqrt{\epsilon_{erff}} \sqrt{\mu_0 \epsilon_0}} - 2\Delta L \quad (2.10)$$

Essas informações estruturam o patch da antena. O segundo passo, é encontrar os valores para linha de microfita, no qual usou-se a técnica de reentrância (*inset feed technique*), que melhora o casamento das impedâncias. A Resistência de entrada de uma antena ( $R_{in}$ ), é descrita pela equação (2.11) [26].,

$$R_{in} = \frac{1}{2(G_1 \pm G_{12})} \quad (2.11)$$

sendo que  $G_1$  a condutância, é dada pela equação (2.12):

$$G_1 = \frac{-2 + \cos(X) - X s_i(X) + \frac{\sin(X)}{x}}{120\pi^2} \quad (2.12)$$

onde  $X = \frac{2\pi W_f}{\lambda}$ ,  $W_f$  é a largura da linha de microfita,  $s_i = \int_0^X \frac{\sin(t)}{t} dt$  é a função seno integral.

No entanto  $G_{12}$  que é a condutância mútua, é numericamente escrita pela equação (2.13)

$$G_{12} = \frac{1}{120\pi^2} \int_0^\pi \left[ \frac{\sin\left(\frac{k_0}{2}\right) \cos \theta}{\cos \theta} \right]^2 J_0(k_0 L \sin \theta) \sin^3 \theta d\theta \quad (2.13)$$

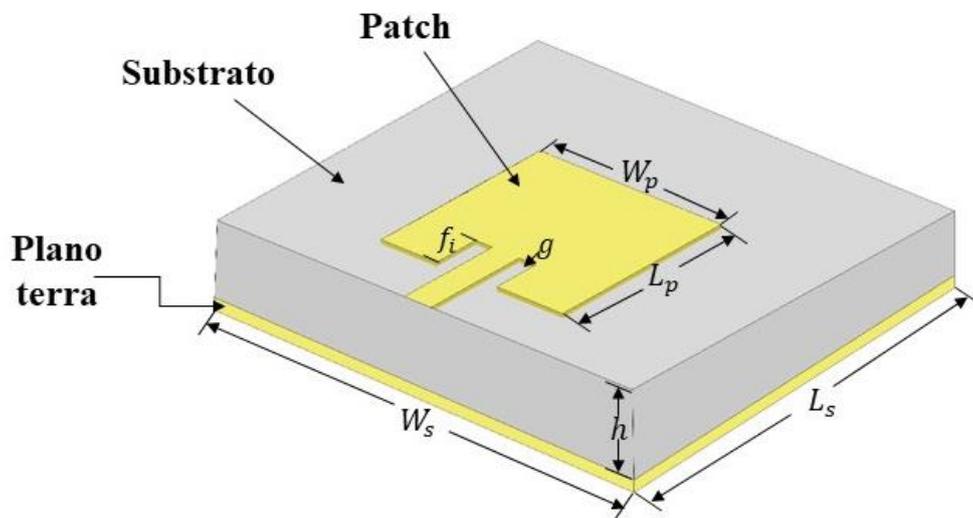
no qual,  $L$  é o comprimento da linha de alimentação. Dessa maneira, determinamos a resistência de entrada de ressonância ( $R_{in}$ ). Com os resultados obtidos acima, o próximo passo é definir o comprimento de reentrância ( $f_i$ ), dado pela equação (2.14)

$$f_i = \frac{L_p}{\pi} a \cos \left( \sqrt{\frac{Z_{in}}{R_{in}}} \right) \quad (2.14)$$

E o “gap” da reentrância ( $g$ ) descrita pela equação (2.15)

$$g = \frac{4.65c \cdot 10^{-9}}{\sqrt{2}\epsilon_{erff}f_c 10^{-9}} \quad (2.15)$$

onde  $c$  é a velocidade da luz no vácuo. Esses parâmetros equacionados acima, podem ser implementados em softwares que possuem interfaces de linha de comando para soluções de problemas numéricos. A Figura 2.3 mostra o design da antena de microfita proposta neste trabalho.



**Figura 2.3** – Antena de microfita.

## 2.4 Considerações Finais do Capítulo

O capítulo acima, apresentou alguns dos principais parâmetros e características das antenas *Patch*, que são usados pela literatura para avaliar o desempenho desses dispositivos. Portanto, esse entendimento é base necessária para entender a operacionalidade da antena desenvolvida, assim como também dar sustento para comparar os valores obtidos com os da bibliografia. O capítulo a seguir, mostra a célula otimizada do PHA e os parâmetros usadas para obter suas propriedades ópticas. Os resultados da simulação são importantes para implementação do material no simulador COMSOL, visto que o PHA o é um material recém descoberto.

### 3. Phagrafeno, o novo material 2-D

#### 3.1 Introdução

Um dos elementos mais abundantes em nosso planeta é o carbono (C), sendo um material fundamental em muitas estruturas orgânicas e inorgânicas [30]. O carbono é um elemento que faz parte de várias composições dos tipos de macromoléculas, presente em materiais e estruturas formadas somente de átomos de carbono, conhecidos como alótropos de carbono [31]. Até um tempo, uns dos mais reputados eram o grafite e o diamante, usados em diversas aplicações pelas indústrias.

Nas últimos três décadas, novos alótropos de carbono foram revelados, onde no ano de 2004, os físicos *Andre K. Geim e Konstantim S. Novoselov* da universidade de *Manchester* conseguiram sintetizar uma estrutura de camada única de grafite, denominado de GRA [17]. O GRA possui a estrutura de cones de Dirac na superfície de Fermi, condicionando a ele ter propriedade físico-químicas únicas, tendo uma alta mobilidade de elétrons [32]. Essas características do GRA, fez com que ele tivesse uma ampla aplicação em eletrônica, óptica e mecânica. Algumas Estruturas, como grafinos e seus análogos [33], têm redes cristalinas 2-D e possuem cones de Dirac. No entanto, cada alótropo possui suas próprias características, onde acaba sendo útil explorar esses diferentes materiais de carbono 2-D, para as mais variadas aplicações.

Wang *et al.* [9] propuseram um novo material de carbono (C) 2-D, batizado como PHA, composto por anéis 5-6-7 de carbono, tem propriedades eletrônicas únicas, por causa da distorção dos cones de Dirac, ver a Figura 3.1(a). Assim como o GRA que possui uma hibridização  $sp^2$  e estrutura de empilhamento atômica densa, ver Figura 3.1(b).

Pereira *et al.* [33] afirmaram que o PHA é um grande proponente a dispositivos termoelétricos, devido ter baixa condutividade térmica, e ressalta que em seus resultados observou uma redução significativa nas velocidades do grupo de fônon, quando comparado com o grafeno.

Farzadian *et al.* [34] fizeram simulações de dinâmica molecular fora do equilíbrio, no objetivo de investigar a dependência da condutividade térmica sobre o comprimento total da

estrutura estudada, e relata que o PHA tem uma condutividade térmica aproximada de 155W/mK, sendo 50% melhor do que a do GRA. Dessa maneira, com as excelentes propriedades mencionadas acima, o PHA é considerado um material promissor, no qual impulsiona a exploração de outras características deste material. As propriedades ópticas de nanotubos de carbono (8, 0) dopado com nitrogênio (N) forem examinadas com DFT, onde o valor máximo do coeficiente de absorção depende fortemente da concentração de N e da direção da polarização [35]

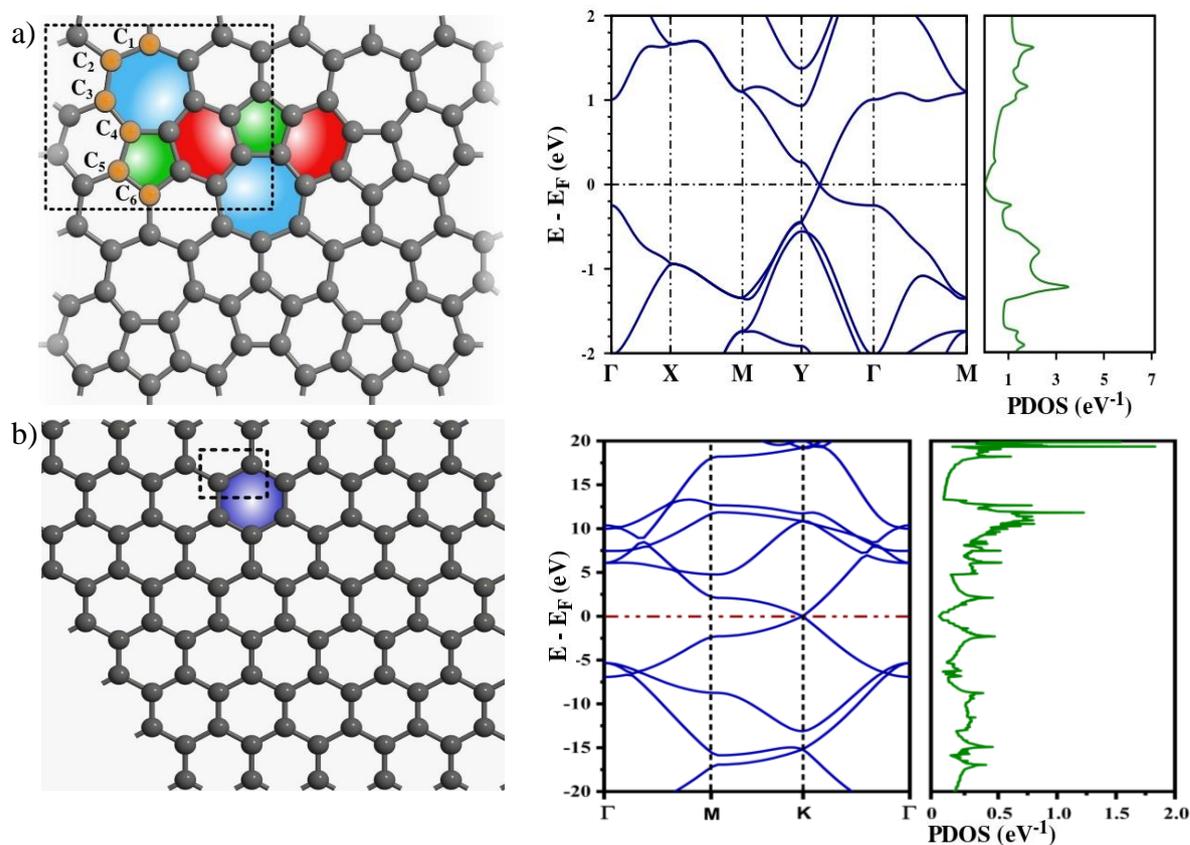
Dhar e Jana [36], estudaram as propriedades ópticas do germanenos defeituosos (dopado com berílio (Be)) e concluíram possíveis aplicações em dispositivos optoeletrônico. Mengle *et al.*, [37], com as mesmas propriedades da fase B do óxido de gálio ( $\beta - Ga_2O_3$ ), afirmou que o material pode ser aplicado na detecção dos raios ultravioletas profundo. Já Ferreira *et al.*, [38], estudaram os sistemas análogos de carbono não dopados, e seus resultados indicaram aplicabilidade optoeletrônica. Os trabalhos acima, não só ajudaram como calcular as propriedades ópticas do PHA, como também auxiliaram na compreensão dos resultados e sua aplicação. Recentemente, Xie e Quin [39], investigaram as propriedades ópticas do PHA, calculando a função dielétrica, o espectro de reflexão e o espectro de absorção.

Em nossos estudos, o cálculo da constante dielétrica, utilizamos uma metodologia que difere do trabalho de Xie e Quin [39]. Além disso, é calculado também a condutividade elétrica e a permeabilidade magnética. Foi feito o cálculo de estrutura de bandas e densidade de estado para termos comparativos sobre a otimização da célula para o Phagrafeno. A seção a seguir detalha os procedimentos para obter essas propriedades.

### 3.2 Modelo e Método

Neste trabalho, através do *software* AVOGRADO construímos a rede cristalina 2-D do PHA com a célula unitária (5-6-7 anéis de carbono formando 19 átomos), como mostra a Figura 3.1(a). Já a rede do GRA, ver a Figura 3.1(b), através da célula unitária (6 anéis de C com 2 átomos de C). Os cálculos foram realizados via metodologia do *density functional theory* (DFT) usando o pacote SIESTA, que foi utilizado para a otimização das geometrias, como também obter propriedades eletrônicas e ópticas das células unitárias. Aplicamos uma temperatura eletrônica de 300 K e a energia de corte de 600 eV, para suavizar a integração da função de *Methfessel-Paxton*, aumentando assim a eficiência dos cálculos. Para o GRA, na primeira ZB, utilizamos o esquema de *Monkhorst-Pack* [40] tendo K-point ( $16 \times 16 \times 1$ ), já para o PHA,

foi adotado os K-point ( $30 \times 30 \times 1$ ) [9]. Assim geramos a estrutura de bandas e densidade de estado, que apresentaram comportamento de semiconductor de gap nulo.



**Figura 3.1** – Rede cristalina, estrutura de banda e densidade de estado com DFT/LDA/PBE/SZP. a) PHA b) GRA

Introduzimos a autocorrelação *Local Spin-Density Approximation* (LSDA), método altamente convergente para elementos ferromagnéticos. Via cálculos de DFT, foi possível realizar o mapeamento geral da densidade de spin, pois parte de uma expressão exata para suscetibilidade do spin dinâmico, sendo assim um parâmetro importante para encontrar a permeabilidade magnética [40-41].

Um das formas de se obter as propriedades ópticas de um sistema é através da função diétrica, que é definida por  $\varepsilon(\omega) = 1 + X_{ij}(\omega)$  onde  $\omega$  é a frequência da onda eletromagnética (EM) e  $X_{ij}(\omega)$  é mostrado na equação 3.3, [42]. Portanto foi obtida a função diétrica  $\varepsilon(\omega)$ , que é o ponto de partida para obter as demais propriedades, como condutividade elétrica  $\sigma(\omega)$  e permeabilidade relativa  $\mu(\omega)$  e que dependem da frequência. Os cálculos foram realizados ao longo de uma faixa de energia do fóton variando de 0 a 5 eV.

Dessa maneira a função diétrica  $\varepsilon(\omega)$  foi solucionada pelo formulismo de *Kubo-Greenwood* para tensor de suscetibilidade conforme mostra a equação 3.3 [43].

$$X_{ij} = \frac{-e^2 \hbar^4}{m^2 \Omega \varepsilon_0 \omega^2} \sum_{nm} \times \frac{f(E_n) - f(E_m)}{E_{nm} - \hbar\omega - i\hbar\Gamma} \Pi_{nm}^i \Pi_{mn}^j \quad (3.3)$$

de modo que  $\Omega$  e  $\varepsilon_0$  representam o volume da célula unitária e a permissividade elétrica do vácuo respectivamente,  $\Pi_{nm}^i$  e  $\Pi_{nm}^j$  são os momentos de dipolo com elemento  $i$  e  $j$  da matriz entre os estados  $n$  e  $m$ , sendo que  $\hbar$  é a constante de Planck reduzida e  $\Gamma$  refere-se ao alargamento da banda. A função  $f$  é relacionada a função de fermi. O cálculo da constante dielétrica é feito em três direções, xx, yy, zz (ao longo do comprimento das células unitárias do PHA o e do GRA).

Para obter a constante dielétrica  $\mu(\omega)$  é válido ressaltar que possui sua parte real  $\mu_R$  e imaginária  $\mu_I$ , onde foi necessário fazer uma modificação algébrica da equação da velocidade de fase e energia (grupo), onde  $v = 1/\sqrt{\varepsilon\mu}$  [26], usando o índice de refração (real)  $N_i = \sqrt{\frac{\varepsilon_i^2 + \varepsilon_j^2 + \varepsilon_i}{2}}$  e coeficiente extinção (imaginário)  $N_j = \sqrt{\frac{\varepsilon_i^2 + \varepsilon_j^2 - \varepsilon_i}{2}}$  [44-45]. Dessa maneira, a equação 3.4 descreveu  $\mu_i$  e a equação 3.5 descreveu  $\mu_j$ .

$$\mu_i = \frac{\sqrt{\varepsilon_i^2 + \varepsilon_j^2 + \varepsilon_i}}{2(c^2 \varepsilon(\omega) \varepsilon_0 \mu_0)} \quad (3.4)$$

$$\mu_j = \frac{\sqrt{\varepsilon_i^2 + \varepsilon_j^2 - \varepsilon_i}}{2(c^2 \varepsilon(\omega) \varepsilon_0 \mu_0)} \quad (3.5)$$

$c$  velocidade da luz e  $\mu_0$  é a permeabilidade magnética do vácuo.

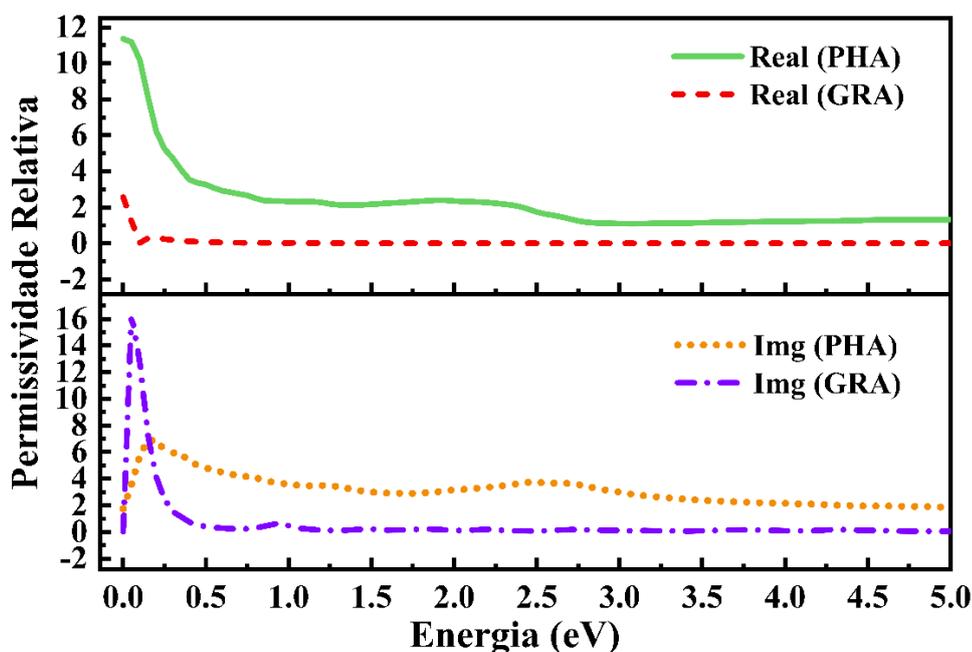
A equação 3.6 e 3.7 representam respectivamente a parte real e imaginária da condutividade elétrica [46].

$$\sigma_i = \frac{\omega \varepsilon_j}{4\pi \hbar} \quad (3.6)$$

$$\sigma_j = \frac{\omega(1 - \varepsilon_i)}{4\pi\hbar} \quad (3.7)$$

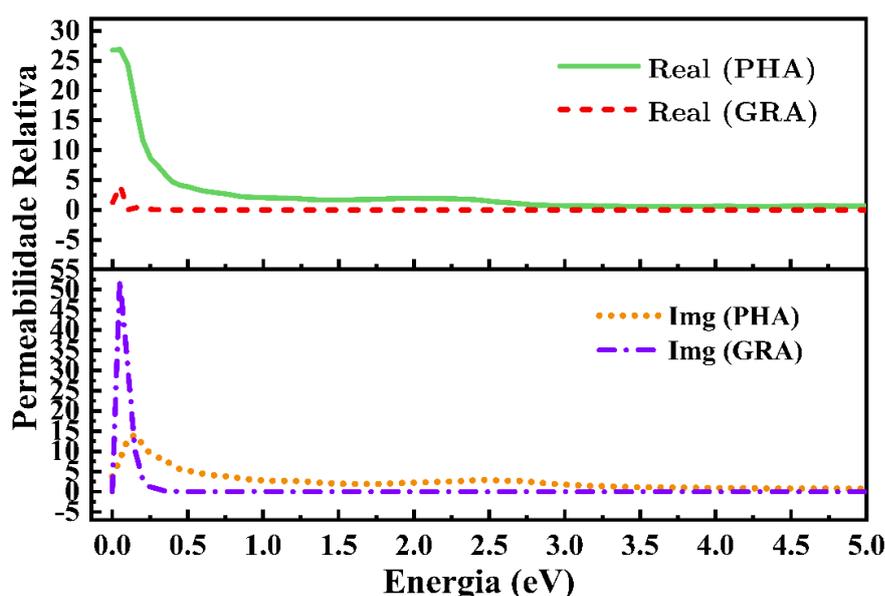
### 3.3 Resultados de Caracterização Óptica Eletrônica Do Phagrafeno

A Figura 3.2 retrata a permissividade relativa do GRA e PHA, expondo a parte real e imaginária da função dielétrica, onde no eixo x mostra a energia do fóton com uma resposta importante na região do infra vermelho, ou seja, de 0.0 eV até 1.77 eV do espectro eletromagnético e possui uma maior permissividade relativa localizadas próximo de 0.0 eV. O PHA, na parte real obteve uma banda com um pico de 11.36, já a sua parte imaginaria possui uma banda com um pico próximo de 1.73, enquanto que os valores obtidos para o grafeno na região do infra vermelho são próximo de 2.5 parte real e 0.017 parte imaginaria. Portanto, o PHA tem maior capacidade de armazenamento de carga. Além disso, a parte imaginária da constante dielétrica de ambos apresenta picos no infra vermelho, que informa as transições das interbandas, é notável espectros na faixa visível (1.78 a 3.1 eV) e na região ultravioleta (UV) (3.2 a 5 eV), valores no qual  $\varepsilon_i > 0$  e  $\varepsilon_j \approx 0$ , e significa que os materiais tem comportamento transparente nestas regiões. Os resultados obtidos do grafeno, foram comparados com o trabalho de Falkovsky 2008 [45].

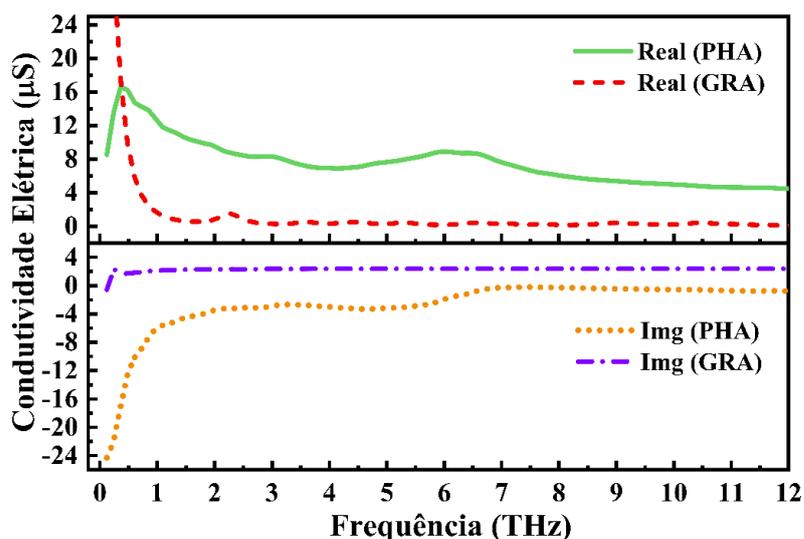


**Figura 3.2** – Parte real (painel superior) e parte imaginária (painel inferior) da Permissividade relativa do PHA e do GRA.

Na Figura 3.3 a seguir, analisamos os resultados da permeabilidade magnética que também terá parte real e imaginária. Portanto uma região de operação no infra vermelho de 0.0 eV até 1.77 eV, a permeabilidade magnética do PHA apresenta uma banda com pico de 26.7 para parte real e uma banda com pico de 3.3 na parte imaginária para uma energia de 0.0 eV, enquanto os picos do GRA o alcançaram 3.3 a 0.6 respectivamente para a mesma faixa de energia. Logo, o PHA possui maior capacidade de suportar a formação de um campo magnético dentro de si mesmo.



**Figura 3.3** – Parte real (painel superior) e parte imaginária (painel inferior) da Permeabilidade relativa do PHA e do GRA.



**Figura 3.4** – Parte real (painel superior) e parte imaginária (painel inferior) da Condutividade Elétrica do PHA e do GRA. .

A parte real e imaginária da condutividade elétrica dependente da frequência, ver Figura 3.4, o PHA na frequência de 0.5 THz, ele atingiu um pico de condutividade de  $8 \mu S$ , enquanto grafeno alcançou pico de condutividade  $25 \mu S$ . Porém o gráfico informa que ao longo de uma frequência de 0.5 -12THz, o Phagrafeno possui uma maior estabilidade, chegando em média a um valor de  $5 \mu S$  e permanece estável em  $5 \mu S$ , diferenciando do grafeno que consolidou um valor de  $1 \mu S$ . Portanto, esses valores acabam transmitindo a informação de que o material pode atribuir um alto coeficiente de absorção e penetração profunda de ondas eletromagnéticas.

### 3.4 Considerações finais do capítulo

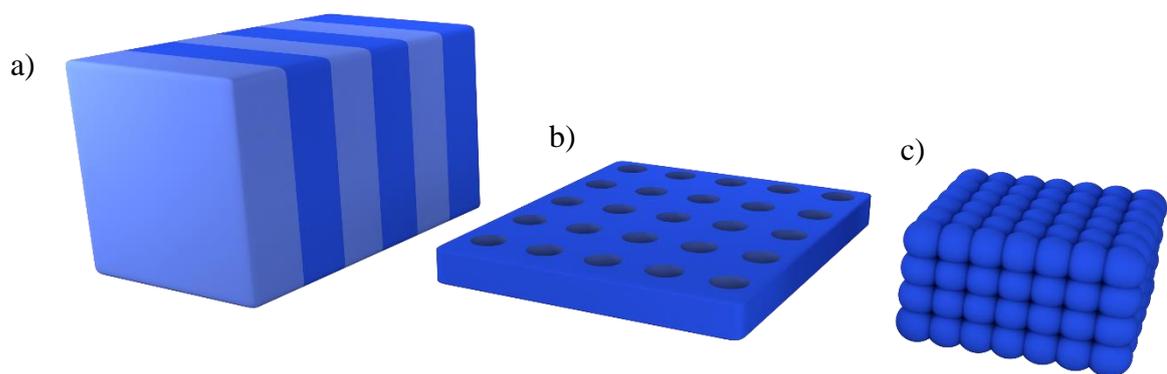
O presente capítulo ilustrou a rede cristalina do PHA e do GRA e suas propriedades ópticas, realizadas por meio de DFT, pela autocorrelação LDSA. A análise dessas propriedades mostrou a natureza de transparência ópticas dos materiais investigados, como também mostra que o PHA possui alta estabilidade, permitindo aplicações em dispositivos optoeletrônicos e outros. Além disso, o objetivo desse capítulo, é que as observações sirvam de base para demais pesquisadores que trabalham na área de comunicações, visto que essas propriedades permitem a diversas aplicações. O próximo capítulo expõe a parte introdutório e básica para compreensão sobre cristais fotônicos.

## 4. Cristais Fotônicos

### 4.1 Introdução

Em 1887, surgiu uma ideia em que os cristais fotônicos eram capazes de controlar a propagação da luz. Já em 1987, E.Yablonovitch e S. Jhon, descobriram que havia a possibilidade de coordenar a radiação propagada de um material ou a emissão espontânea por meio de estruturas periódicas [46]. A pesquisa deu origem para que diversos estudiosos aprofundassem sobre cristais fotônicos para possíveis aplicações, nos quais são: acopladores, fibra óticas, guias de ondas e outros [6].

Os PhCs (*photonic crystals*) estão classificados em três categorias: Unidimensional (1-D), que são estruturas geralmente utilizadas para exemplos de referência, no intuito de facilitar a compreensão das formações de diagramas de bandas de energia, assim sendo considerada uma estrutura simples e que possui periodicidade em apenas uma direção 1-D; a Bidimensional (2-D) e a tridimensional (3-D). Os cristais fotônicos 1-D se diferem dos cristais de estado sólidos 1-D, pois são estruturas não artificiais e possuem aplicações em dispositivos ópticos, como exemplo se tem as grades de *Bragg* usados como refletores em cavidades verticais de emissão de *lasers* [47].



**Figura 4.1** – Exemplos de cristais Fotônicos a) Uma dimensão (1-D), O azul claro e o escuro, diferem os tipos de materiais com suas diferentes constantes dielétrica, b) duas dimensões (2-D) e c) Três dimensões (3-D).

Para um bom entendimento de cristais fotônicos é necessário saber alguns conceitos, no qual o primordial deles é sobre estruturas de bandas, visto que esses elementos contêm composições por autoestado ou autofrequência da estrutura infinitamente periódica [6]. No decorrer dos anexos desse trabalho graficamente interferências construtivas e destrutivas nas ondas dentro do material que geram uma transmissão ou reflexão, onde o número de reflexões de Fresnel aparecerá nas interfaces. Também é ressaltado a importância da célula unitária, vetores de onda e demais temas.

#### 4.1.1 Teoria eletromagnética

Para um bom entendimento da propagação das ondas eletromagnéticas em um dielétrico, é preciso saber como é comportamento delas no espaço livre. Dessa forma, o anexo 1, contém as equações matemáticas que descrevem os movimentos das ondas eletromagnéticas nos meios.

## 4.2 Descrição Matemática

Aqui é descrito o comportamento dos campos nas estruturas periódicas e os campos distantes. O anexo 2, apresenta a solução da equação da onda, e as devidas equações necessárias para o entendimento desse tópico.

#### 4.2.1 Célula Unitária

Como já se sabe que as estruturas periódicas se repetem infinitamente, então para designá-las matematicamente há a possibilidade de encontrar um período dessa estrutura, no qual é determinado o restante por repetição, baseado na periodicidade. Dessa maneira, é tomado que a célula unitária é um pedaço da estrutura, e quando ela é transladada e rotacionada integra todo o espaço de forma igualitária até constituir o restante da estrutura periódica infinita. A figura 4.2 exemplifica uma célula unitária



**Figura 4.2** – Célula Unitária [46].

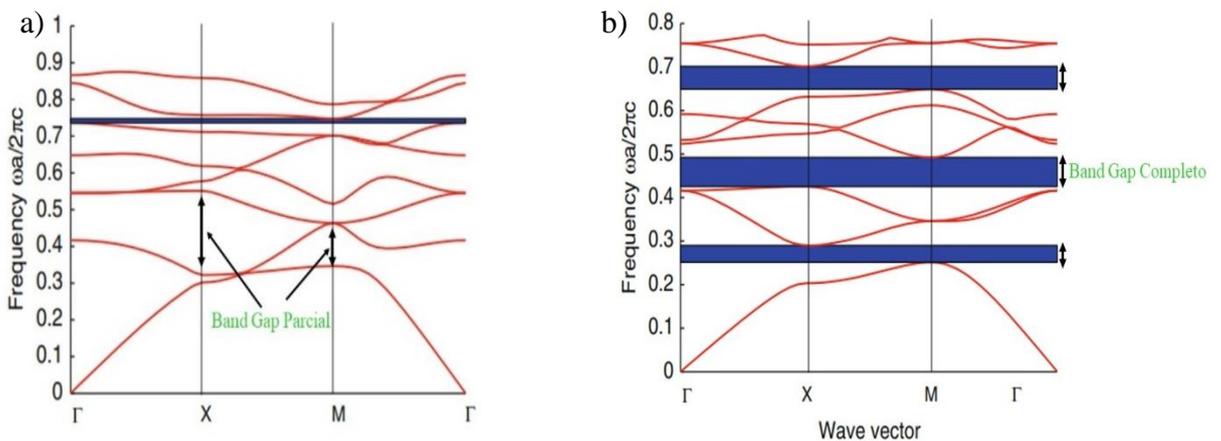
Também é conhecida como célula de *Wigner-Seitz*, pois possui uma ligação direta com as constantes dielétricas presentes nos materiais estudados e a forma com que eles se comportam. A definição da célula unitária de uma estrutura pode ser encontrada em [46-50].

#### 4.2.2 Vetores de Rede

Com o conceito da célula unitária estabelecido, agora é necessário definir as regras de suas translações, para a formar a rede periódica infinita. Para isso, é utilizado os vetores de rede, porém, devido ser uma estrutura periódica é preciso ter atenção ao determinar tais vetores para não ocorrer de obter infinitos vetores. Dessa maneira, é preferível usar novamente a periodicidade e definindo-o como um conjunto de vetores de acordo com as dimensões do problema, baseado na equação 1.26, contida também no anexo 2, também apresenta descrições matemáticas e conceitos fundamentais para o entendimento desse assunto.

#### 4.2.3 Photonic Band Gaps

Para uma análise de estruturas de bandas em cristais fotônicos é importante identificar as regiões onde as ondas não se propagam em nenhum ângulo, ou em apenas em ângulos específicos. Essas regiões são denominadas de *Photonic Band Gaps* (PBGs) e existem dois tipos: completos ou parciais. A figura 4.3 apresenta os dois tipos de PBGs.



**Figura 4.3** – Photonic Band Gaps a) Parcial; b) Completo [46].

Os dois PBGs da Figura 4.3 (a) e (b) possibilitam o design de um cristal fotônico, onde o parcial permite a propagação de ondas em certas direções e o completo proíbe a propagação da onda em todos os ângulos. Logo, podem criar filtros que liberam passagens em apenas direções específicas e em formatos específicos. Dessa maneira, a metodologia de expansão de ondas planas (PWE) é uma ferramenta bastante interessante para desenvolver estruturas

periódicas de uma maneira mais rápida, possibilitando organizar os resultados relacionando com as constantes dielétricas e as periodicidades do material.

### 4.3 Considerações finais

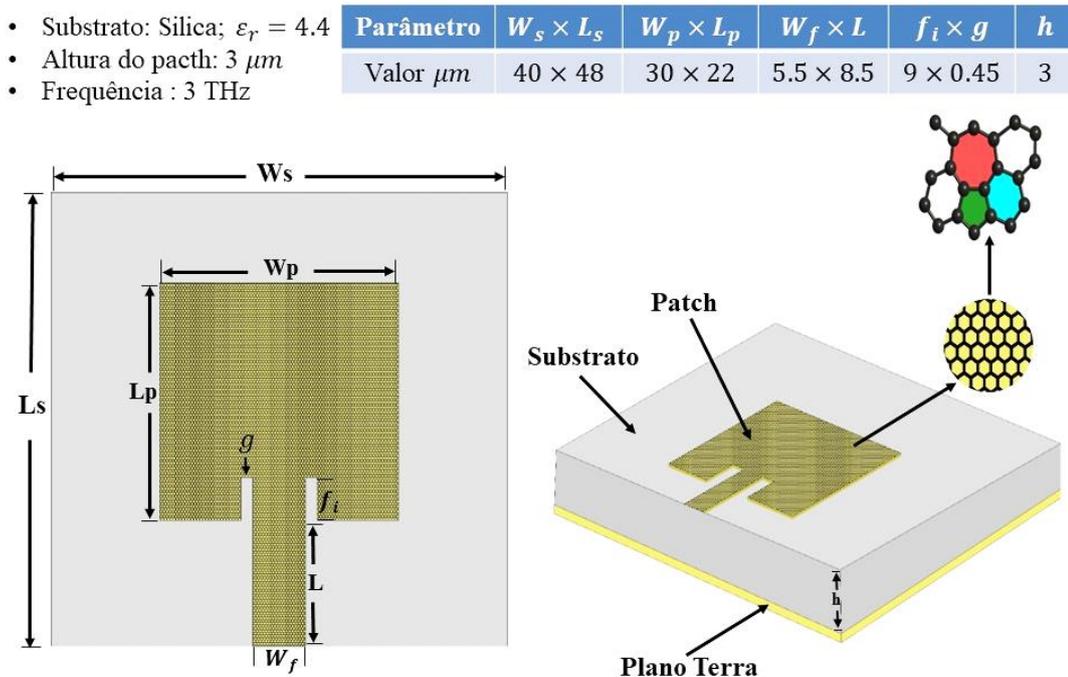
Portanto, neste capítulo foi tratado as principais definições que descrevem o método de expansão de ondas planas (PWE), que ajudam a criar estruturas periódicas com diversas periodicidades, quadrada, hexagonal, triangular dentre outros formatos possíveis que sejam definidos pelos vetores de rede. É um método que tem grande eficiência e computacionalmente rápida para estruturas de formato simples, porém para estruturas com design mais complexo, não-lineares, com efeitos dispersivos ou que tenha uma periodicidade modificadas por dentro da estrutura geral, é mais conveniente usar outra metodologia, que é método das diferenças finitas no domínio do tempo (FDTD) *Finite-difference time-domain method*.

O próximo capítulo, é apresentado as simulações e os resultados explorando as propriedades do PHA para viabilizar o designer de uma antena *Pacth*.

## 5. Simulações e resultados

Para melhor compreensão dos resultados, este capítulo é organizado em duas seções, onde a primeira parte, apresenta as projeções das duas antenas de microfita, visto que uma das antenas foi feita com o PHA, no qual o objetivo é fazer um termo comparativo entre elas. Já na segunda seção, mostra mais três antenas de Phagrafeno com variações em suas estruturas.

O elemento usado no substrato nas simulações foi o material conhecido Sílica ( $\text{SiO}_2$ ), onde Bala e Marwaha [51], estudaram esse material para uma projeção de uma antena que ressoasse em THz, no qual o mesmo tem uma permissividade elétrica relativa de 4.4. Confeccionou-se o plano terra com cobre e para calcular os parâmetros de design das antenas, se utilizou o equacionamento apresentado no capítulo 2, por meio do software GNU Octave [52]. Após isso, as antenas foram desenhadas e simuladas no programa COMSOL 5.4, afim de comparar o desempenho do PHA com o GRA no Patch de uma antena microfita, validando os resultados obtidos. A Figura 5.1 apresenta o designer da antena e seus parâmetros.

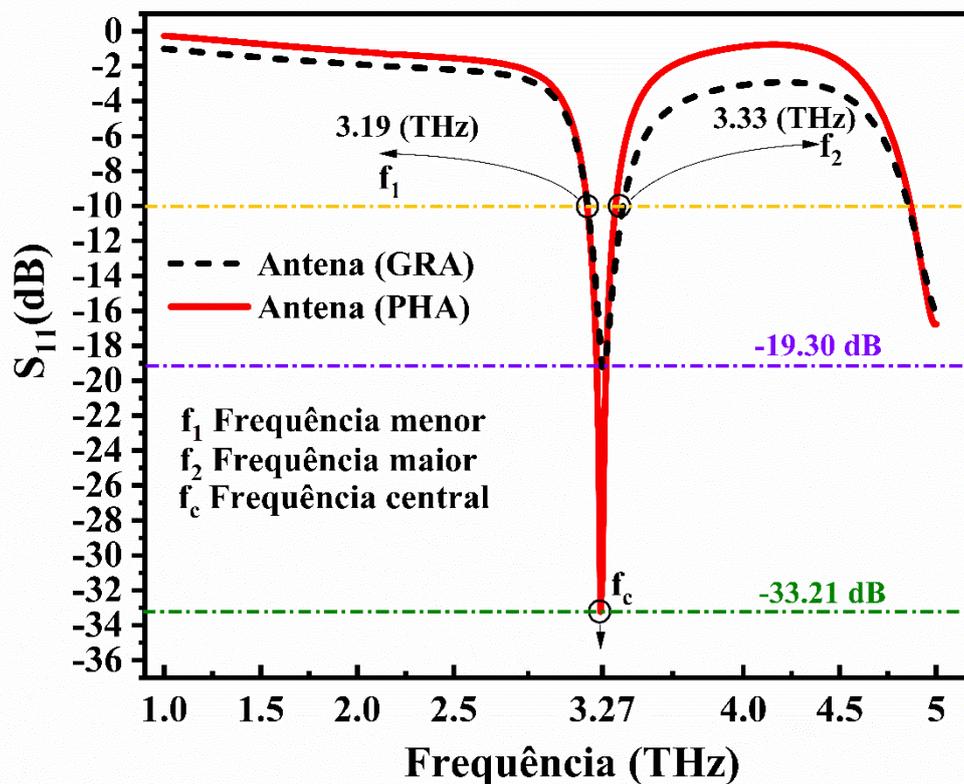


**Figura 5.1** – Designer da antena: Patch da antena com o material PHA onde o círculo em amarelo formado por uma rede de anéis caracteriza o PHA depositado no substrato.

A escolha de empregar a sílica no substrato, é devido ser um material muito utilizado nas antenas de microfítas, pois é um elemento relativamente barato e de fácil obtenção [6]. A seção a seguir trata os resultados das antenas de GRA e a antena de PHA.

### 5.1 Resultados da Antena de Grafeno e Phagrafeno.

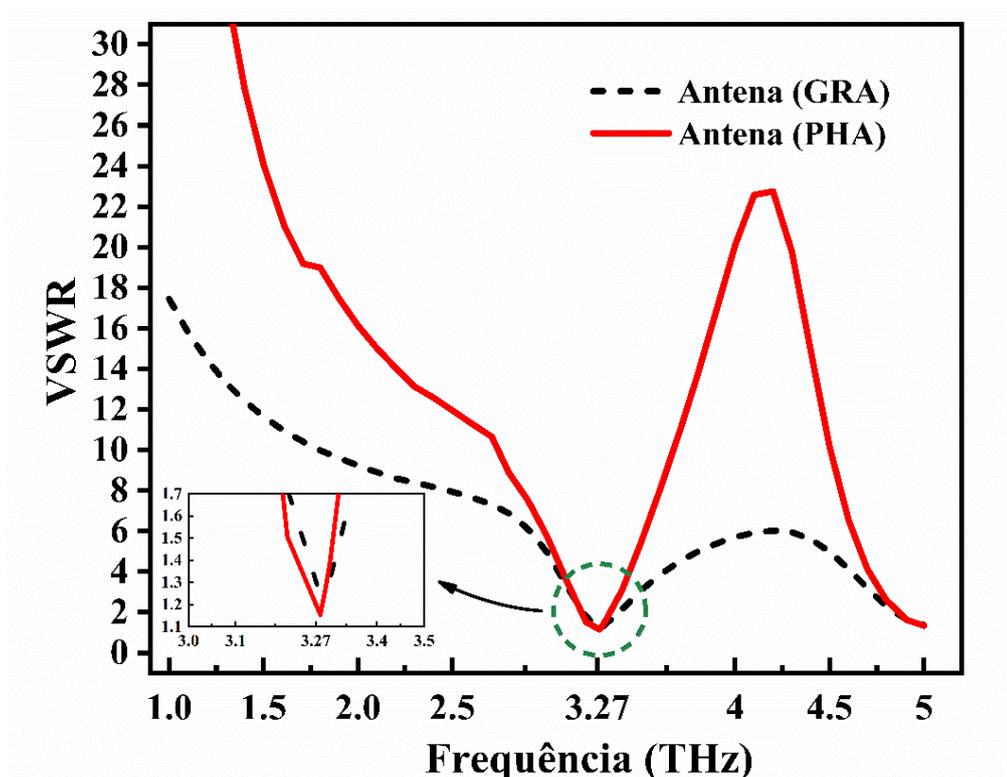
Após a realização das simulações no COMSOL, a figura 5.2 apresenta os resultados do coeficiente de reflexão das antenas ( $S_{11}$ ).



**Figura 5.2** – Coeficiente de Reflexão  $S_{11}$  das antenas de GRA e PHA: As linhas lilás e verde destacam o valor de coeficiente de reflexão, enquanto a linha amarela, é a delimitação empregada pela literatura para a largura de Banda em -10 dB.

Os resultados das antenas foram analisados na janela de operação de 1 a 5 THz, onde a partir da figura 5.2, é possível verificar que ambas tiveram dois pontos de ressonância: o primeiro na frequência de 3.27 THz, já o segundo foi em 5 THz. Além disso, gráfico apresenta valores reduzidos de coeficiente de reflexão da antena de GRA em -19.30 dB. confirmado que o PHA é o mais estável nessa janela de operação da frequência com  $S_{11}$  em -33.21 dB, ambas antenas possuem larguras de bandas para a frequência THz.

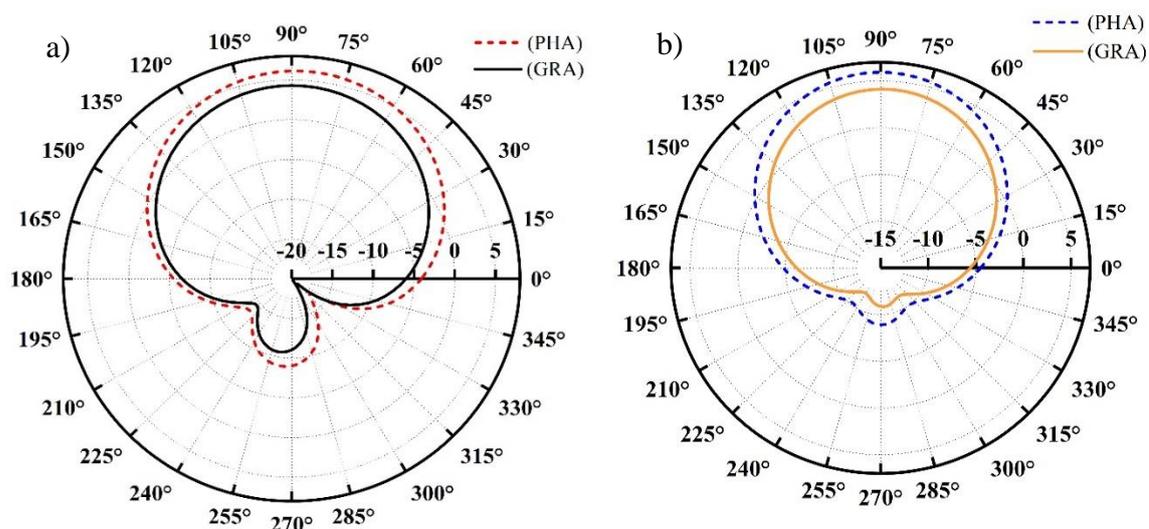
O parâmetro VSWR é a medida que diz o quão bem correspondeu o casamento da linha de alimentação com a antena, em que uma combinação perfeita entre eles resultaria em um VSWR igual a 1.0 [53].



**Figura 5.3** – Análise dos resultados é feita para os valores próximos de 1.0 de VSWR na faixa de frequência de 3.27 THz: Para o GRA é 1.24 VSWR e para o PHA 1.04 VSWR, como observado no *insert* da figura.

A Figura 5.3, mostra o resultado VSWR, em relação a frequência central 3.27 THz, nota-se que o grafeno possui um VSWR de 1.24, enquanto o Phagrafeno tem um de 1.04, onde seguindo o conceito, a antena PHA apresenta um melhor casamento entre a linha de alimentação e antena.

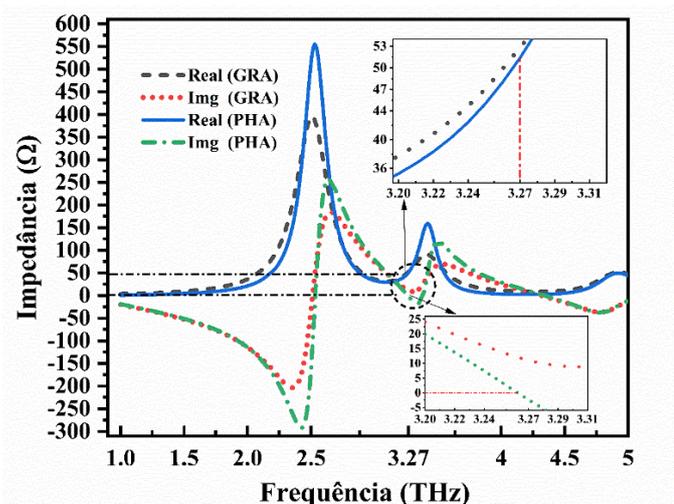
A Figura 5.4, mostra o padrão de radiação das antenas simuladas, na frequência ressoante, onde apesar de terem valores diferentes de alcance, é notável que são onidirecionais, pois aparece pequenos lóbulos de intensidades. A figura 5.4 (a), mostra o diagrama direcional do plano E, enquanto a figura 5.4 (b), apresenta o plano H.



**Figura 5.4** – a) Resultado da Simulação do ganho Plano E, linha cor vermelha indica os resultados da antena PHA, a cor preta é referente a antena GRA. b) Resultado da simulação do ganho Plano H, a de cor azul indica antena PHA e a de cor laranja indica antena GRA.

É notável que ambos os gráficos possuem duas deformações, onde na figura 5.4 a) tem a primeira deformação no ângulo de 215°, e a segunda 310°. Entretanto, os resultados da figura 5.4 b), mostram suas deformações respectivamente em 230° e 300°. A diferença entre a antena GRA e a antena PHA, é que valores visto na tabela 5.1, revelam que o PHA dispõe de um maior alcance.

Outro parâmetro importante para analisar a eficiência de uma antena através dos gráficos de impedância. A figura 5.5 apresenta os resultados dessa característica. É válido ressaltar que para uma antena perfeita, a parte real da impedância deve ser 50  $\Omega$ , e a parte imaginária ser 1  $\Omega$  [54-55]. A tabela 5.1 destaca que o PHA na frequência ressoante, possui melhores valores, uma vez que a parte real da impedância é de 51.39  $\Omega$ , e a parte imaginária é de 2.37  $\Omega$ , enquanto o GRA respectivamente possui valores de 49.86  $\Omega$  e -12.39  $\Omega$ .



**Figura 5.5** – Impedância  $\Omega$  da antena exibindo sua parte real e a imaginária das antenas: O *insert* superior evidencia que para 3.27 THz as impedâncias reais do (PHA) e (GRA) estão próximas de 50  $\Omega$ . O *insert* inferior evidencia que para 3.27 THz a impedância mais próxima de 0  $\Omega$  e a do Phagrafeno parte imaginária, linha de cor verde.

A impedância real do GRA é de 49.86  $\Omega$  enquanto da PHA é de 51.39  $\Omega$ . A parte imaginária são respectivamente -12.39  $\Omega$  e 2.37  $\Omega$ . Portanto, diante dos resultados analisados verificamos a viabilidade de utilizar o PHA no *Patch* de uma antena de microfita, para a operação da frequência THz. Com os resultados foi notado que quando comparado com o grafeno o PHA possui uma maior estabilidade. A parti disso, foi feito variações na antena de PHA, onde a seção seguir apresentará os resultados das demais antenas.

A tabela 5.1 apresenta os valores dos parâmetros de projeção das antenas de GRA e de PHA encontrados e usados nas simulações das antenas.

**Tabela 5.1** – Tabela Antena (GRA) Antena (PHA):Valores dos parâmetros:  $S_{11}$ (dB), VSWR, Ganho e Impedância (dB).

Parâmetros	Antena (GRA)		Antena (PHA)	
$S_{11}$ (dB)	-19.30		-33.21	
VSWR	1.24		1.04	
Ganho (dB)	Ganho E-plane	4.29	Ganho E-plane	5.93
	Ganho H-plane	-6.18	Ganho H-plane	-4.77
Impedância	Real	49.86	Real	51.39
	Imaginária	-12.39	Imaginária	2.37

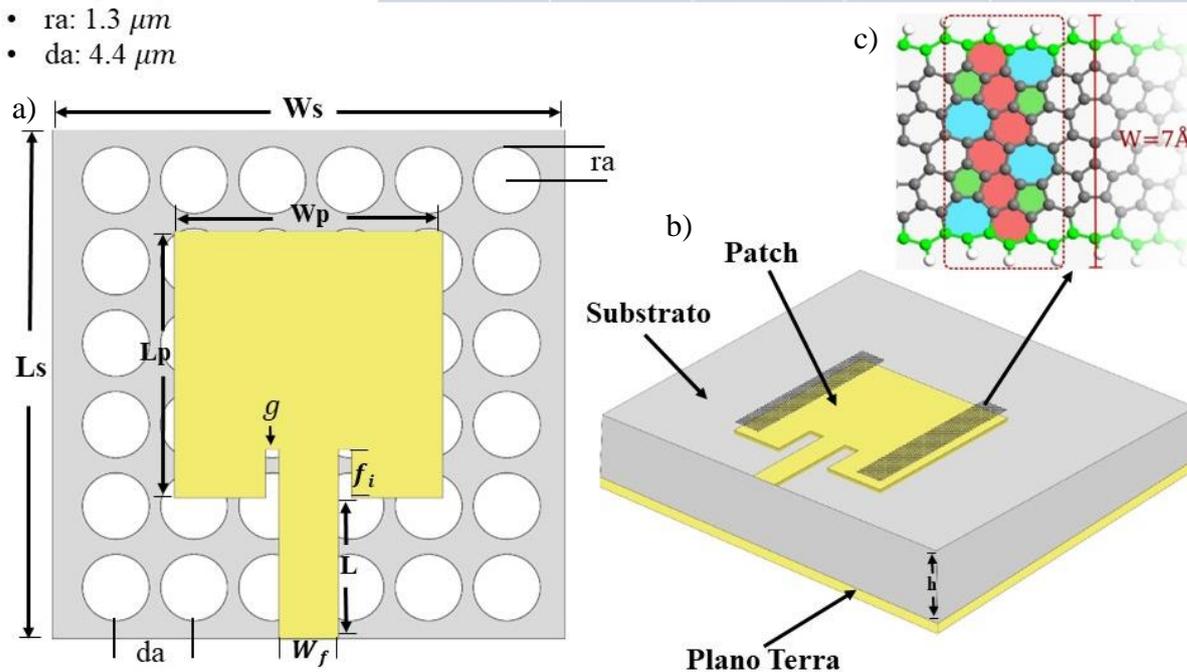
## 5.2 Resultados das Variações da antena Phagrafeno

Diante dos resultados obtidos na seção 5.1, foram feitas variações no designer da antena de PHA, dentre as antenas simuladas na seção 5.2 é apresentado mais três tipos, uma com estruturas periódicas, sendo uma com furos de ar, como mostra figura 5.6 a), outra foram adicionados duas *Nanofitas* de PHA, nas bordas do *Patch* da antena, como ilustra figura 5.6 b).

Por fim, a última antena projetada e a junção das duas variações, ou seja, possui estruturas periódicas com *Nanofitas* na borda de seu *patch*, como apresenta a figura 5.7 d). A parti dos resultados, é compreendido qual a proposta de cada uma delas e como foram projetadas em cada antena.

- Substrato: Silica;  $\epsilon_r = 4.4$
- Altura do pacth:  $3 \mu m$
- Frequency: 3 THz
- ra:  $1.3 \mu m$
- da:  $4.4 \mu m$

Parâmetro	$W_s \times L_s$	$W_p \times L_p$	$W_f \times L$	$f_i \times g$	$h$
Valor $\mu m$	$40 \times 48$	$30 \times 22$	$5.5 \times 8.5$	$9 \times 0.45$	3

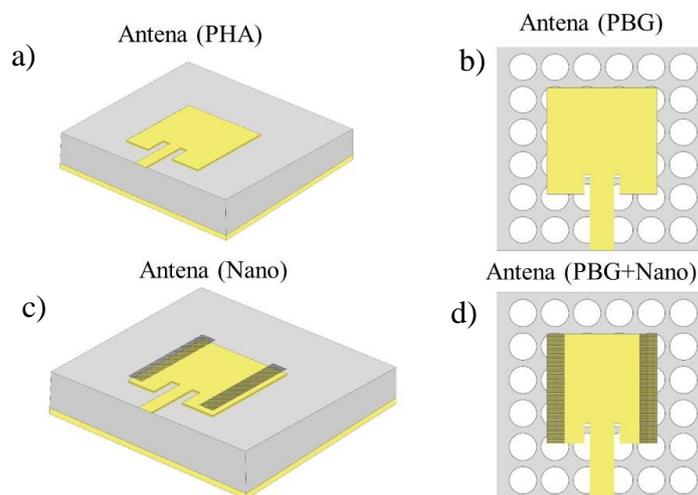


**Figura 5.6** – Designs das variações das antenas. a) modelo da antena PBG, b) modela da antena Nano, c) Estrura da Nanofita *Ziguezague*, ou seja, propriedade condutora tipo metálica usada nas simulações que teve o corte na rede cristalina na direção x e largura de  $7 \text{ \AA}$ .

A largura da Nanofita *Ziguezague* foi baseada no trabalho de Yuan *et al.*, [56], onde se investigou propriedades eletrônicas em função da variação da largura das nanoestruturas. O anexo 3 trabalha conceitos que contribuem para entendimento e que auxiliam na análise dos resultados, além disso, ajuda a ter uma melhor compreensão da aplicação do capítulo 4.

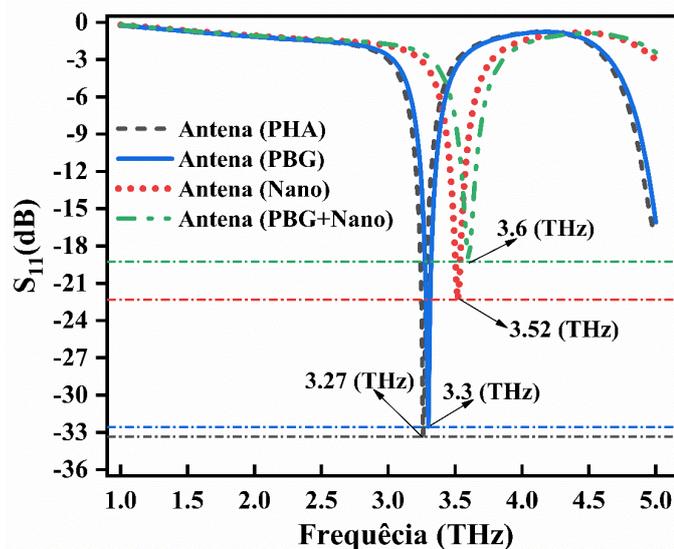
### 5.2.2 Resultados e discussões: Antena PHA, Antena PBG, Antena Nano e Antena PBG+Nano.

Para um bom entendimento dos resultados, a figura 5.7, ilustra os tipos de antenas



**Figura 5.7** – a) Design da Antena de Phagrafeno (Antena PHA), b) Antena de Phagrafeno com estrutura periódica (Antena PBG), c) Antena de Phagrafeno com *Nanofitas* (Antena Nano), e d) Antena de Phagrafeno com estrutura periódica e *Nanofitas* (Antena PBG+Nano).

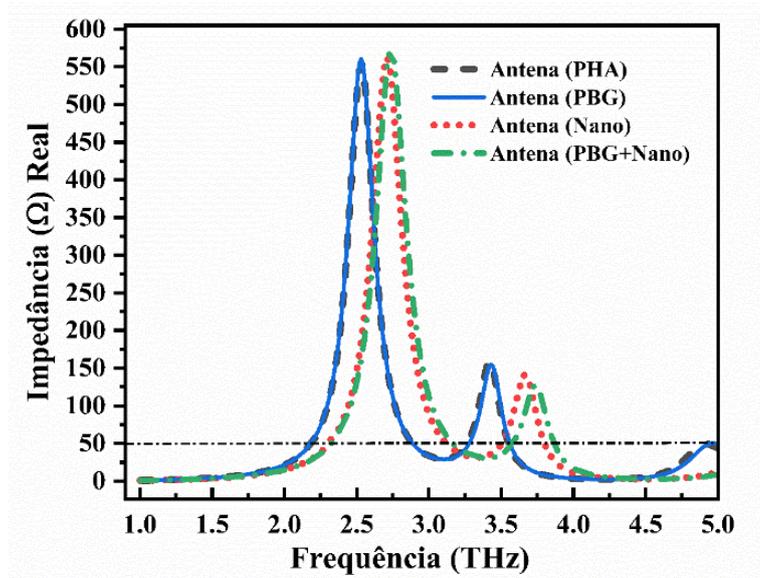
Após as simulações realizadas no COMSOL, a figura 5.8 apresenta os resultados de coeficiente de reflexão das quatro antenas.



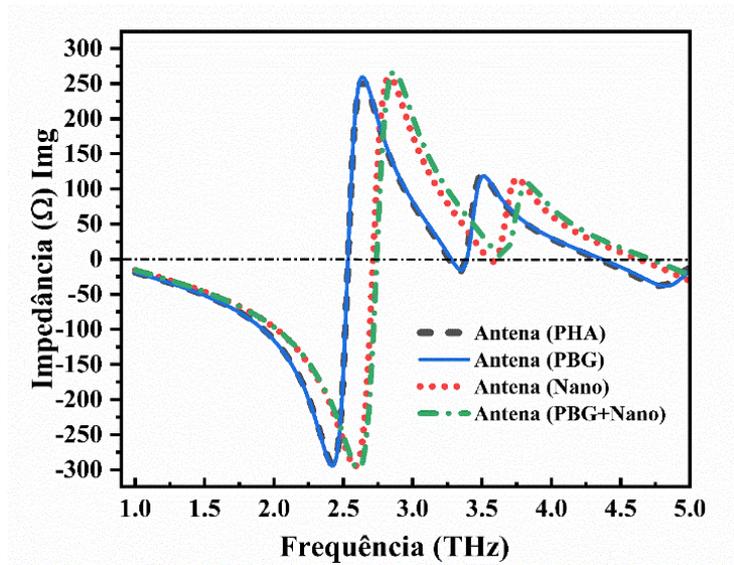
**Figura 5.8** – Resultado do Coeficiente de Reflexão, apresentando as frequências ressoantes da Antena PHA, Antena PBG, Antena Nano e Antena PBG+Nano. As linhas tracejadas coloridas destacam o valor de coeficiente de reflexão ( $S_{11}$ ) de cada antena.

Com a figura acima é notável que o emprego dessas variações no designer da antena de Phagrafeno alteram a frequência de ressonância, antena PBG, que possui estruturas periódicas com furos de ar mudou para 3.3 THz, antena Nano modificou para 5.2 THz e a antena PBG+Nano, modificou para 3.6 THz, mas por outro lado é possível verificar que essas antenas apresentaram valores reduzidos de coeficiente de reflexão em relação à antena PHA. Apesar disso, as larguras de banda são suficientemente adequadas para THz.

Na figura 5.9, apresenta os valores de impedância real, já na figura 5.10 pode-se observar os valores de impedância imaginária das antenas simuladas. Por meio dessas figuras foi analisado que as antena PHA e PBG apresentaram os valores de impedância bem próximos de  $50 \Omega$  em 3.3 THz, enquanto antena Nano e Nano+PBG, deslocaram suas frequências de ressonância para 3.52 THz e 3.6 THz. Os valores de impedância imaginária demonstraram os mesmos comportamentos para  $0 \Omega$ .

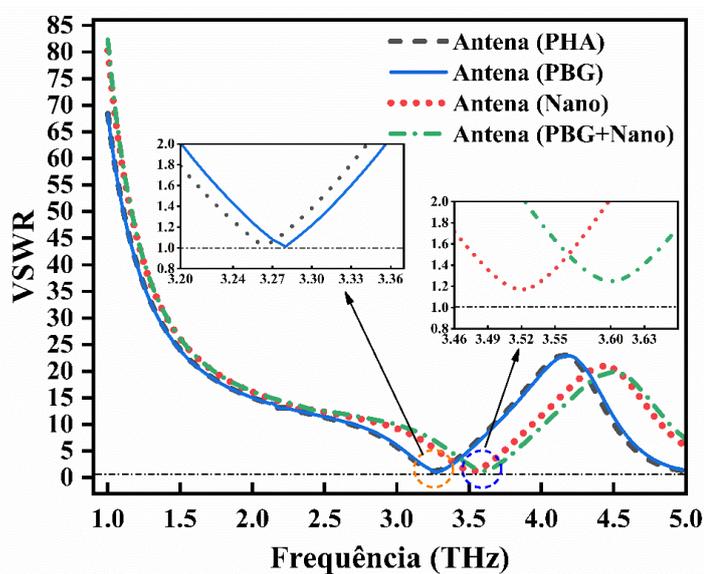


**Figura 5.9** – Resultado da Impedância Parte Real. O gráfico mostra a impedância de cada antena e é analisado em suas respectivas frequências centrais.  $50 \Omega$  é valor que de acordo com a literatura significa uma impedância perfeita.



**Figura 5.10** – Resultado Impedância Parte Imaginária. Lembrando que  $0 \Omega$  é a amplitude apresentada pela literatura para uma antena perfeita.

Para enriquecer os resultados mostrados das impedâncias, a figura 5.13, mostra o parâmetro VSWR, como já dita anteriormente diz o quão bem correspondeu o casamento da linha de alimentação com antena, onde foi analisado que na frequência ressonante de cada antenas seguir o conceito teórico, sendo valores próximos de 1.0.



**Figura 5.13** – Resultado da Simulação do VSWR. O gráfico mostra os de valores de VSWR de cada antena, onde é analisado em suas respectivas frequências ressoantes. As antenas possuem os seguintes valores: A antena PHA 1.04, Antena PBG 1.11, Antena Nano 1.16 e a Antena PBG+Nano 1.24.

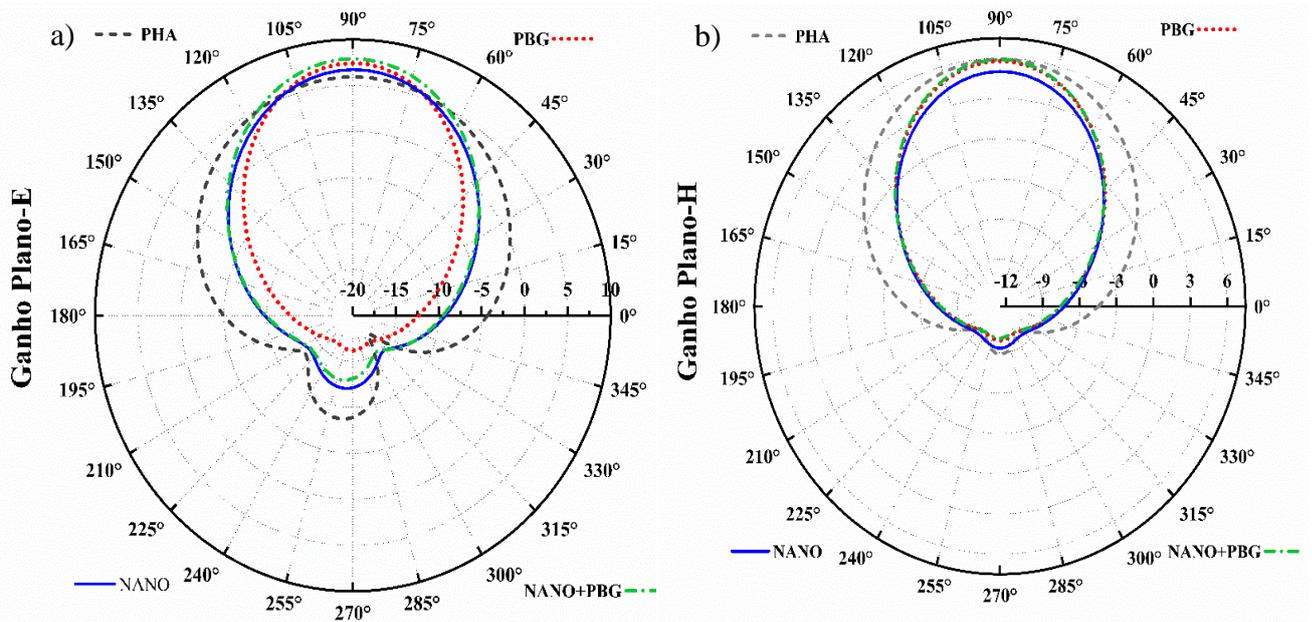
Os valores acima revelam a eficiência de cada antena simulada. A antena PHA e PBG, apresentam melhores alcances e possuem maiores coeficiente de reflexão, onde é possível notar que elas têm um melhor casamento de impedâncias, pois os valores obtidos são próximo de  $50 \Omega$  e  $0 \Omega$ .

A Tabela 5.2 apresenta os valores de coeficiente de reflexão ( $S_{11}$ ), VSWR, ganho (G), e impedância ( $\Omega$ ) obtidos das variações de antenas de Pha.

**Tabela 5.2** – Valores dos parâmetros:  $S_{11}$ (dB), VSWR, Ganho e Impedância (dB) para as antenas PHA, PBG, Nano e PBG+Nano.

Parâmetros	Antena PHA		Antena PBG		Antena Nano		Antena PBG+Nano	
$S_{11}$ (dB)	-33.21		-32.06		-21.18		-19.14	
VSWR	1.04		1.11		1.16		1.24	
Ganho (dB)	Plano-E	5.93	Plano-E	1.60	Plano-E	1.53	Plano-E	1.61
	Plano-H	-4.77	Plano-H	0.44	Plano-H	0.42	Plano-H	0.42
Impedância $\Omega$	Real	51.39	Real	55.19	Real	58.53	Real	56.35
	Img	2.37	Img	6.12	Img	-6.39	Img	9.92

Finalmente, os diagramas de radiação 2-D das antenas apresentam o comportamento dos campos radiados. A figura 5.14 a) e 5.14 b), mostram a similaridade dos resultados obtidos para o ganho, no Plano-E e Plano-H, onde há pequenas diferenças de alguns lóbulos e intensidades. Apesar disso, vemos que as antenas PBG, Nano e Nano+PBG possuem diagrama direcional no plano E no plano H, e quando comparado com a antena PHA, é notável que ela tem uma maior deformação.



**Figura 5.14** – a) Ganho Plano-E, b) Ganho Plano-H. A linha cor Cinza indica os resultados da antena (PHA), a vermelha é referente a antena (PBG), a de cor azul é sobre antena (Nano) e a de cor verde é da antena (PBG+Nano).

## 6. Considerações Finais

Nesse trabalho foi analisado a viabilidade de utilizar o PHA no patch de uma antena de microfita, para a operação da frequência THz. Para isso foi necessário calcular as suas propriedades ópticas, através da metodologia do DFT usando o pacote SIESTA. Para simulação foi utilizado o software COMSOL, aplicando no substrato o material Sílica ( $\text{SiO}_2$ ), com permissividade elétrica relativa 4.4 e além disso, se alternou o material do patch da antena, para termo de comparação entre o GRA e PHA. A partir dos resultados apresentados, se chega as seguintes conclusões: Foi mostrado a diferença entre o GRA e PHA, analisando e comparando as propriedades ditas acima. Na projeção das antenas, também foi mostrado que o PHA possui uma maior estabilidade no range de 1 THz a 5 THz, pois apresentou um coeficiente de reflexão de -33.22 dB, um ganho no plane-E de 5.93 dB e VSWR de 1.04, enquanto o GRA apresentou um coeficiente de reflexão de -19.30 dB, um ganho no plane-E de 4.29 dB e um VSWR de 1.24. Diante disso, é evidente que a aplicação do PHA se mostrou mais interessante nessa faixa de frequência.

Com o resultado satisfatório da antena de microfita de PHA, foi analisado a viabilidade aplicar ainda, estruturas periódicas no substrato da antena, do tipo furos de ar em rede quadrada e adicionar *Nanofitas* de PHA nas bordas do *Patch*. Portanto o uso dessas variações mostrou-se interessante para as aplicações nessa faixa de frequência por obter resultados bons, abrindo um leque de aplicabilidade, por exemplo, para uma comunicação entre celulares, a antena PHA teria uma grande utilidade, pois oferece um coeficiente de reflexão de -33.22 (dB), onde segundo Bingo hui (2021), um link em 3 THz, terá um caminho de perda adicional de 20 (dB), ou seja, a antena PHA conseguiria concluir a transmissão de dados [57].

### 6.1 Propostas para trabalhos Futuros

Além dos resultados apresentados, se tem como propostas para futuros trabalhos:

- Analisar estruturas periódicas com o substrato do tipo estrutura de *cogumelos*.
- Analisar estruturas periódicas por meio do método das diferenças finitas no domínio do tempo (FDTD).
- Estudar outras estruturas 2-D a base de Carbono.

## Referências

- [1] HENRY, S.A.; AHMED, A.; SOUSA E.S. **5g is real**: Evaluating the compliance of the 3GPP 5G new radio system with the itu imt-2020 requirements. *IEEE Access*, V. 8, pp. 42828-42840, 2020.
- [2] AKYILDIZ, I.F.; JORNET, J.M.; HAN, C. **Terahertz band**: Next frontier for wireless communications. *Physical Communication*, V.12 pp. 16-32, 2014.
- [3] PIESIEWICZ, R.; OSTMANN, T.K.; KRUMBHOLZ, D.M.; MITTLEMAN, D.; KOCH, M.; SCHOEBEL, J.; KURNER, T. **Short-range ultra-broadband terahertz communications**: Concepts and perspectives. *IEEE Antennas and Propagation Magazine*, V. 49, pp. 24-39, 2008.
- [4] SOUSA, F.M.; DE SOUZA, F.B.; MIRANDA, I.R.S.; OLIVEIRA, J.E.; JUNIOR, W.P.; COSTA, M.B.C. **Graphene patch antenna with lateral edges defined by armchair or zigzag structures and pbg substrate**. *Journal of Computational Electronics*, V. 19, pp. 700-708, 2020.
- [5] SONG, H.J.; NAGATSUMA, T. **Present and future of terahertz communications**. *IEEE transactions on terahertz science and technology*. *IEEE transactions on terahertz science and technology*, V.1, pp. 256-263, 2011.
- [6] MIRANDA, I.R.S.; SOUSA F.M.; DE SOUSA F.B.; COSTA, M.B.C. **Microstrip antennas improved with periodic structures for 5g**. In *BTSym 2020 Proceedings, Laboratory of Visual Communications*, V.1, 2020.
- [7] AZEVEDO, R.G.; DA COSTA, K.Q.; SOARES, F.B. **Antena de Grafeno composta com largura de banda controlável pelo potencial químico**. *XXXIV Simpósio Brasileiro de Telecomunicações, SBrT2016*, 2016.
- [8] LAVADIYA, S.P.; PATEL, S.K.; MARIA, R. **High gain and frequency reconfigurable copper and liquid metamaterial tooth based microstrip patch antenna**. *International Journal of Electronics and Communications*, V. 137, p. 153799, 2021.

- [9] WANG, Z.; ZHOU, X.; ZHANG, X.; ZHU, Q.; DONG, H.; ZHAO, M.; OGANOV, A.R. **Phagraphene: A low-energy graphene allotrope composed 7 carbon rings with distorted Dirac Cones**. Nano Letters, V. 15, pp. 6182-6186, 2015.
- [10] ZIOLKOWSKI, R. W. **1987 IEEE AP Distinguished Achievement Awardee, Prof. Georges A. Deschamps, A True Gentleman and Distinguished Scholar**. IEEE International Symposium on Antennas and Propagation & USNC/URSI National Radio Science Meeting, V. 5, pp. 653-654, 2017.
- [11] NAUWELARES, B.; CAPELLE, A.V. **Surface wave losses of rectangular microstrip antenas**. Electronisc Letters, V. 11, pp. 696-697, 1989.
- [12] SCHAUBERT, D.H.; POZAR, D.M.; ADRIAN, A. **Effect of Microstrip antena substrate thickness and permittivity: Comparison of Theories with experimete**. IEEE Transactions on antennas and propagation, V. 37, pp. 677-682, 1989.
- [13] SING, D.; GARDNER, P.; HALL, P.S. **Miniaturised Microstrip antenna for MMIC applications**. Electronics Letters, V. 33, pp. 1830-1831, 1997.
- [14] BASILIO, L.I.; KHAYAT, M.A.; WILLIAMS, J.T.; LONG, S.A. **The dependence of the Input Impedance on Feed Position of Probe and microstrip Line-Fed Patch antenas**. IEEE Transactions on antennas and propagation, V. 49, pp. 45-47, 2001.
- [15] DE OLIVEIRA, E. E.C.; SILVA, P. H. F.; CAMPOS, L.P.S.; SILVA, S.G. **Overall size antenna reduction using fractal elements**. Microwave and optical technology letters, V. 51, pp. 671-675, 2009.
- [16] OLIVEIRA, E.E.C.; SILVA, P.H.F.; CAMPUS, A. L. P. S.; ASSUNÇÃO, A. G. D. **Small-size quasi-fractal patch antenna using the Minkowski Curve**. Microwave and optical technology letters, V. 52, pp. 805-809, 2010.
- [17] NOVOSELOV, K.S.; GEIM, A.K.; MOROZOV, S.V.; JIANG, D.; ZHANG, Y.; DUBONOS, S.V.; GRIGORIEVA, I.V.; FIRSOV, A.A. **Electric field in atomically thin carbon films**. Science, V. 306, pp. 666-669, 2004.
- [18] TAMAGNONE, M.; MOLDOVAN, C.; POUMIROL, J.M.; KUZMENKO, A.B.; LONESCU, A.M.; MOSIG, J.R.; CARRIER, J.P. **Near optimal graphene terahertz non-reciprocal isolator**. Nature Communications, V. 7, p. 11216, 2016.

- [19] LLATSER, I.; KREMERS, C.; APARICIO, A.C.; JORNET, J.M.; ALARCÓN, E.; CHIGRIN, D.N. **Graphene-based nano-patch antenna for terahertz radiation**. *Photonics and Nanostructures-Fundamentals and Applications*, V. 10, pp. 353-358, 2012.
- [20] ZHOU, T.; CHENG, Z.; ZHANG, H.; BERRE, M.; MILITARU, L.; CALMON, F. **Miniaturized tunable terahertz antenna based on graphene**. *Microwave and optical technology letters*, V. 56, pp. 1792-1794, 2014.
- [21] NISIOKA, K.R.; FELIPE, R.F.; CÔRREA, S.M.; DOS SANTOS, J.C.; DEL NERO, J.; DA SILVA, C.A.B.J. **Junções moleculares de nanofitas de grafeno e phagrapheno: Um estudo via DFT e EHT/NECF**. 72º Congresso Anual da ABM, V. 72, 2017.
- [22] DA SILVA, C.A.B.J.; CÔRREA, S.M.; DOS SANTOS, J.C.S.; NISIOKA, K.R.; MOREIRA, M.M.; WANG, Y.P.; DEL NERO, J.; CHENG, H. P. **Topological insulator-metal transition and molecular electronics device based on zigzag Phagraphene nanoribbons**. *Jornal Of Applied Physics*, V. 124, n. 8, 2018.
- [23] XIE, Y.; QUIN, X.F. **First-principles calculations of the optical Properties of Phagraphene**. *Modern Physics Letters B*, V. 36, p. 2250119, 2022.
- [24] BODNAR, D.G. **IEEE Standard Definitions of Terms for antennas**. *IEEE Antennas and Propagation Society*, V. 145, p. 145, 1993.
- [25] BALANIS, C.A. **Advanced Engineering Electromagnetics**. John wiley & sons, Ed. 2, 2012.
- [26] BALANIS Constantine A. **Antenna theory: analysis and design**. John wiley & sons, Ed. 4, 2016.
- [27] STUTZMAN, Warren L. **Antenna Theory and Design**. John wiley & sons, Ed.2, 1997.
- [28] PANDEY, A. **Practical Microstrip and Printed Antenna Design**. Artech House, Ed. 1, 2019.
- [29] GEIM, A.K.; NOVOSELOV, K.S. **The Rise of Graphene**. *Nature Materials*, V. 6, pp. 183-191, 2007.
- [30] KROTO, H.W.; HEATH, J.R.; O'BRIEN, S.C.; CURL, R.F.; SMALLEY, R.E.C. **This Week's Citation Classic**. *Nature*, V. 318, p. 22, 1985.

- [31] NOVOSELOV, K.S.; GEIM, A.K.; MOROZOV, S.V.; JIANG, D.; KATSNELSON, I.; GRIGORIEVA, I.V.; DUBONOS, S.V.; FIRSOV, A.A. **Two-dimensional gas of massless Dirac Fermions in Graphene**. Nature Letters, V. 438, pp. 197-200, 2005.
- [32] MALKO, D.; NEISS, C.; VIÑES, F.; GORLING, A. **Competition for Graphene: Graphynes with Direction-Dependent Dirac Cones**. Physical Review Letters, V. 108, p. 86804 2012.
- [33] PEREIRA, L.F.C.; MORTAZAVI, B.; MAKAREMI, M.; RABCZUK. **Anisotropic thermal conductivity and mechanical Properties of Phagraphene: a molecular dynamics study**. RCS Advances, V. 6, pp. 57773-57779, 2016.
- [34] FARZADIAN, O.; YOUSEFI, F.; SPITAS C.; KOSTAS, K.V. **Phonon heat transport in tow-dimensional Phagraphene-graphene superlattice**. International Journal of heat and mass transfer, V. 182, p. 121917, 2022.
- [35] JANA, D.; CHAKRABORTI, A.; CHEN, L.C.; CHEN, C.C.; CHEN, K.H. **First principles calculations of the optical Properties of  $C_xN_y$  single walled nanotubes**. Nanotechnonology, V. 20, p. 175701, 2009.
- [36] DHAR, N.; JANA, D. **Effect of beryllium doping and vacancy in band structure, magnetic and optical Properties of free standing germanene**. Current Applied Physics, V. 14, pp. 1589-1600 2017.
- [37] MENGLE, K.A.; SHI, C.; BAYERL, D.; KIOUPAKIS, E. **First-principles calculations of the near-edge optical Properties of  $\beta - G_{a2}O_3$** . Applied Physics Letters, V. 109, n. 126, 2016.
- [38] FERREIRA, D.F.S.; MOREIRA, M.M.; SILVA, A.S.; MADUREIRA, L. M. P.; BEIRÃO, A.T.M.; MIRANDA, I. R.S.; SILVA Jr, C.A.B.; CARAMORI, G.F.; DEL NERO, J. **Analysis of structural, optical, electronic and transport Properties in undoped, hydrogenated, doped and rotated pentahexoctite systems**. Physica E, V. 144, p. 115468, 2022.
- [39] XIE, Y.; QUIN, X.F. **First-principles calculations of the optical Properties of Phagraphene**. Mordern Physics Letters B, V. 36, p. 2250119, 2022.
- [40] SINGH, D.H. **Adequacy of the local-spin-density approximation for Gd**. Physical Review B, V. 144, p. 7451, 1991.

- [41] KATSNELSON, M.I.; LICHTENSTEIN, A.I. **Magnetic susceptibility, Exchange interactions and spin-wave spectra in the local spin density approximation.** Journal of Physics: Condensed Matter, V. 16, p.7439, 2004.
- [42] SIPE, J.E. **Nonlinear optical response of semiconductors in the independent-particle approximation.** Physical Review B, V. 48, p. 11705, 1993.
- [43] SANTHIBHUSHAN, B.; SONE, M.; SRIVASTAVA, A. **Optical Properties of boron-group (V) hexagonal nanowires: DFT investigation.** Pramana- Journal of Physics, V. 89, pp. 1-9, 2017.
- [44] JANA, D.; CHEN, L.C.; CHEN, C.W.; CHATTOPADHYAY, S.; CHEN, K.H. **A first principles study of the optical Properties of  $B_xC_y$  single wall nanotubes.** Elsevier Carbon, V. 45, pp. 1482-1491, 2007.
- [45] FALKOVSKY, L.A. **Optical Properties of graphene and IV-VI semiconductors.** Physics of our Day, V. 51, p. 887, 2008.
- [46] SUKHOIVANOV, I.A.; GURVEY, I.V. **Photonic Crystals: Physics and practical modeling.** Springer, V. 152, 2009.
- [47] YABLONOVITCH, E. **Inhibited Spontaneous Emission in Solid-State Physics and Electronics.** Physical Review Letters, V. 58, p. 2059, 1987.
- [48] JOANNOPOULOS, J.D.; JOHNSON, S.G.; WINN, J.N.; MEADE, R.D. **Photonic Crystals: Molding the Flow of light.** Princeton University Press, 2011.
- [49] RUMPF, R.C. **Chapter Three – Engineering the dispersion and anisotropy of periodic electromagnetic structures.** Solid State Physics. Academic Press, V. 66, pp. 213-300, 2015.
- [50] KITTEL, C. **Introduction to Solid State Physics.** John wiley & sons, Ed. 1, 2018.
- [51] BALA, R.; MARWAHA, A. **Investigation of graphene based miniaturized terahertz antenna for novel substrate materials.** Engineering Science and Technology, na International Journal, V. 19, pp. 513-537, 2016.
- [52] SIEVENPIPER, D.; ZHANF, L.; BROAS R.; ALEXPOLOUS, N.G.; TABLANOVITCH, E. **High-impedance electromagnetic surfaces with a forbidden Frequency band.** IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques, V. 47, pp. 2059 -2074, 1999.
- [53] YANG, F.; RAHAMT-SAMII, Y. **Electromagnetic Band Gap Structures in Antenna Engineering.** Cambridge University Press, Ed. Ilustrada, 2008.

[54] REJA, A.A. **Study of Microdtrip Feed Line Patch antenna.** Eng &Tech. Journal, V. 27, pp. 355-361, 2009.

[55] LORD RAYLEIGH SEC, R.S. **On the maintenance of vibrations by forces of double Frequency, and on the prapagation of waves through a medium endowed with a periodic structure.** Philosophical Magazine, V. 24, pp. 145-159, 1887.

[56] YUAN, P.F.; FAN, Z.Q.; ZHANG, Z.H. **Magneto-electronic properties and carrier mobility in Phagraphene nanoribbons: A theoretical prediction.** Carbon, V. 124, pp. 228-237, 2017.

[57] HUI, H. **Terahertz Communications.** Offino, 2021.

## Anexos

Para uma melhor compreensão de cristais fotônicos é preciso entender determinados conceitos, como já dito anteriormente, o principal deles é sobre estruturas de bandas, onde esses elementos possuem estruturas por autoestado ou autofrequência com uma composição infinitamente periódica. Os anexos a seguir descrevem conceitos e descrições matemáticas que mostram o comportamento das ondas dentro do material.

### Anexo 1

#### A.1.1 Teoria eletromagnética

No anexo A, contém as equações de *Maxwell* (1.1 a 1.4) que descrevem os movimentos das ondas eletromagnéticas no espaço livre [26].

$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \quad (1.1)$$

$$\nabla \times \vec{H} = \vec{J} + \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} \quad (1.2)$$

$$\nabla \cdot \vec{D} = \rho \quad (1.3)$$

$$\nabla \cdot \vec{B} = 0 \quad (1.4)$$

onde  $\vec{E}$  e  $\vec{H}$  são os vetores campos elétricos e magnéticos dependentes do espaço e do tempo, e  $\vec{D}$  e  $\vec{B}$  são as densidades de deslocamento elétrico e magnético, respectivamente. Para obter a equação da continuidade (1.5) usa-se a relação  $\nabla \cdot \nabla \times \vec{H} = 0$  na equação (1.2)

$$\nabla \cdot \vec{J} = \frac{\partial \rho}{\partial t} \quad (1.5)$$

Em materiais com pouca condutividade ou sem, tem que  $\vec{J} = 0$  e  $\rho = 0$ . Logo as densidades de fluxo estão associadas com materiais e são descritas pelas equações 1.6 e 1.7

$$\vec{D} = \epsilon_0 \vec{E} + \vec{P} \quad (1.6)$$

$$\vec{B} = \mu_0 \vec{H} + \vec{M} \quad (1.7)$$

onde  $\vec{P}$  é o vetor polarização elétrica em um meio induzido por  $\vec{E}$  e  $\vec{M}$  é o vetor polarização magnética. Nesta pesquisa utilizaremos  $\vec{M} = 0$  devido a características não magnética da sílica, material usado no substrato das antenas projetadas.

A avaliação da polarização elétrica de um material, em geral não é algo trivial exigindo assim uma aproximação microscópica aplicado na mecânica quântica. Isso é necessário para altas frequências confinantes a frequência de ressonância dos materiais, no qual geralmente aparece fenômenos não-lineares. A polarização em materiais dielétricos lineares e isotrópico pode ser avaliada como uma resposta correspondente ao campo elétrico. Além disso, à medida que há deslocamento das ondas eletromagnéticas, há um carregamento de energia, passando a existir uma densidade de energia relacionada tanto com o campo elétrico quanto o magnético. Desse modo, o vetor *Poynting*  $\vec{S}$  dado pelo equação (1.8), descreve não só a quantidade de energia por unidade de área, como indica a direção de propagação da onda eletromagnéticas, onde os campos elétricos e magnéticos são sempre perpendiculares.

$$\vec{S} = \vec{E} \times \vec{H} \quad (1.8)$$

### A.1.2 Equação de onda

Com as equações de *Maxwell* apresentadas acima, pode-se ver que os campos  $\vec{E}$  e  $\vec{H}$  possuem uma interdependência, de maneira que as equações da onda são obtidas pela aplicação do rotacional nas equações 1.1 e 1.2, no qual é considerado um meio homogêneo  $\sigma = 0$ , como mostra as equações 1.9 e 1.10.

$$\nabla \times \nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial}{\partial t} (\nabla \times \vec{B}) \quad (1.9)$$

$$\nabla \times \nabla \times \vec{H} = \nabla \times \vec{J} + \frac{\partial}{\partial t} (\nabla \times \vec{D}) \quad (1.10)$$

usando a propriedade  $\nabla \times \nabla \times \vec{F} = \nabla(\nabla \cdot \vec{F}) - \nabla^2 \vec{F}$  na equação 1.9, se tem a 1.11

$$\nabla(\nabla \cdot \vec{E}) - \nabla^2 \vec{E} = -\mu \frac{\partial}{\partial t} \left( \vec{J} + \frac{\varepsilon \partial \vec{E}}{\partial t} \right) \quad (1.11)$$

e ainda sabendo que  $\nabla \cdot \vec{D} = \varepsilon \nabla \cdot \vec{E} = q \Rightarrow \nabla \cdot \vec{E} = \frac{q}{\varepsilon}$ , logo temos a equação 1.12

$$\nabla^2 \vec{E} = \nabla \frac{q}{\varepsilon} + \mu \frac{\partial \vec{J}}{\partial t} + \varepsilon \mu \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} \quad (1.12)$$

onde no meio livre de cargas ( $q = 0, \vec{J} = 0$ ) e sem perdas  $\sigma = 0$ , se obtém a 1.13

$$\nabla^2 \vec{E} = \varepsilon \mu \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} \quad (1.13)$$

Para campo o magnético, o processo é análogo chegando na equação 1.14

$$\nabla^2 \vec{H} = \varepsilon \mu \frac{\partial^2 \vec{H}}{\partial t^2} \quad (1.14)$$

No qual, elucidação geral da equação 4.13, possui características da equação 1.15

$$E(x, y, z, t) = a_+ E^+ (\vec{K} \cdot \vec{r} - \omega t) + a_- E^- (\vec{K} \cdot \vec{r} + \omega t) \quad (1.15)$$

de forma que  $\vec{K} = (K_x, K_y, K_z)$  é o vetor de onda,  $\vec{r} = (x, y, z)$  é o vetor posição e a frequência angular  $\omega \frac{2\pi}{\lambda}$ . O comportamento da onda no espaço e tempo é descrito pelas funções  $E^+$  e  $E^-$ , dados os argumentos  $(\vec{K} \cdot \vec{r})$  e  $(\omega t)$ . As amplitudes  $a_+$  e  $a_-$  são aspectos que dependem das condições de contorno. É válido ressaltar que o vetor da onda especifica o a direção de propagação e quantidade de onda, *i. e.*, ou seja, indica o número de oscilações por unidade de espaço dos campos elétricos e magnéticos em determinada direção ( $m^{-1}$ )[46]. Portanto, os elementos do vetor de onda formam os números de ondas nas direções  $x, y, z$  através da relação 1.16

$$\frac{\omega^2}{c^2} = K_x^2 K_y^2 K_z^2 \quad (1.16)$$

Com esse entendimento, a seguir é apresentado o comportamento das ondas em meios dielétricos.

### A.1.3 Ondas em meios dielétricos

Anteriormente foi mostrado que a polarização elétrica em meios dielétricos deve ser considerada em meios homogêneos e isotrópicos, onde  $\vec{P}$  é linearmente proporcional ao vetor  $\vec{E}$ , como mostra a equação 1.17

$$\vec{P} = \varepsilon_0 \cdot \chi \vec{E} \quad (1.17)$$

onde  $\chi$  é a susceptibilidade elétrica. Geralmente, é um tensor de segunda ordem, porém em materiais isotrópicos se reduz a um escalar, lembrando que a susceptibilidade é em função de  $\omega$ , quando o campo elétrico é uma função arbitrária do tempo e a polarização é a convolução da

transformada de *Fourier* de  $\chi(\omega)$  com  $\vec{E}(t)$ . Isso justifica porque os dipolos não respondem instantaneamente a aplicação do campo, fazendo com que as considerações de *Kramers-Kroenig* sejam validas [46]. Dessa forma, se obtém a equação 1.18

$$\vec{D} = \varepsilon_0 \vec{E} + \vec{P} = \varepsilon_0 \varepsilon \vec{E} \quad (1.18)$$

no qual  $\varepsilon = 1 + \chi$ , que é a constante dielétrica do meio ou a permissividade elétrica do material [26]. Desse modo, o comportamento da onda eletromagnética e sua velocidade de propagação no material é mostrado através dessa constante. Em vista disso, uma alta permissividade faz com que a distância dentro material pareça maior, causando uma lenta propagação da onda.

#### A.1.4 Velocidade de grupo e velocidade de fase

Para um bom entendimento, primeiramente é conceituado velocidade de fase. De maneira simplificado, a velocidade de fase pode ser compreendida como a velocidade e a direção de uma determinada fase da onda que se propaga no espaço, ou seja, quando é analisado uma onda do tipo  $\text{sen}(kz - \omega t)$  propagando na direção  $+z$ , e sabendo que ela se move com velocidade constante, faz com que o argumento *seno* se torne constante, logo  $kz - \omega t = 0$ , chegando na equação 1.19

$$\frac{z}{t} = \frac{\omega}{k} \quad (1.19)$$

onde, é notável que o lado esquerdo da equação 4.19, é a definição de velocidade, sendo a de fase. Então, é possível escrever a velocidade de fase como 1.20

$$v_p = \frac{\omega}{k} \quad (1.20)$$

De forma generalizada, é concebível associar com o índice de refração de fase ( $n_p$ ), demonstrando assim a relação entre a velocidade de fase e a velocidade da luz no material, como mostra as equações 1.21 e 1.22

$$\vec{v}_p = \frac{\omega}{|\vec{K}|^2} \vec{K} \quad (1.21)$$

$$n_p = \frac{c}{v_p} \quad (1.22)$$

Dado essa base, entenderemos a velocidade de grupo, que é conceituada como a velocidade das amplitudes de um conjunto de ondas em determinada direção e momento. Em outras palavras, pode-se agrupar as ondas em diferentes direções e perceber que suas amplitudes

viajam na mesma velocidade de grupo naquele material. Assim a velocidade de grupo é descrita matematicamente pela equação 1.23

$$\vec{v}_p = \frac{\nabla \omega}{\nabla \beta} = \nabla_k \omega(k) \quad (1.23)$$

Esses conceitos são fundamentais para o entendimento do próximo anexo, no qual descreve matematicamente as estruturas periódicas.

O anexo a seguir descrevem os comportamentos dos campos nas estruturas periódicas e os campos distantes, apresentando a solução da equação da onda, e as devidas equações necessárias para o entendimento do tópico 4.2.

## Anexo 2

A solução da equação da onda 1.13, pode ser muito complexa quando possuir uma dependência temporal e uma solução não estacionária, no qual é habituado derivar a equação de *Helmholtz* para tais aplicações. Dessa forma, o campo elétrico é representado pelo produto, como mostra a equação 2.1

$$E(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_0(\mathbf{r})e^{i(\mathbf{k}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{r})}e^{i(\omega \cdot t)} \quad (2.1)$$

É notável que se pegar a equação 2.1 e substituir na equação 1.13 e assim fazer os devidos ajustes, acha-se a equação da onda de *Helmholtz* para o campo elétrico sem ter a dependência temporal, como apresenta a equação 2.2

$$\nabla^2 E_0(\mathbf{r}) + \varepsilon_r(\mathbf{r}) \frac{\omega^2}{c^2} E_0(\mathbf{r}) \quad (2.2)$$

A resolução da equação de *Helmholtz* não só nos gera a reflectância e a transmitância de estruturas finitas, como também a distribuição de campos e auto-freqüências de estruturas infinitas [6]. Já em estruturas periódicas infinitas, o desafio é encontrar a relação de dispersão, *i. e.*, ou seja, o vínculo entre as auto-freqüências e vetores de onda em certas direções na estrutura. Logo, primeiramente é necessário caracterizar a estrutura matematicamente para assim aplicar do método. Para melhor compreensão a seguir é apresentados conceitos fundamentais para essa aplicação.

### A.2.1 Vetores de Redes

Como já dito anteriormente, o conjunto de vetores de redes são definidos pela equação 2.3

$$\mathbf{R} = l\mathbf{a}_1 + m\mathbf{a}_2 + n\mathbf{a}_3 \quad (2.3)$$

onde  $\mathbf{a}_1$ ,  $\mathbf{a}_2$  e  $\mathbf{a}_3$  são os vetores primitivos que servem como base para determinar os vetores de rede e seus multiplicadores ( $l$ ,  $m$ ,  $n$ ) são inteiros.

### A.2.2 Rede Recíproca

Fazendo uma análise detalhada na equação da onda de *Helmholtz* 2.2, é possível notar que usando o teorema de *Bloch*, será uma solução para o campo magnético, em uma dimensão, como mostrado equação 2.4. O motivo para isso é de formar a estrutura de banda do material, onde é mais apropriado usa-se o campo magnético.

$$-\frac{\partial}{\partial x} \frac{1}{\varepsilon(x)} \frac{\partial}{\partial x} h(x) \cdot e^{ikx} = \left(\frac{\omega^2}{c^2}\right) h(x) \cdot e^{ikx} \quad (2.4)$$

no qual o teorema de *Boch* diz que uma auto-função dentro de um meio periódico pode ser representado em modelos de onda planas, quando multiplicadas por uma função de periodicidade idêntica a da rede, ou se já,  $H(x) = h(x) \cdot e^{ikx}$ .

Sabendo que a estrutura periódica do cristal fotônico é infinita, então a função dielétrica também precisa sofrer ajustes, para poder ser possível ter uma solução. Logo, usa-se um método derivado da teoria das representações (bastante utilizado em mecânica quântica). Isso significa em consistir em representar a função  $\Psi(x, t)$  como uma expansão com dependência de um conjunto de funções [54]. Dessa maneira, nos cristais fotônicos quando é caracterizado as funções dielétricas em coordenadas cartesianas, elas mudam para infinitas. Sendo assim, pode-se configura-las em função de vetores de onda, possibilitando a aplicação da teoria de representações na equação 2.5

$$\varepsilon(\mathbf{r}) = \int g(\mathbf{K}) \cdot e^{j \cdot \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} d\mathbf{K} \quad (2.5)$$

onde  $g(\mathbf{K})$  é a função dielétrica com dependência da representação dos vetores de onda  $\mathbf{K}$ . Isso ajuda a utilizar diversos tipos de ondas que correspondem essa condição, mas para esse fato e para simplificação, aplica-se um conjunto de ondas planas. Em vista disso, com a aplicação da condição de periodicidade se tem que  $\varepsilon(\mathbf{r}) = \varepsilon(\mathbf{r} + \mathbf{R})$ , substituindo na equação 2.5, surgirá a equação 2.6.

$$\varepsilon(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = \int g(\mathbf{K}) \cdot e^{j \cdot \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \cdot e^{j \cdot \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} d\mathbf{K} = \varepsilon(\mathbf{r}) \quad (2.6)$$

Isso mostra que a condição se satisfaz quando  $g(\mathbf{K}) = 0$  ou  $e^{j \cdot \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} = 1$  para todo vetor  $\mathbf{R}$ . Diante disso, se tem que  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} = n2\pi$ , onde são denominados de vetores de rede recíproca denotadas por  $\mathbf{G}$ . Dessa forma, passa-se escrever a permissividade da malha com base dos vetores de rede recíproca à medida que se conhece as amplitudes das ondas planas, isso através

de uma expansão em série de *Fourier* ao invés da integral(transformada), logo se tem a equação 2.7

$$\varepsilon(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} g_{\mathbf{G}} \cdot e^{j \cdot \mathbf{G} \cdot \mathbf{r}} \quad (2.7)$$

onde  $g_{\mathbf{G}}$  são os coeficientes correspondente a cada onda plana [6]. A seguir são apresentados mais conceitos que ajudam na compreensão deste capítulo.

### A.2.3 Zona de Brillouin

Para se entender a contribuição da zona de Brillouin, recapitularemos o que já foi visto nas seções anteriores. Foi definido na seção acima que os vetores da rede recíproca será 2.8

$$\mathbf{G} \cdot \mathbf{R} = 2n\pi \quad (2.8)$$

no qual, pode se representar por vetores base (vetores primitivos da rede recíproca), pela equação 2.9

$$\mathbf{G} = l' \mathbf{b}_1 + m' \mathbf{b}_2 + n' \mathbf{b}_3 \quad (2.9)$$

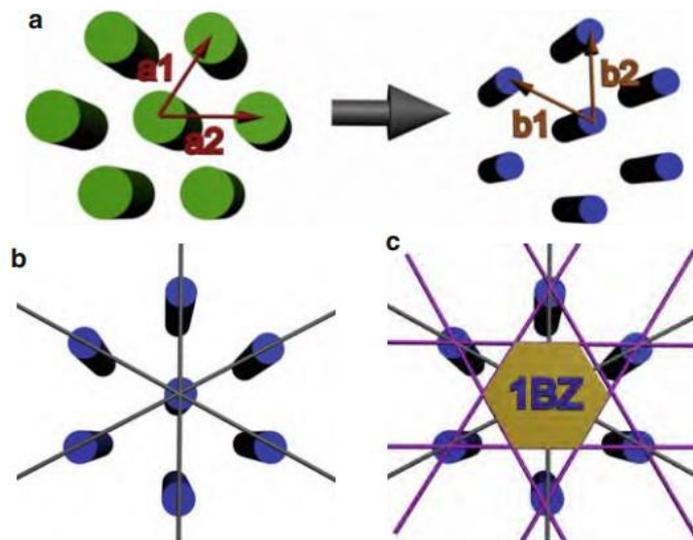
pegando a equação 2.8 e colocando as equações 2.3 e 2.9 se tem a 2.10

$$\mathbf{G} \cdot \mathbf{R} = (l' \mathbf{b}_1 + m' \mathbf{b}_2 + n' \mathbf{b}_3) \cdot (l \mathbf{a}_1 + m \mathbf{a}_2 + n \mathbf{a}_3) = 2n\pi \quad (2.10)$$

sabendo da propriedade da multiplicação escalar  $\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = \delta_{ij} 2\pi$ , é possível rescrever a 2.10, como mostra a equação 2.11

$$\begin{aligned} b_1 &= 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3} \\ b_2 &= 2\pi \frac{\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}{\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3} \\ b_3 &= 2\pi \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3} \end{aligned} \quad (2.11)$$

Isso implica em dizer que se tiver os vetores de rede primitivos, pode-se obter os vetores primitivos recíprocos e produzir a célula unitária recíproca, a primeira zona de Brillouin. Na primeira zona de Brillouin é uma célula de Weigner-Zeitz, mas em um espaço recíproco [46-47]. A figura 4.3 ilustra a construção da zona de Brillouin de um cristal fotônico 2D a parti da célula unitária de Weigner-Zeitz.



**Figura 2.1** – Construção da zona de Brillouin (Anexo 2).

A próxima seção é apresentada de maneira simplificada, conceito sobre estrutura de banda.

#### A.2.4 Estrutura de Bandas

O comportamento dos campos elétricos e magnéticos dentro de uma estrutura periódica é demonstrado pela estrutura de banda, no qual a presença de *gaps* caracteriza regiões de frequência em que os campos não podem propagar. Para descobrir a estrutura de banda de uma configuração periódica é preciso solucionar o problema de auto-valor da equação de *Helmholtz* para o campo magnético, como já ressaltado anteriormente e como mostra a equação 2.12

$$\frac{\partial}{\partial x} \frac{1}{\epsilon x} \frac{\partial}{\partial x} H(x) + \frac{\omega^2}{c^2} = 0 \quad (2.12)$$

A equação acima, se difere da equação 2.2, devido apresentar diferentes operadores. Nesta a função dielétrica está embutida no operador, causando dificuldades na solução, sendo submetida a uma derivada. Já a equação 2.2, a função dielétrica está fora do operador e da derivada. No entanto, geralmente a equação 2.12 é utilizada em detrimento do campo elétrico, pois o operador dela é *Hermitiano* e suas propriedades auxiliam na solução. Dessa maneira,

para aplicação do método usa a expansão em série de Fourier na equação 2.13, implementando o teorema de Bloch, por uma metodologia idêntica a que já foi dita na seção 1.2.3.

$$H(x) = \sum_G h_{k,n}(G) \cdot e^{j(K+G) \cdot x} \quad (2.13)$$

onde  $h_{k,n}(G)$  é uma função periódica (periodicidade da rede), condizendo com os valores de  $k$  e os números de estado  $n$ . A função também representa o coeficiente da expansão em série e tem grande valor no método. É feito um processo semelhante com o inverso da função dielétrica (por concordância), obtendo a equação 2.14

$$\frac{1}{\varepsilon(x)} = \sum_{G'' \in G} \chi(G'') \cdot e^{j \cdot G'' \cdot x} \quad (2.14)$$

no qual  $\chi(G'')$  é o coeficiente da expansão de Fourier. Por esse motivo, ao substituir na equação 4.36, é rearrumado os somatórios, chegando na equação 2.15, onde apresenta os valores de permissividade e campo em forma de expansões de Fourier com dependência dos vetores de onda, sendo assim é necessário entende-las como um conjunto infinitos de equações diferenciais e o conjunto de autovalores como o operador diferencial, onde estão organizados em uma matriz quadrada, devido as características Hermitianas [46-47].

$$-\sum_{G'} \chi(G - G') ((k + G') \cdot (K + G)) \cdot h_{k,n}(G') + \frac{\omega^2}{c^2} h_{k,n}(G) = 0 \quad (2.15)$$

Pela simplicidade da notação, diz que este método foi realizado para uma dimensão, porém, dependendo da estrutura periódica pode ser feito para duas ou mais dimensões. Neste trabalho, é estudado uma estrutura 2D, onde a equação final será 2.16

$$\begin{aligned} \sum_{G_{\parallel}} \chi(G_{\parallel} - G'_{\parallel}) |k_{\parallel} + G'_{\parallel}|^2 E_{z,k_{\parallel}n}(G'_{\parallel}) &= \frac{\omega_{k_{\parallel}n}^{(E)^2}}{c^2} E_{z,k_{\parallel}n}(G_{\parallel}) \\ \sum_{G_{\parallel}} \chi(G_{\parallel} - G'_{\parallel}) |k_{\parallel} + G'_{\parallel}|^2 H_{z,k_{\parallel}n}(G'_{\parallel}) &= \frac{\omega_{k_{\parallel}n}^{(H)^2}}{c^2} H_{z,k_{\parallel}n}(G_{\parallel}) \end{aligned} \quad (2.16)$$

onde  $G_{\parallel}$  e  $G'_{\parallel}$  são os vetores na rede recíproca no plano,  $k_{\parallel}$  são os vetores de onda no plano, e por fim  $\omega_{k_{\parallel}n}^{(E)^2}$  e  $\omega_{k_{\parallel}n}^{(H)^2}$  são os autos frequência para os modos TE e TM. A seção a seguir, trabalha conceitos sobre Photonic Band Gaps.

O próximo anexo, trabalha conceitos que ajudam na compreensão da aplicação do capítulo 4.

### Anexo 3

Esse anexo comenta sobre como é feita essa execução para fazer uma estrutura com furos de ar.

#### A.3.1 Estrutura de Furos de ar

Como dito no capítulo 4, estruturas periódicas tem várias aplicações, uma delas é possibilitar a utilização de furos de ar no substrato de uma antena de microfita, através do método de expansão de ondas planas (PWE) citado no capítulo anterior. Para o cálculo da periodicidade, é necessário determinar a frequência de ressonância e o material, que nesse caso a sílica 6 [46, 47, 48, 49, 50], para assim ser dimensionada a estrutura. Nessa pesquisa foi usado o método PWE encontrando as estruturas de bandas do material. Para usar essa metodologia é preciso definir os seguintes parâmetros, seguindo a essa ordem de relação:

1. Ao saber ( $\epsilon_r$ ) do material, é calculado a relação de frequência e raio a partir do mapa de gap.
2. Com o valor de raio, é encontrado a estrutura de banda para avaliar os valores das constantes obtidas.
3. Daí, usa-se a relação  $\frac{\omega a}{2\pi c} = \frac{a}{\lambda}$ , estabelecendo a estrutura

A figura 3.2 exemplifica um modelo de mapa de gaps da estrutura de silício. É notável verificar que tem uma região com gaps entre  $\frac{\omega a}{2\pi c} = 0.3$  e  $\frac{a}{\lambda} = 0.5$  para o raio central 1.5mm. Então, usando a relação e conhecendo a frequência central desejada que nesse caso 3 THz, se tem que:

$$\lambda = \frac{c}{f_r} = \frac{3 \cdot 10^8}{3 \cdot 10^{12}} = 0.0001 \text{ m} \quad (3.1)$$

Logo:

$$\frac{\omega a}{2\pi c} = \frac{a}{\lambda} = 0.4 \quad (3.2)$$

Então

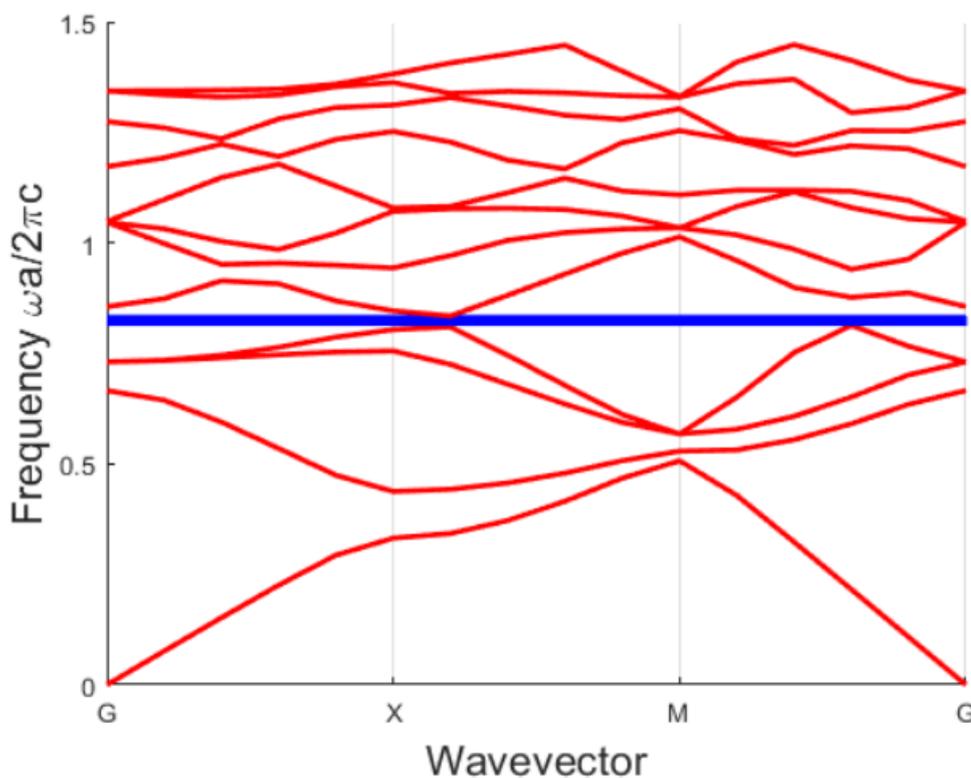
$$\frac{a}{0.4} = 0.0001 \Rightarrow a = 0,4\mu\text{m} \quad (3.3)$$

Esse valor seria o ideal para a periodicidade da estrutura e para obter bons resultados, ajudando com os cálculos propostos. Porém, esse valor fará com que a antena seja muito grande para uma finalidade em comunicações móveis nessa frequência, sendo assim, procurou-se analisar os gráficos de estrutura de banda do material com o objetivo de apontar gaps parciais em áreas com menor periodicidade [46]. A consequência dos gaps parciais, é aumentar de largura de banda, pois admitem ondas em determinadas direções indicadas pelos vetores de onda. É claro que os valores não são tão altos quanto os gaps completos, mas podem mostrar uma melhora significativa [6]. A figura 3.1 apresenta a estrutura periódica 5 da sílica, mostrando gaps parciais entre Gamma e X (0 – 0.5) M e Gamma (0.5 – 0).

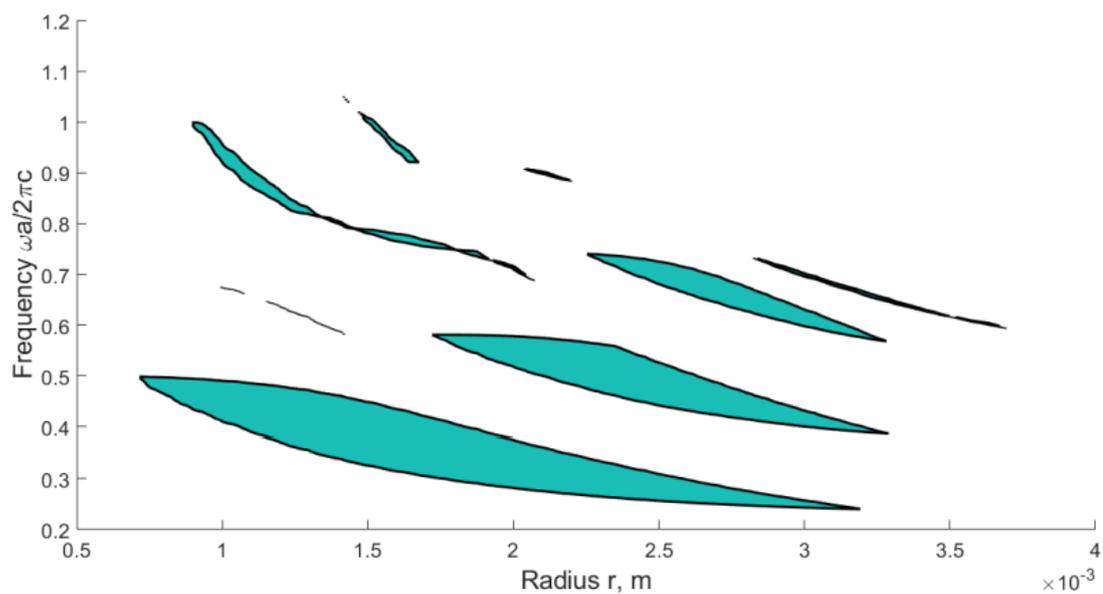
Outra maneira de associar os valores das estruturas periódicas é pelas equações 3.4 e 3.5 propostas nas referências [55, 56], onde elas apresentam que as periodicidades podem ser aproximadas à metade do comprimento de onda de Bragg.

$$a = \frac{\lambda_g}{2} \quad (3.4)$$

$$\lambda_g = \frac{c}{f_r \sqrt{\epsilon_r}} \quad (3.5)$$



**Figura 3.1** – Estrutura de Banda Sílica [6] (Anexo 3).



**Figura 3.2** – Mapa de Gap da estrutura Sílica [6] (Anexo 3).

Com esses conceitos determinados, ajudam na compreensão dos dados obtidos da simulação das antenas de Phagrafeno.