



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

EDSON MIRANDA SOARES

**ANÁLISE NUMÉRICA COMPUTACIONAL DE ANTENAS E METAMATERIAS
UTILIZANDO $Ti_3C_2T_x$ *MXene* COMO MATERIAL RESSONADOR NA BANDA
TERAHERTZ (THz)**

ANANINDEUA

2023

EDSON MIRANDA SOARES

**ANÁLISE NUMÉRICA COMPUTACIONAL DE ANTENAS E METAMATERIAS
UTILIZANDO $Ti_3C_2T_x$ *MXene* COMO MATERIAL RESSONADOR NA BANDA
TERAHERTZ (THz)**

Trabalho de conclusão de curso, apresentado como requisito parcial para a obtenção do título de bacharel em Engenharia de Materiais pela Universidade Federal do Pará, campus universitário de Ananindeua.

Orientador: Prof^o. Dr^o. Marcos Benedito Caldas Costa

ANANINDEUA

2023

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

S676a Soares, Edson Miranda.
ANÁLISE NUMÉRICA COMPUTACIONAL DE ANTENAS E
METAMATERIAS UTILIZANDO Ti3C2Tx MXene COMO
MATERIAL RESSONADOR NA BANDA TERAHERTZ (THz) /
Edson Miranda Soares. — 2023.
XVII, 99 f. : il. color.

Orientador(a): Prof. Dr. Marcos Benedito Caldas Costa
Trabalho de Conclusão de Curso (Graduação) - Universidade
Federal do Pará, Campus Universitário de Ananindeua, Curso de
Engenharia de Materiais, Ananindeua, 2023.

1. Antenas de plaqueta. 2. Metamateriais. 3. MXene. 4.
Ti3C2Tx. 5. COMSOL. I. Título.

CDD 620.11

EDSON MIRANDA SOARES

**ANÁLISE NUMÉRICA COMPUTACIONAL DE ANTENAS E METAMATERIAS
UTILIZANDO $Ti_3C_2T_x$ MXene COMO MATERIAL RESSONADOR NA BANDA
TERAHERTZ (THz)**

Trabalho de conclusão de curso, apresentado como requisito parcial para a obtenção do título de bacharel em Engenharia de Materiais pela Universidade Federal do Pará, campus universitário de Ananindeua.

Orientador: Prof^o. Dr^o. Marcos Benedito Caldas Costa

APROVADO EM: ____/____/____

BANCA EXAMINADORA

Prof^o. Dr^o. Marcos Benedito Caldas Costa

Orientador - UFPA

Prof.^o M.Sc. Igor Ramon Sinimbu Miranda

Examinador externo Faculdade Física – UFPA

Prof. Dr. Rômulo Luiz Oliveira da Silva

Examinador externo – UFPA

Dedico a minha mãe Benedita Genuína por todo cuidado, carinho e amor incondicional; meu pai Manoel Raimundo por todo esforço, conselho e suporte para a concretização desse momento e ao meu amigo nos momentos mais solitários, meu eterno filhote, Domi.

“A vida é como andar de bicicleta. Para manter o equilíbrio, você deve continuar se movendo”

(Albert Einstein)

AGRADECIMENTOS

Eu gostaria de agradecer a minha mãe Benedita Genuína, por me aturar todos esses anos em meus momentos de desleixo ou de mau humor, tenho noção de que não sou o filho mais conversativo, mas sempre fui grato por tudo que a senhora me propiciou e sempre a amarei.

Agradeço ao meu pai Manoel Raimundo por seu esforço infinito ao longo desses vinte e cinco anos, pois cada noite em claro que o senhor manteve para proteger aquela loja e garantir que eu e meu irmão tivéssemos a melhor educação, não foi em vão.

Gostaria de deixar meus agradecimentos a todo corpo docente da FEMAT, em especial, ao meu Orientador Prof^o. Dr^o. Marcos Benedito Caldas Costa por ter me oferecido a oportunidade de atuar em atividades de extensão e pesquisa e por todas as conversas descontraídas.

A Prof^a. Dr^a. Roseane de Lima Silva por ter tido a paciência de tolerar todas as minhas burrices matemáticas; ao Prof^o. Dr^o. Edemarino Araujo Hildebrando por demonstrar o maior exemplo de profissionalismo e comprometimento que um Engenheiro de Materiais poderia obter; Ao Prof^o. M.Sc. Hirohito Diego Athayde Arakawa por ter compartilhado sua sabedoria e me aconselhado no período mais difícil de minha graduação, me oferecendo palavras que irei carregar durante toda a minha jornada.

Agradeço a todo o suporte oferecido pelo laboratório de Física do campus Ananindeua e ao técnico Prof^o. M.Sc. Igor Ramon Sinimbú Miranda por ser solícito toda vez que precisei de ajuda ao longo de dois anos de pesquisa.

Deixo meus agradecimentos a todo os meus colegas de classe, em especial a Olivia Lopes Leite por ser um exemplar de liderança e ser a melhor representante de turma que eu poderia ter; ao Marcos Gabriel Fernandes dos Santos por toda ajuda oferecida durante a pesquisa; ao Diemison Lira Santa Rosa por ser uma inspiração em ser multitarefa, você é o único exemplar que conheço que conseguiu conciliar faculdade, emprego, pesquisa e academia sem enlouquecer – eu acho.

Eu não poderia deixar de agradecer ao meu irmão Railam Miranda, obrigado por me aconselhar durante toda a vida, seja de forma direta, insistindo que eu me matricula-se no último semestre ou indireta, fazendo um monte de besteira que eu não deveria repetir. Obrigado por ser parte de minha sanidade e ser a figura em que eu posso confiar a qualquer momento da vida e por sempre me apoiar em minhas decisões.

Entrar e sobreviver na universidade exigiu uma imersão inesperada ao qual não estava preparado, portanto, agradeço ao meu melhor amigo, Danilo Costa, por me tirar dessa bolha e me trazer de volta pra realidade sempre que precisei, agradeço por toda a paciência ao decorrer

desses cinco anos de graduação, ao qual estive mais distante e ainda assim você sempre apareceu trazendo boas novas e trocando ideias, obrigado pela sua amizade e por ser meu irmão, mesmo com o sangue distinto.

É óbvio que eu não poderia deixar de citar a parceria mais inusitada que surgiu naquela sala, segundo a Olivia. Sim, é você mesmo que vou agradecer Damares Barbosa, a esquizofrênica não diagnosticada de Cametá. Obrigado pela parceria ao decorrer de toda a graduação; por me escolher como uma das pessoas ao qual compartilhou suas loucuras, medos ou frustrações em um período tão esquisito para a humanidade, por me escutar toda vez que precisei desabafar; por me fornecer os momentos mais inusitados e de vergonha alheia da graduação que vou rir e lembrar durante toda vida, agradeço por ser a irmã mais nova que não tive. Agora nossos caminhos divergem, sei que está em boas mãos e eu inicio minha jornada.

Por fim, não poderia deixar de agradecer a Sr. Nizia por todo suporte na época da vila, a Dr^a Vânia Colares, ao Domi que teve que descansar e se tornar meu guia espiritual e aos meus novos filhotes que tiram meu sono toda noite: Dante e Beethoven.

Aos demais que contribuíram de forma direta e indireta para a conclusão desse momento tão importante de minha vida, os meus mais sinceros agradecimentos.

RESUMO

Havendo a necessidade de aprimoramento das tecnologias de telecomunicação para atender parâmetros cada vez mais elevados, assim como o desenvolvimento de novos métodos de análise, caracterização e identificação de materiais e objetos. Nesse estudo é elaborado projeto de antenas e metamateriais para a aplicações no THz gap, faixa viável para aplicações em telecomunicação e *Imaging*. Os dispositivos são constituídos de sílica como material dielétrico e utiliza $Ti_3C_2T_x$ *MXene* como meio ressonador. O projeto foi simulado por análise numérica computacional, utilizando os softwares COMSOL Multiphysics para as simulações das antenas e metamateriais e MATLAB para a modelagem das antenas e desenvolvimento dos modelos numéricos de Drude-Smith e Drude-Lorentz, visando representar as propriedades óticas do $Ti_3C_2T_x$ *MXene*. O Metamaterial apresentou comportamento como meio de ϵ negativo (ENG) na faixa de 1-3 THz, como meio de μ negativo (MNG) com permitividade próximo de zero (ENZ) na faixa de 3-6 THz, contendo picos de absorbância em entre 6-7 THz e reflectância em 3-4 THz. As antenas apresentaram resultados coerentes para antenas de baixo perfil, contendo três modos de ressonância TM10, TM02 e TM20. O modo fundamental TM10 Ressoou entre 3,1-3,2 THz com coeficiente de reflexão de -36,478 dB apresentando largura de banda de 16,44 %, sendo o modo de ressonância predominante, o incremento de MTM resultou no aumento da largura de banda no modo TM20 nas faixas de 6-7 THz com -24,38 dB e ganho de 1,13 dBi no modo fundamental para $Ti_3C_2T_x$ *MXene* modelado por Drude-Smith, apresentando o total de 3,76 dBi. As antenas com $Ti_3C_2T_x$ *MXene* modelado por Drude-Lorentz apresentaram modo TM20 com maior ressonância contendo coeficiente de reflexão de - 36,613 dB e largura de banda de 21,8%, nessas antenas o incremento de MTM fomentou aumento de ganho de 0,86 dBi somente no modo TM10, ao qual obteve ganho de 2,48 dBi.

Palavras-chave: Antenas de plaqueta; Metamateriais; *MXene*; $Ti_3C_2T_x$; THz; COMSOL; Simulação numérica; Drude-Smith; Drude-Lorentz.

ABSTRACT

There is a need to improve telecommunication technologies to meet increasingly high standards, as well as the development of new methods of analysis, characterization and identification of materials and objects. This study elaborates the design of antennas and metamaterials for applications in the THz gap, a viable range for applications in telecommunication and Imaging. The devices are made of silica as dielectric material and use Ti₃C₂T_x MXene as resonator medium. The project was simulated by computational numerical analysis, using the COMSOL Multiphysics software for the simulation of the antennas and metamaterials and MATLAB for the modeling of the antennas and development of the numerical models of Drude-Smith and Drude-Lorentz, aiming to represent the optical properties of the Ti₃C₂T_x MXene. The Metamaterial behaved as a negative ϵ medium (ENG) in the 1-3 THz range, as a negative μ medium (MNG) with near zero permittivity (ENZ) in the 3-6 THz range, with absorbance peaks in between 6-7 THz and reflectance at 3-4 THz. The antennas presented consistent results for low profile antennas, containing three resonance modes TM₁₀, TM₀₂ and TM₂₀. The TM₁₀ fundamental mode resonated between 3.1-3.2 THz with a reflection coefficient of -36.478 dB, presenting a bandwidth of 16.44%, being the predominant resonance mode, the increment of MTM resulted in an increase in bandwidth in TM₂₀ mode in the 6-7 THz bands with -24.38 dB and 1.13 dBi gain in fundamental mode for Ti₃C₂T_x MXene modeled by Drude-Smith, presenting a total of 3.76 dBi. The antennas with Ti₃C₂T_x MXene modeled by Drude-Lorentz presented TM₂₀ mode with greater resonance containing reflection coefficient of -36.613 dB and bandwidth of 21.8%, in these antennas the MTM increment promoted a gain increase of only 0.86 dBi in TM₁₀ mode, which obtained a gain of 2.48 dBi.

Keywords: Antennas Patch; Metamaterials; MXene; Ti₃C₂T_x; THz; COMSOL; Numerical Simulation; Drude-Smith; Drude-Lorentz.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 - Múltiplos formatos utilizados em antenas de plaqueta com microfita	8
Figura 2 - Modelo de plaqueta com microlinha simuladas nesse estudo.	8
Figura 3 - Gráfico do parâmetro de espalhamento S_{11} , os pontos f_1 e f_2 demonstram o comprimento da largura de banda em 10 dB, f_r é a frequência de ressonância.....	11
Figura 4 - Exemplo de Diagrama de radiação com boa diretividade.....	13
Figura 5 - Exemplo de polarização.	15
Figura 6 - Comparação entre e Drude e Drude-Smith	28
Figura 7 - Diferença de resultados entre modelos.....	29
Figura 8 - Etapas do processo de síntese por <i>etching</i> do <i>MXene</i>	32
Figura 9 - Resumo da síntese de filmes de <i>MXene</i>	36
Figura 10 - Resistência de $Ti_3C_2T_x$ recozido quando submetido a variação de temperatura. .	39
Figura 11 - Comparação do módulo de elasticidade do <i>MXene</i> com demais 2D materiais. ...	41
Figura 12 - Comparação de desempenho de filmes de <i>MXene</i> e relação a outros materiais...45	
Figura 13 - Comportamento de MTMs.....	47
Figura 14 - Exempla de SRR com o formato quadrático.	50
Figura 15 - Ondas incidindo em MTM com índice de refração próximo ou igual a zero (ZIM).	51
Figura 16 - Condutividade de filmes de $Ti_3C_2T_x$ obtida experimentalmente comparadas com o modelo de Drude-Smith ao decorrer dos estudos de Li. a) Parte Real; b) Parte imaginária. ...	53
Figura 17 - Permittividade para folhas de 30 nm de espessura. a) parte real; b) parte imaginária.	55
Figura 18 - Permittividade para folhas de 400 nm. Os valores em azul sólido e azul traçado foram obtidos pela equação 9.1, utilizando os dados relatados no quadro 2.....	56
Figura 19 - Deformação de um elemento de 30 nm de espessura.....	58
Figura 20 - Condutividade por Drude-Smith para folhas de 30 nm.	59
Figura 21 - Comparação da condutividade calculada para 400 nm e comparação com a literatura.	60
Figura 22 - Comparação da permittividade entre os modelos.....	61
Figura 23 - a) Condição de contorno PML, em azul claro, em verde claro está a condição de contorno far-field. b) Modelo de antena patch simulada.	61
Figura 24 - Comparativo entre simulação desse estudo com a literatura.	63
Figura 25 - a) Condição de contorno <i>PML</i> ; b) Condição de contorno <i>scattering</i> (<i>editar para colocar as portas</i>).....	63

Figura 26 - Direção da periodicidade definida para as portas <i>floquet</i>	64
Figura 27 - Antena patch com MTM ao redor do ressonador, proposta nesse estudo.	64
Figura 28 - Geometria SRR definida pelas equações 9.4 a 9.6.	65
Figura 29 - Permeabilidade e permitividade. a) parte real, b) parte imaginária.	66
Figura 30 - Absorbância e reflectância; linhas sólidas MTM DS e linhas pontuadas MTM DL.	67
Figura 31 - Parâmetro de espalhamento para $Ti_3C_2T_x$ modelado por Drude-Smith.	68
Figura 32 - Parâmetro de espalhamento para $Ti_3C_2T_x$ modelado por Drude-Lorentz.	69
Figura 33 - Distribuição de campo no modo TM10 para as antenas a) ADS; b) ADL; c) ADS MTM e d) ADL MTM.	71
Figura 34 - Distribuição de campo no modo TM02 para as antenas a) ADS; b) ADL; c) ADS MTM e d) ADL MTM.	72
Figura 35 - Distribuição de campo no modo TM20 para as antenas a) ADS; b) ADL; c) ADS MTM e d) ADL MTM.	72
Figura 36 - Diagrama de radiação para as antenas: a) ADS; b) ADS MTM, Atuando no modo fundamental TM10. Em c) pode ser visualizado o diagrama de radiação do 2D de ambas antenas.	74
Figura 37 - Diagrama de radiação para as antenas: a) ADS; b) ADS MTM, Atuando no modo fundamental TM02. Em c) pode ser visualizado o diagrama de radiação do 2D de ambas antenas.	75
Figura 38 - Diagrama de radiação para as antenas: a) ADS; b) ADS MTM, Atuando no modo fundamental TM20. Em c) pode ser visualizado o diagrama de radiação do 2D de ambas antenas.	76
Figura 39 - Diagrama de radiação para as antenas ADL e ADL MTM nos modos: a) e b) TM10; c) e d) TM02 e e) e f) TM20.	77
Figura 40 - Diagrama de radiação 2D para: a) TM10; b) TM02 e c) TM20.	78
Figura 41 - Resistência das antenas simuladas.	79
Figura 42 - Reatância das antenas simuladas.	80

LISTA DE SIGLAS

ADS	Antena Patch modelado por Drude-Smith
ADL	Antena Patch modelado por Drude-Lorentz
ADS	MTM Antena Patch com metamaterial modelado por Drude-Smith
ADL	MTM Antena Patch com metamaterial modelado por Drude-Lorentz
Al ₂ O ₃	Alumina
Au	Ouro
<i>BW</i>	<i>Bandwidth</i>
CMC	Compósitos de matriz cerâmica
CMM	Compósitos de matriz metálica
CPW	<i>Coplanar Waveguide</i>
DFT	Teoria da densidade funcional
DNG	<i>Double negative</i>
EMI	<i>Eletromagnetic interference</i>
EM	<i>Ondas eletromagnéticas</i>
ENG	<i>Epsilon-negative</i>
ENZ	<i>Epsilon-near-zero</i>
GPU	Unidade de processamento gráfico
HF	Ácido hidrofluorídrico
HOA	<i>Harmonic oscillator approximation</i>
KF	Fluoreto de potássio
LH	<i>Left-handed</i>
LiF	Fluoreto de Lítio
LiF-HCL	Fluoreto de lítion e ácido clorídrico
LIM	<i>Low-index Materials</i>
MET	Microscópio eletrônico de transmissão
MDF	<i>Model Dielectric Function</i>
MNG	<i>Mu-negative</i>
MTM	Metamaterial
MTM DL	Metamaterial modelado por Drude-Lorentz
MTM DS	Metamaterial modelado por Drude-Smith
MNZ	<i>Mu-near-zero</i>

Nb ₂ C	Carbeto de nióbio
PBG	<i>Photonic Band Gap</i>
PET	Politereftalato de etileno
PML	<i>Perfectly Matched Layer</i>
RAM	Memória de acesso aleatório
RF	Radiofrequência
SRR	<i>Split Ring Resonator</i>
Ti ₃ C ₂ T _x	Carbeto de titânio
UHF	<i>Ultra high Frequency</i>
UV	Ultravioleta
VASE	Elipsômetro espectroscópio de ângulo variável
ZIM	<i>Zero-index Materials</i>

LISTA DE SÍMBOLOS

L	Comprimento da plaqueta
λ	Comprimento de onda no vácuo
ϵ_r	Permitividade relativa
ϵ_{eff}	Permitividade efetiva
h	Altura do substrato
W	Largura da plaqueta
f_r	Frequência de Ressonância
μ_0	Permeabilidade Magnética no vácuo
ϵ_0	Permitividade Elétrica no vácuo
ΔL	Extensão das dimensões da plaqueta
z_c	Impedância Característica
w_0	Largura da microfita
λ_g	Comprimento de onda no meio
L_f	Comprimento da microfita
S_{11}	Parâmetro de espalhamento
Γ_r	Coefficiente de reflexão
V_1^-	Potência incidente
V_1^+	potência refletida
S_{21}	Coefficiente de Transmissão
Z_l	Impedância da carga
$\%BW$	Largura de banda em percentual
φ	Ângulo azimute
θ	Ângulo de elevação
ϵ_0	Eficiência Total
ϵ_r	Eficiência de Reflexão
ϵ_c	Eficiência Condutiva
ϵ_d	Eficiência Dielétrica
U	Potência irradiada
U_0	Potência de antena isotrópica ideal
G_0	Ganho da antena
D_0	Diretividade da antena
Z_{in}	Impedância de entrada

V_{in}	Tensão de entrada
I_{in}	Corrente de entrada
R_l	Resistência de perda
R_r	Parte real da impedância de entrada
X	Reatância
q^+	Carga carregada positivamente
q^-	Carga carregada negativamente
P	Polarização elétrica
E	Campo Elétrico
D	Deslocamento elétrico
ϵ_m	Permitividade de um meio aleatório
ϵ	Permitividade Elétrica
μ	Permeabilidade Magnética
H	Campo Magnético
J_f	Densidade de corrente
t	Tempo
ω	Frequência angular
σ	Condutividade Complexa
σ_{eff}	Condutividade efetiva
ϵ_s	Constante Dielétrica estática
ϵ_∞	Constante dielétrica em frequências elevadas
χ	Susceptibilidade dielétrica
N	índice de refração complexo
η	índice de refração
k	Coefficiente de extinção
A	Massa atômica
ρ_m	densidade do elemento metálico
Z	Número atômico
N_a	número de Avogadro
N_e	número de elétrons por unidade de volume
Γ	<i>damping coefficient</i>
τ	<i>Scattering time</i>
R	Resistência

ρ	Resistividade
v	Velocidade
e	Carga do elétron
F_e	Força eletroestática
F_f	Força de aceleração
m	Massa eletrônica
m^*	massa do semicondutor
μ^*	mobilidade de flutuação da carga livre
E_0	Campo elétrico inicial
ω_p	<i>Plasma frequency</i>
F^*	Lei de Hook
ω_0	frequência de ressonância da mola
a	Amplitude de oscilação
En	Energia de fóton
γ_{DS}	Taxa de espalhamento de Drude-Smith
c_p	Parâmetro fenomenológico de Drude-Smith
ω_τ	taxa de amortecimento
$ \kappa $	Vetor de propagação
κ_0	número de onda
c	Velocidade de luz
wc	Comprimento da célula de unitária de Metamaterial
W_{mtm}	Largura do anel externo do SRR
L_{mtm}	Comprimento do anel externo do SRR
$W2$	Largura do anel interno do SRR
$L2$	Comprimento do anel interno do SRR
g	Gap presente nos anéis.

Sumário

1	INTRODUÇÃO	1
2	JUSTIFICATIVA	3
3	OBJETIVOS	5
3.1	Objetivo Geral	5
3.2	Objetivos específicos	5
4	ORGANIZAÇÃO DA MONOGRAFIA	6
5	TEORIA DE ANTENAS.....	7
5.1	Projeto de antena de plaqueta com microfita	8
5.2	Parâmetros para análise de uma antena	10
5.2.1	Coeficiente de reflexão e transmissão	10
5.2.2	Largura de banda.....	11
5.2.3	Diagrama de radiação	12
5.2.4	Eficiência, diretividade e ganho.....	13
5.2.5	Impedância de entrada	14
6	PROPRIEDADES ÓTICAS DOS MATERIAIS	15
6.1	Propriedades dielétricas.....	15
6.2	Modelo de Drude	20
6.3	Modelo de Lorentz.....	24
6.4	Modelo de Drude-Smith.....	25
6.5	Diferença entre os modelos	28
7	MXene: síntese, propriedades e aplicações.....	30
7.1	O que é?	30
7.2	Síntese.....	31
7.2.1	Corrosão da fase MAX (<i>Etching</i>)	31
7.2.2	Recozimento.....	34
7.2.3	Armazenamento	34
7.2.4	Processamento de Filmes	35
7.3	Propriedades.....	36

7.3.1	Propriedades eletrônicas	36
7.3.2	Condutividade	37
7.3.3	Propriedades Mecânicas	40
7.4	Aplicações	41
7.4.1	Pseudo capacitador.....	41
7.4.2	Aplicação em baterias de íons Lítio/Sódio.....	42
7.4.3	Aplicações em EMI	42
7.4.4	Sensores piezoresistivos	44
7.4.5	Radiofrequência (RF)	44
8	METAMATERIAIS	46
8.1	Propriedades	46
8.2	Ganho em antenas	49
9	MODELAGEM E SIMULAÇÃO	52
9.1	Análise numérica das propriedades do $Ti_3C_2T_x$	53
9.1.1	Permitividade	53
9.1.2	Malha	57
9.1.3	Condutividade	58
9.2	Projeto de antena patch.....	61
9.3	Projeto de metamaterial	62
10	RESULTADOS E DISCUSSÃO	66
10.1	Metamaterial.....	66
10.1.1	Permitividade e Permeabilidade.....	66
10.1.2	Absorbância e Reflectância	66
10.2	Antena patch e Antena patch com MTM	67
10.2.1	Parâmetro de espalhamento.....	67
10.2.2	Distribuição de Campo	71
10.2.3	Ganho.....	73
10.2.4	Casamento de Impedância.....	79

11	CONCLUSÃO	82
12	SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS	83
	REFERÊNCIA BIBLIOGRÁFICA	84
	APÊNDICE A-Código Para projetar as dimensões da antena de plaqueta	90
	APÊNDICE B-Código Para a tabulação de dados das propriedades do $Ti_3c_2T_x$.....	92
	APÊNDICE C-Código Para analisar as propriedades de metamaterial SRR	97

1 INTRODUÇÃO

Desde a contribuição de James Clarck Maxwell, demonstrando que raios luminosos são propagação de ondas eletromagnéticas no espaço, a sociedade apresentou grande desenvolvimento científico e tecnológico que impulsionou o desenvolvimento de inúmeras ferramentas capazes de transmitir energia e informação a longas distâncias; contemporaneamente, inúmeros dispositivos necessitam de manipulação de ondas em determinadas frequências para seu funcionamento, tais como aparelhos de TV, rádio ou dispositivos de telefonia móvel (HALLIDAY, 2016).

O eletromagnetismo não está presente somente como ferramenta de lazer e estilo de vida para sociedade, mas também como uma poderosa ferramenta de cunho científico para o conhecimento da natureza da matéria. Inúmeros aparelhos de espectroscopia e raio X são desenvolvidos para prover análise de tecidos e matéria (HALLIDAY, 2016; RIEH, 2021).

A medida que a versatilidade de transferências de dados e o desenvolvimento de estudos acerca da matéria evoluem, a construção de dispositivos capazes de receber ou transmitir ondas de forma cada vez mais eficientes são fundamentais para suprir essa demanda, havendo a necessidade de exploração de dispositivos com formatos inéditos, emprego de novos materiais e análise de faixas de ondas ainda inexploradas; dentre as faixas de pouca exploração, encontra-se o THz gap que abrange de 0,1 – 10 THz; sendo uma faixa promissora, mas com desafios (SOUZA, 2021; RIEH, 2021).

Um dos principais dispositivos capazes de manusear ondas é a antena. Antenas podem adquirir inúmeras geometrias e tamanhos, variando de acordo com a frequência de ressonância. Por exemplo, KHEZZAR et al (2021) apresenta antenas patch com *photonic band gap* (PBG) no substrato para faixas de 0,2 – 0,4 THz, em seu estudo, é otimizado a geometria do patch e das células fotônicas para prover melhorias de performance (RIEH, 2021; KHEZZAR et al, 2021).

Em elevadas faixas, antenas apresentam tamanhos miniaturizados, podendo alcançar dimensões nanométricas, exigindo materiais finos e capazes de manter suas propriedades eletrônicas em tais dimensões. Nanomateriais e materiais bidimensionais são alternativas exploradas em múltiplos estudos para a construção de antenas em faixas do THz; COSTA e SOUZA (2022) exploram o grafeno com diferentes potenciais químicos em antenas dipolos na faixa de 0,5-2 THz, enquanto que CHASHMI e seus colaboradores (2019) projetaram antenas patch de grafeno com banda larga multiressoante, otimizando a polarização circular, para implementar melhorias de largura de banda (COSTA e SOUZA, 2022; CHASHMI et al, 2019).

O grafeno apresenta propriedades únicas, sendo foco de inúmeros estudos acerca de nanoantenas, pois, a descoberta do grafeno foi o principal ponto de ignição para o interesse científico acerca de materiais 2D, desde então, foram sintetizados inúmeros outros materiais bidimensionais como *MXene*, *Borophene*, *gallenene*, *silicene*, *phosphorene*, entre outros (GLAVIN et al, 2019).

O *MXene* é uma família de nanomateriais bidimensionais sintetizados pelos cientistas da universidade de Drexel em 2011, sendo o carbeto de titânio $Ti_3C_2T_x$ primeiro *MXene* a ser produzido (GLAVIN et al, 2019; NAGUIB et al, 2011).

Essa monografia, propõe a análise numérica computacional de dispositivos para atuarem no THz gap, abrangendo antenas e metamateriais, utilizando o nanomaterial carbeto de titânio $Ti_3C_2T_x$ (*MXene*) como material ressonador.

2 JUSTIFICATIVA

A definição da banda do THz para a construção do projeto desse estudo é decorrente da pouca exploração dessa faixa, quando comparado a frequências óticas ou faixas tradicionais da eletrônica como UHF, bandas V (40–75 GHz) e W (75-110 GHz) (RIEH, 2021).

Como essa faixa situa-se entre a eletrônica tradicional e ótica, ela também é referida como THz gap; o espectro que abrange a banda dessa faixa varia dependendo do autor, no entanto, a banda mais aplicada na literatura para representar o THz gap é de 100 GHz – 10 THz que será a faixa adotada para esse estudo (RIEH, 2021).

Essa faixa apresenta algumas propriedades que possibilita e dificulta a sua aplicação. Uma de suas propriedades é a forte absorção das moléculas de água, o que pode ser um problema em localidades de elevada umidade (RIEH, 2021).

Na fase vapor da água, a absorção ocorre devido ao estado do elétron da molécula de água, e dos modos vibracionais e rotacionais da molécula, sendo o último citado o principal responsável pela absorção de energia no THz gap, enquanto que os demais são mais influentes em altas frequências. Na fase líquida, o modo rotacional das moléculas é suprimido por causa da proximidade entre moléculas, no entanto, as ligações de hidrogênio acabam influenciando o modo vibracional, promovendo trocas de energia na faixa da banda no THz, provendo absorção. O estado sólido (gelo), apresenta o mesmo comportamento do estado líquido (RIEH, 2021).

Dentre as propriedades, destaca-se também que ondas na faixa do THz gap podem ser transparentes para materiais como papel, vestidos, madeira, couro e em muitos cerâmicos ou plásticos; sendo que em superfícies metálicas, apresenta boa reflexão de onda (RIEH, 2021).

Abordando aplicações que essa faixa pode prover, destaca-se *Imaging*, visto que, devido a emissão ou absorção de ondas eletromagnéticas em faixas do THz, essa faixa pode ser usada para o mapeamento de um objeto em um determinado espaço e equipamentos de espectroscopia (RIEH, 2021).

Ressalta-se que a alta absorção de ondas no THz, pela água, favorece a revelação de outros materiais nesse meio, a transparência dessa faixa em meios opacos também oferece a possibilidade de mapeamento de objetos. (RIEH, 2021)

O THz gap também permite aplicações em comunicações wireless, uma vez que apresenta elevadas larguras de bandas nessa faixa, quando comparados a faixas no GHz, permitindo a construção de dispositivos com alta taxa de transferência de dados (SOUZA, 2021; RIEH, 2021).

Entretanto, atenuação é um grande desafio para essa aplicação, visto que, em razão do alto nível de atenuação dessa faixa na atmosfera terrestre, a propagação de ondas no ar é limitada, havendo a necessidade da construção de dispositivos com boa eficiência. No caso de antenas, objeto desse estudo, existe a necessidade de antenas com alto ganho (SOUZA, 2021; RIEH, 2021).

Adjunto disto, existe a carência de dispositivos, com a possibilidade de manipular ondas nessa faixa, ao qual incluem geração e detecção de ondas. Pois há a necessidade da seleção de materiais que possam manter suas propriedades com o aumento temperatura, em razão da variação de temperatura provocada pela absorção de ondas da banda do THz (RIEH, 2021).

3 OBJETIVOS

3.1 Objetivo Geral

O objetivo desse estudo é projetar antenas e metamateriais utilizando $Ti_3C_2T_x$ (*MXene*) com base em dados experimentais, disponíveis na literatura para esse nanomaterial.

3.2 Objetivos específicos

- Revisar conteúdo acerca do $Ti_3C_2T_x$, visando o desenvolvimento de dispositivos;
- Aplicar método numérico para a interpretação das propriedades de $Ti_3C_2T_x$ na faixa do THz gap em softwares comerciais de simulação;
- Revisar, projetar e analisar propriedades óticas da permitividade e permeabilidade em metamateriais;
- Projetar antenas para o THz gap e avaliar propriedades como parâmetro de espalhamento S11, distribuição de campo, ganho, diagrama de radiação, casamento de impedância da antena e melhorar suas propriedades.

4 ORGANIZAÇÃO DA MONOGRAFIA

Essa monografia está organizada em 12 capítulos. O capítulo 1 introduz a temática de antenas e de faixas do THz, expondo pontos que serão abordados posteriormente.

O capítulo 2 apresenta a justificativa e relevância desse estudo, conceituando a faixa do THz e elucidando acerca das dificuldades e desafios coexistentes para utilização dessa faixa.

Com os desafios estabelecidos, o capítulo 3 apresenta os objetivos desse estudo, ao qual é constituído da construção do projeto como objetivo geral, enquanto que os objetivos específicos abordam nuances que permeiam a construção.

O capítulo 4 apresenta a estrutura da monografia. O capítulo 5 contém a teoria de antenas, demonstrando as equações utilizados para o desenvolvimento da geometria do projeto e os parâmetros que serão analisados no pós processamento para identificar o desempenho.

O capítulo 6 inicia o debate acerca das propriedades óticas que constituem os materiais, esse capítulo apresenta conceitos físicos como permissividade, permeabilidade, índice de refração e expõe modelos numéricos para a obtenção dessas propriedades, o domínio acerca desses modelos são de suma importância para a modelagem do material em softwares de simulação.

O capítulo 7 promove revisão acerca do *Mxene*, enfatizando o $Ti_3C_2T_x$ e abordando sua origem, propriedades, síntese e aplicações. O capítulo 8 revisa os conceitos de metamateriais, suas propriedades e métodos de análise.

Os capítulos 9 e 10 apresentam a construção do modelo numérico, definição das condições de contorno utilizadas para a simulação e os resultados alcançados. Por fim, o capítulo 11 e 12 apresentam a conclusão desse estudo, seguido de sugestão para trabalhos futuros.

5 TEORIA DE ANTENAS

Antenas são dispositivos responsáveis pela transmissão ou recepção de ondas eletromagnéticas, sendo que ondas são uma forma de transporte de energia ou informação. Em sistemas de telecomunicação, antenas ocupam o primeiro lugar na cadeia de recepção e o último no lugar na de transmissão (COSTA, 2007; MIRANDA, 2021).

O cerne de seu funcionamento consiste na transformação de correntes elétricas em ondas eletromagnéticas, essas ondas são emitidas pela antena transmissora e a antena receptora promoverá a conversão de ondas eletromagnéticas em sinais de corrente elétrica, repassando a informação da onda (SOUZA, 2021; BALANIS, 2014, v.1).

Pode se determinar o desempenho de uma antena, através de estudos de sua eficiência e distribuição da energia radiada no espectro de atuação predeterminado (COSTA, 2007). Dependendo da objetivação da antena, esses dispositivos podem assumir diferentes formatos ou tamanhos, podendo ser mais diretivos ou atuando em frequências específicas (BALANIS, 2014, v.1).

Dentre os tipos de antenas, antenas de plaqueta com microfita¹ são objeto de estudo ao longo de anos, pois, suas características discretas, simples e versáteis, obtiveram interesse para aplicações em inúmeras áreas como em setores de aeronáutica, aeroespacial, satélite, mísseis de alto desempenho e dispositivos portáteis (COSTA, 2007; BALANIS, 2014, v.2; SOUZA, 2021; MIRANDA, 2021).

Como desvantagem, essas antenas apresentam pouca largura de banda e baixa eficiência, baixa potência e radiação espúria, havendo a necessidade do emprego de técnicas para melhorar esses parâmetros (MIRANDA, 2021; BALANIS, 2014, v.2).

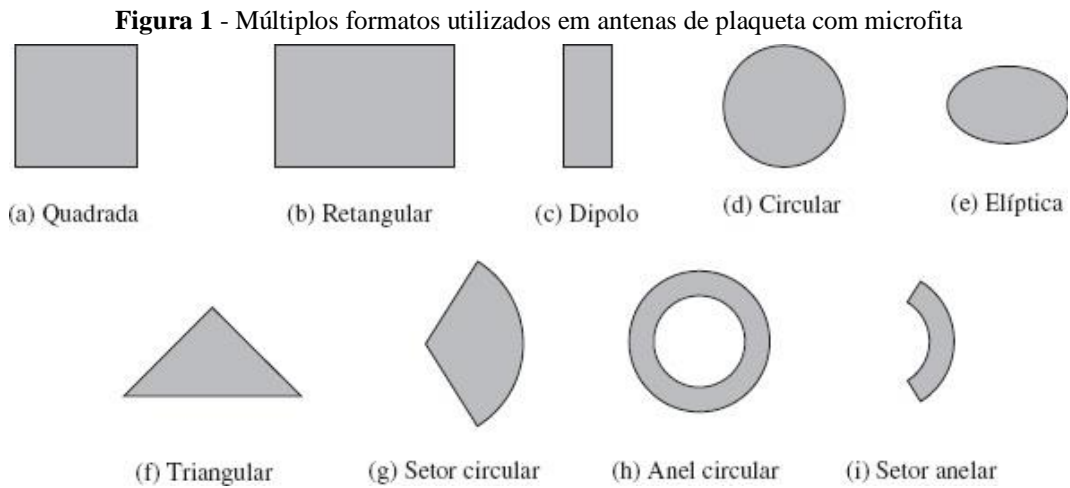
As dimensões dessas antenas, estão diretamente correlacionadas com o comprimento de onda da frequência de atuação, sendo aproximadamente metade do comprimento de onda no substrato dielétrico, como pode ser visto pela equação 5.1 (MIRANDA, 2021; SOUZA, 2021):

$$L \approx 0,49 \frac{\lambda}{\sqrt{\epsilon_r}} \quad (5.1)$$

A estrutura de antenas de microfita, consiste de uma pequena plaqueta que pode apresentar múltiplos formatos (figura 1), posicionada a uma distância h de um plano terra; normalmente, entre o plano terra e o meio, está localizado um substrato de material dielétrico.

¹ Também é referida como antenas *patch* em literaturas internacionais.

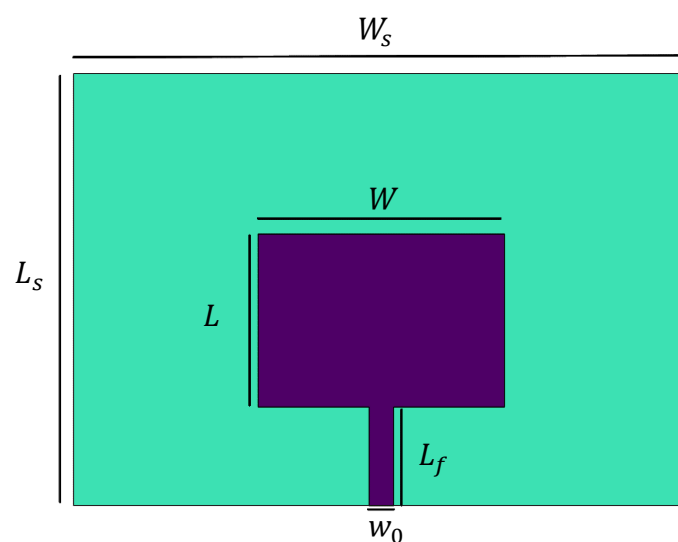
No mais, a configuração de plaqueta mais utilizada para esse modelo de antena é o formato retangular (BALANIS, 2014, v.2).



Fonte: BALANIS, 2014, v.2

A versatilidade das antenas de plaqueta também está presente no método de alimentação, podendo ser aplicado diversas técnicas como: microlinha, cabo coaxial, alimentação por guia de onda ou acoplamento por abertura (BALANIS, 2014, v.2; MIRANDA, 2021). A figura 2 apresenta o modelo de antena desenvolvido nesse estudo.

Figura 2 - Modelo de plaqueta com microlinha simuladas nesse estudo.



Fonte: Autoria Própria

5.1 Projeto de antena de plaqueta com microfita

Esse estudo elabora uma antena microfita com plaqueta retangular e utiliza o modelo de linha de transmissão para a elaboração das dimensões do projeto. Esse modelo leva em consideração o franjamento presente nas bordas da plaqueta retangular; esse efeito de borda é proveniente das dimensões laterais finitas da plaqueta. O teor de franjamento está em função da espessura do substrato com a dimensão da plaqueta, sendo L/h para o campo E em um plano x-y (BALANIS, 2014, v.2).

O franjamento também está correlacionado com a constante dielétrica do meio ϵ_r . Esses efeitos de franjamento podem ser levados em consideração durante a construção do projeto se aplicado uma constante dielétrica efetiva ϵ_{eff} . Portanto, tendo conhecimento da constante dielétrica do material utilizado como substrato, a espessura e a frequência de ressonância desejada, ϵ_{eff} pode ser definido pela equação 5.2 (BALANIS, 2014, v.2; MIRANDA, 2021; SOUZA, 2021).

$$\epsilon_{eff} = \frac{\epsilon_r + 1}{2} + \frac{\epsilon_r - 1}{2} \left[1 + 12 \frac{h}{W} \right]^{-\frac{1}{2}} \quad (5.2)$$

Onde W é a Largura da plaqueta e pode ser definido como:

$$W = \frac{1}{2f_r \sqrt{\mu_0 \epsilon_0}} \sqrt{\frac{2}{\epsilon_r + 1}} \quad (5.3)$$

Para considerar o efeito de franjamento, as dimensões da plaqueta são estendidas por uma distância ΔL que são determinadas na equação 5.4 (BALANIS, 2014, v.2; MIRANDA, 2021; SOUZA, 2021).

$$\Delta L = 0.412h \frac{(\epsilon_{eff} + 0,3) \left(\frac{W}{h} + 0,264 \right)}{(\epsilon_{eff} - 0,258) \left(\frac{W}{h} + 0,8 \right)} \quad (5.4)$$

Desse modo, o comprimento efetivo da plaqueta é definido de acordo com a equação 5.5.

$$L = \frac{1}{2f_r \sqrt{\mu_0 \epsilon_0} \sqrt{\epsilon_{eff}}} - 2\Delta L \quad (5.5)$$

A largura w_0 da microfita pode ser definida de acordo com as equações a) e b) em 5.6 (BALANIS, 2014, v.2).

$$\begin{cases} z_c = \frac{60}{\sqrt{\epsilon_{eff}}} \left[\ln \left(\frac{8h}{w_0} + \frac{w_0}{4h} \right) \right]; \frac{w_0}{h} < 1 \text{ a)} \\ z_c = \frac{120\pi}{\sqrt{\epsilon_{eff}} \left[\frac{w_0}{h} + 1,393 + 0,667 \ln \left(\frac{w_0}{h} + 1,444 \right) \right]}; \frac{w_0}{h} > 1 \text{ b)} \end{cases} \quad (5.6)$$

Sendo que o comprimento da microfita foi estabelecido pelas equações 5.7 e 5.8.

$$\lambda_g = \frac{\lambda}{\sqrt{\epsilon_{eff}}} \quad (5.7)$$

$$L_f = \frac{\lambda_g}{4} \quad (5.8)$$

5.2 Parâmetros para análise de uma antena

5.2.1 Coeficiente de reflexão e transmissão

Entre os parâmetros fundamentais, o mais aplicado é o coeficiente de reflexão. Por intermédio desse parâmetro, é possível analisar a frequência de ressonância, largura de banda e casamento de impedância, permitindo visualizar a faixa de frequências de operação da antena (MIRANDA, 2021; SOUZA, 2021). O coeficiente Γ_r pode ser obtido pela razão da potência incidente V_1^- pela potência refletida V_1^+ (equação 5.9) (SOUZA, 2021, POZAR, 2011).

$$S_{11} = \Gamma_r = \frac{V_1^-}{V_1^+} \quad (5.9)$$

O parâmetro S_{21} definido pela equação 5.10, é o coeficiente de transmissão e representa a razão da potência transmitida V_2^- na porta 2 pela potência radiada V_1^+ na porta 1 (POZAR, 2011).

$$S_{21} = \frac{V_2^-}{V_1^+} \quad (5.10)$$

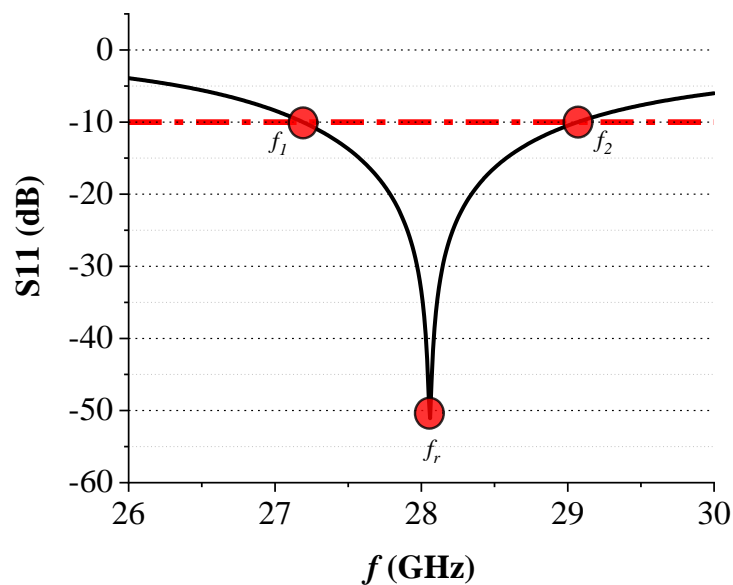
Em termos de função de impedância da carga (Z_l) o coeficiente Γ_r pode ser definido como:

$$\Gamma_r = \frac{Z_l - Z_0}{Z_l + Z_0} \quad (5.11)$$

Onde Z_0 é a impedância característica de alimentação. Para representar o coeficiente de reflexão por meio do parâmetro de espalhamento S_{11} em decibéis, é utilizado a equação 5.12. A figura 3 demonstra um exemplo de gráfico do parâmetro de espalhamento S_{11} .

$$S_{11} = 20\log[\Gamma_r] \quad (5.12)$$

Figura 3 - Gráfico do parâmetro de espalhamento S_{11} , os pontos f_1 e f_2 demonstram o comprimento da largura de banda em -10 dB, f_r é a frequência de ressonância.



Fonte: Autoria Própria

5.2.2 Largura de banda

Largura de banda representa a faixa de frequência que a antena pode irradiar ou receber energia adequadamente, atendendo as especificações requeridas (MIRANDA, 2021; SOUZA, 2021). A largura de banda leva em consideração que ao menos 90% de toda potência fornecida pela alimentação seja entregue a antena, ou seja, a largura de banda engloba toda a faixa de

frequências que o coeficiente de espelhamentos tenha valores menores ou iguais a -10 dB, como pode ser visto pela figura 3, portanto a largura de banda pode ser expressa como:

$$BW = f_2 - f_1 \quad (5.13)$$

convertendo para termos percentuais, a largura de banda pode ser definida pela equação 5.14 (MIRANDA, 2021; SOUZA, 2021).

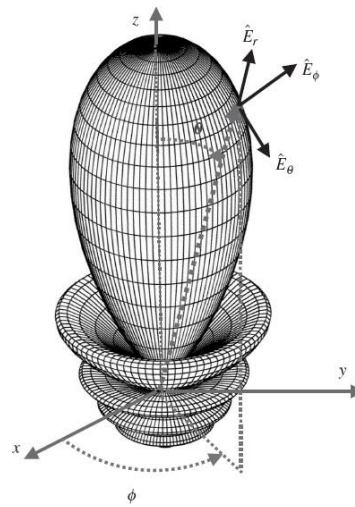
$$\%BW = \frac{BW}{f_r} \times 100 \quad (5.14)$$

5.2.3 Diagrama de radiação

Esse diagrama é uma representação gráfica que possibilita a visualização do comportamento de radiação da antena em função de coordenadas espaciais (campos distantes), ao qual, pode ser representado tanto em 3D (figura 4), quanto 2D, através de gráficos polares com ângulos de observação (φ , θ) e com os campos normalizados ou potências radiadas em função das coordenadas (SOUZA, 2021; MIRANDA, 2021; BALANIS, 2014, v.1).

As propriedades que podem ser visualizadas por esse diagrama incluem a intensidade de radiação, densidade de fluxo de potência, diretividade, fase ou polarização. Os campos podem representar formas dos campos magnéticos ou elétricos irradiados ou potências radiadas. Geralmente, esse diagrama, é expresso em escalas logarítmicas em decibéis (dB), pois, essa escala permite a melhor visualização de valores muito pequenos (lóbulos secundários) (MIRANDA, 2021; BALANIS, 2014, v.1).

Figura 4 - Exemplo de Diagrama de radiação com boa diretividade.



Fonte: BALANIS, 2014, v.1

5.2.4 Eficiência, diretividade e ganho

A eficiência leva em consideração as perdas presentes nas antenas e que podem ser perdas reflexivas, ocasionadas por falta de casamento de impedância ou perdas nos materiais, que podem ser condutores ou dielétricos, ao qual são perdas ocasionadas em virtude de propriedades estruturais intrínsecas, presentes nos materiais (MIRANDA, 2021; SEBASTIAN et al, 2017). A eficiência total (ϵ_0) pode ser definida pelo produto das eficiências, no qual, ϵ_r é a eficiência de reflexão; ϵ_c é a eficiência condutiva e ϵ_d a eficiência dielétrica, como pode ser visualizado na equação 5.15 (BALANIS, 2014, v.1).

$$\epsilon_0 = \epsilon_r \epsilon_c \epsilon_d \quad (5.15)$$

A diretividade promove a comparação de potência irradiada (U) por uma antena em análise com os dados de potência de uma antena isotrópica ideal (U_0) na mesma direção, de acordo com a razão:

$$D = \frac{U}{U_0} \quad (5.16)$$

Com o conhecimento acerca da eficiência da antena e sua diretividade, o ganho pode ser determinado pela equação 5.17.

$$G_0(\theta, \varphi) = \epsilon_0 D_0(\theta, \varphi) \quad (5.17)$$

O ganho absoluto representa a potência aceita pela antena, pode ser analisado por diagrama de radiação e seus resultados leva em consideração perdas citadas anteriormente.

5.2.5 Impedância de entrada

Outro parâmetro de suma importância é a impedância de entrada. Balanis (2014) conceitua a impedância de entrada como " a impedância apresentada pela antena em seus terminais ou a razão entre tensão e corrente em um par de terminais, ou a razão entre componentes apropriadas de campos elétrico e magnético em um ponto" (BALANIS, 2014, v.1, p.147), a impedância pode ser determinada pela razão entre a tensão e corrente, de acordo com a equação 5.18 (BALANIS, 2014, v.1; SOUZA, 2021).

$$Z_{in} = \frac{V_{in}}{I_{in}} = R_l + R_r + jX \quad (5.18)$$

Em que R_l é a resistência de perda, decorrente de aquecimento, R_r parte real da impedância de entrada e X reatância, parte imaginária da impedância. A impedância de entrada pode ser definida pelo coeficiente de reflexão por:

$$Z_{in} = Z_0 \left(\frac{1 + \Gamma_r}{1 - \Gamma_r} \right) \quad (5.19)$$

A equação 5.19 indica que em $Z_{in} = Z_0$, a potência advinda da linha alimentação é máxima e o coeficiente de reflexão é nulo, resultando em bom casamento de impedância (BALANIS, 2014, v.1; SOUZA, 2021).

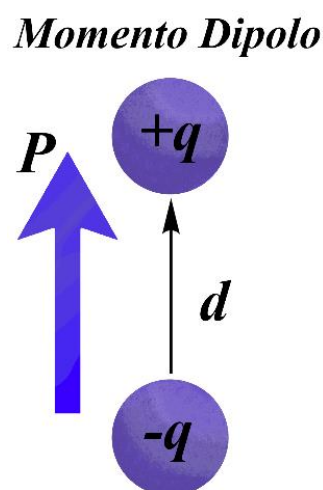
6 PROPRIEDADES ÓTICAS DOS MATERIAIS

Os modelos numéricos de função dielétricas são necessários para auxiliar a análise de dados obtidos por elipsometria espectroscópica. Geralmente, é empregado quando a função dielétrica da amostra é desconhecida, por exemplo, para meios transparentes os modelos de Cauchy ou Sellmeier são empregados, para meios com absorção de cargas livres, o modelo de Drude é indicado e para expressar a polarização em espectros de UV/visível ou infravermelho, modelos de Lorentz, Tauc-Lorentz, Harmonic oscillator approximation (HOA) e de Função dielétrica (MDF)² são utilizados (FUJIWARA, 2007; CHEN et al, 2019). A seguir será abordado alguns modelos.

6.1 Propriedades dielétricas

Meios dielétricos possuem grande polarização, os metais por sua vez, apresentam fraca polarização dielétrica, visto que campos elétricos externos produzem fluxo de corrente nos metais (FUJIWARA, 2007). A influência de um campo elétrico em um meio, promove a distribuição espacial entre as cargas positivas e negativas, formando regiões positivas e negativas no meio, esse fenômeno é denominado como polarização dielétrica. O par de cargas (q^+ ou q^-) gerados pela polarização dielétrica de um meio e separados por uma distância d , são referidos como dipolo elétrico (FUJIWARA, 2007).

Figura 5 - Exemplo de polarização.



Fonte: Autoria própria

² Tradução para *Model Dielectric Function (MDF)*

A magnitude da polarização gerada pode ser quantificada pelas propriedades de permissividade ou constante dielétrica; é possível visualizar fisicamente a permissividade, utilizando um capacitor de placa paralela sobre a influência de um campo elétrico aplicado por uma corrente alternada (FUJIWARA, 2007). Se o meio entre as placas for o vácuo, então o campo elétrico pode ser definido de acordo com a equação 6.1.

$$\mathbf{E} = \mathbf{D}/\varepsilon_0 \quad (6.1)$$

Ao qual D é a densidade de carga na superfície do capacitor, também conhecida no eletromagnetismo como deslocamento elétrico (C/m^2) e ε_0 é a constante dielétrica do vácuo. As cargas na superfície das placas contribuem para a geração do campo elétrico \mathbf{E} e para polarização dielétrica \mathbf{P} , aplicando a polarização dielétrica, o campo elétrico \mathbf{E} é denotado pela equação 6.2 (FUJIWARA, 2007).

$$\mathbf{E} = (\mathbf{D} - \mathbf{P})/\varepsilon_0 \quad (6.2)$$

O campo elétrico externo induz a polarização dielétrica por meio de indução elétrica; a polarização dielétrica é considerada semelhante a oscilação de uma mola; quando as frequências da luz e da mola são coincidentes, ocorre uma oscilação ressonante e a luz é absorvida pelo meio dielétrico (FUJIWARA, 2007). A equação 6.2 é redefinida quando um meio m é expresso por de permissividade ε_m diferente do vácuo ε_0 , adotando a constante dielétrica do meio (FUJIWARA, 2007).

$$\mathbf{E} = \mathbf{D}/\varepsilon_m \quad (6.3)$$

A permissividade e permeabilidade podem ser definidas pela equação de Maxwell como tensores de acordo com as equações 6.4 e 6.5 (CUNHA, 2020):

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \begin{bmatrix} \varepsilon_{xx} & \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{xz} \\ \varepsilon_{yx} & \varepsilon_{yy} & \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{zx} & \varepsilon_{zy} & \varepsilon_{zz} \end{bmatrix} \quad (6.4)$$

$$\boldsymbol{\mu} = \begin{bmatrix} \mu_{xx} & \mu_{xy} & \mu_{xz} \\ \mu_{yx} & \mu_{yy} & \mu_{yz} \\ \mu_{zx} & \mu_{zy} & \mu_{zz} \end{bmatrix} \quad (6.5)$$

considerando que o material seja isotrópico, então $\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \varepsilon_{zz}$ e os demais valores da matriz são iguais a zero. Nesse caso, $\boldsymbol{\varepsilon}$ e $\boldsymbol{\mu}$ se tornam grandezas escalares (CUNHA, 2020).

A constante dielétrica varia de acordo com a frequência da polarização dielétrica, esse comportamento é referido como função dielétrica ou dispersão dielétrica. Aplicando a Lei de Ampere, os parâmetros dispersivos dos materiais podem ser definidos como (FUJIWARA, 2007; EPISKOPOU et al, 2012):

$$\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{J}_f + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} \quad (6.6)$$

onde \mathbf{J}_f pode ser expresso como: $\mathbf{J}_f = \mathbf{J}_i + \mathbf{J}_c$ Mas será assumido apenas a densidade de corrente \mathbf{J}_c ; considerando o meio como isotrópico e linear, os parâmetros \mathbf{J} e \mathbf{D} podem ser escritos utilizando a série de Taylor:

$$\mathbf{D} = \varepsilon \mathbf{E} + \varepsilon_1 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} + \varepsilon_2 \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} + \varepsilon_3 \frac{\partial^3 \mathbf{E}}{\partial t^3} + \dots \varepsilon_n \frac{\partial^n \mathbf{E}}{\partial t^n} \quad (6.7)$$

$$\mathbf{J} = \sigma \mathbf{E} + \sigma_1 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} + \sigma_2 \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} + \sigma_3 \frac{\partial^3 \mathbf{E}}{\partial t^3} + \dots \sigma_n \frac{\partial^n \mathbf{E}}{\partial t^n} \quad (6.8)$$

Onde n representa valores de ponderação para termos de altas ordens (EPISKOPOU et al, 2012). Considerando as equações 6.7 e 6.8 no domínio da frequência em estado estacionário e aplicando o harmônico $e^{-i\omega t}$, a equação se torna:

$$\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{J}_f - i\omega \mathbf{D} \quad (6.9)$$

$$\mathbf{D} = \varepsilon \mathbf{E} - i\omega \varepsilon_1 \mathbf{E} - \omega^2 \varepsilon_2 \mathbf{E} + i\omega^3 \varepsilon_3 \mathbf{E} + \dots \equiv (\varepsilon'(\omega) - i\varepsilon''(\omega)) \mathbf{E} \quad (6.10)$$

$$\mathbf{J}_c = \sigma \mathbf{E} - i\omega \sigma_1 \mathbf{E} - \omega^2 \sigma_2 \mathbf{E} + i\omega^3 \sigma_3 \mathbf{E} + \dots \equiv (\sigma'(\omega) - i\sigma''(\omega)) \mathbf{E} \quad (6.11)$$

sendo $\varepsilon(\omega)$ e $\sigma(\omega)$ representam as propriedades intrínsecas de permitividade e condutividade respectivamente (EPISKOPOU et al, 2012). A condutividade e a permitividade podem ser correlacionados pelas equações 6.12 a 6.14 (EPISKOPOU et al, 2012).

$$\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{J}_f - i\omega\mathbf{D} = [\sigma(\omega) - i\omega\varepsilon(\omega)]\mathbf{E} = i\omega \left[\varepsilon(\omega) + i\frac{\sigma(\omega)}{\omega} \right] \mathbf{E} \quad (6.12)$$

$$\varepsilon_{eff} = \sigma(\omega) - i\omega\varepsilon(\omega) \quad (6.13)$$

$$\sigma_{eff} = \varepsilon(\omega) + i\frac{\sigma(\omega)}{\omega} \quad (6.14)$$

As equações 6.12, 6.13 e 6.14 representam os parâmetros efetivos para permitividade (ε_{eff}) e condutividade (σ_{eff}), que normalmente são obtidos experimentalmente, esses parâmetros representam as combinações dessas propriedades entre meios distintos (CUNHA, 2020; EPISKOPOU et al, 2012).

Esses valores representam uma boa aproximação das propriedades dispersivas dos materiais com a permitividade variando em função da frequência angular (FUJIWARA, 2007).

Particionando em partes real e imaginária, infere-se que as equações estão correlacionadas pela parte imaginária de uma propriedade que contém a parte real de outra propriedade presente em sua equação, como pode ser visualizado entre as equações 6.15 a 6.19 (EPISKOPOU et al, 2012).

$$\begin{aligned} \nabla \times \mathbf{H} &= \{[\sigma'(\omega) + i\omega\varepsilon''(\omega)] - i[\sigma''(\omega) - i\omega\varepsilon'(\omega)]\}\mathbf{E} \\ &= i\omega \left\{ \left[\varepsilon'(\omega) - i\frac{\sigma''(\omega)}{\omega} \right] - i \left[\varepsilon''(\omega) + i\frac{\sigma'(\omega)}{\omega} \right] \right\} \mathbf{E} \end{aligned} \quad (6.15)$$

$$\sigma_{eff}' = \sigma'(\omega) + i\omega\varepsilon''(\omega) \quad (6.16)$$

$$\sigma_{eff}'' = \sigma''(\omega) - i\omega\varepsilon'(\omega) \quad (6.17)$$

$$\varepsilon_{eff}' = \varepsilon'(\omega) - i\frac{\sigma''(\omega)}{\omega} \quad (6.18)$$

$$\varepsilon_{eff}'' = \varepsilon''(\omega) + i\frac{\sigma'(\omega)}{\omega} \quad (6.19)$$

Assim como os valores efetivos, a permitividade (ε) é um número complexo (equação 6.20). Quando a frequência angular é bastante baixa, o valor de ε' é representado pela constante dielétrica estática ε_s ; dependendo do material, o valor de ε_s nem sempre é o indicativo favorável para a determinação da permitividade em frequências do THz, cargas livres no meio podem

absorver a luz nesse espectro, esse comportamento pode ser visualizado em metais e semicondutores em frequências abaixo da frequência de plasma do material e não costuma ser representado pela constante ε_s (FUJIWARA, 2007; KYAMO, 2022).

$$\varepsilon = \varepsilon' - i\varepsilon'' \quad (6.20)$$

De forma geral, a constante dielétrica relativa ou permitividade relativa ε_r pode ser expressa pela razão da permitividade do meio com a permitividade no vácuo (equação 6.21). A condutividade complexa pode ser relacionada com a permitividade pela equação 6.22 (FUJIWARA, 2007; CHEN et al, 2019)

$$\varepsilon_r = \varepsilon_m / \varepsilon_0 \quad (6.21)$$

$$\sigma(\omega) = i\varepsilon_0\omega[\varepsilon_\infty - \varepsilon(\omega)] \quad (6.22)$$

A constante dielétrica também pode ser obtida por:

$$\varepsilon = 1 + \left(\frac{\mathbf{P}}{\varepsilon_0 \mathbf{E}} \right) = 1 + \chi \quad (6.23)$$

Em que χ representa susceptibilidade dielétrica. O campo elétrico \mathbf{E} com corrente alternada, gera dipolos elétrico variáveis com o tempo, resultando em ondas eletromagnéticas irradiadas por esses dipolos, também conhecida como radiação de dipolo (FUJIWARA, 2007).

O índice complexo de refração ($N = \eta - ik$) pode ser definido como:

$$N^2 \equiv \varepsilon\mu \quad (6.24)$$

$$N \equiv \sqrt{\varepsilon\mu} \quad (6.25)$$

a conversão do índice de refração para constante dielétrica é expressa por:

$$\varepsilon' = \eta^2 - k^2 \quad (6.26)$$

$$\varepsilon'' = 2\eta k \quad (6.27)$$

A parte imaginária da permitividade é proporcional ao coeficiente de extinção k ; em análise de meios em frequências do visível próximas ao UV, picos de ε'' indicam a oscilação ressonante da mola, indicando absorção da luz. Picos de ε'' em frequências próximas ao infravermelho pode ser indicativo de polarização atômica, que é visível em alguns meios como o NaCl (FUJIWARA, 2007; DU et al, 2018; KYAMO, 2022). A conversão de coeficiente dielétrico para índice de refração é dada por:

$$\eta = \{[\varepsilon' + (\varepsilon'^2 + \varepsilon''^2)^{1/2}]/2\}^{1/2} \quad (6.28)$$

$$k = \{-\varepsilon' + (\varepsilon'^2 + \varepsilon''^2)^{1/2}\}^{1/2} \quad (6.29)$$

6.2 Modelo de Drude

O Modelo de Drude, desenvolvido em 1900, visa explicar propriedades como a condutividade elétrica e térmica presente em metais; o modelo foi elaborado após J.J Thomson sugerir em 1897, com a descoberta de elétrons, um mecanismo que explicava a presença de cargas negativas presentes na matéria. O modelo de Drude é aplicado para descrever a absorção de luz proveniente de elétrons livres em metais ou portadores de cargas de semicondutores, ao qual alteram a função dielétrica do material. O modelo foi desenvolvido baseado na teoria cinética dos gases e considera a condução elétrica como movimento de "gás de elétrons" no material (FUJIWARA, 2007; ASHCROFT e MERMIM, 1976).

Drude assumiu que os elétrons são cargas negativas e que o metal é eletricamente neutro, então a quantidade de cargas positivas e negativas são equivalentes. O modelo considera que apenas os elétrons de condução presente na banda de valência se movimentam enquanto que os íons com o núcleo e elétrons mais próximos a ele, permanecem imóveis (MERMIM e ASHCROFT, 1976). Então Drude aplicou a teoria que "gás" com elétrons de massa m_e entravam em choque contra os íons metálicos imóveis. Para definir a densidade do gás eletrônico (N_e), foi elaborado a equação 6.30 (CHEN et al, 2019; ASHCROFT e MERMIM, 1976):

$$N_e = \frac{Z\rho_m}{A} N_a \quad (6.30)$$

Onde A é a massa atômica do elemento metálico, ρ_m a densidade do elemento metálico, Z número atômico e N_a o número de Avogadro; N_e o número de elétrons por unidade de

volume, também denominado como densidade de carga. A densidade de carga deve ser alta o suficiente para a obtenção de ε' negativo (FUJIWARA, 2007; ASHCROFT e MERMIM, 1976).

Para o tratamento de gás de elétrons, Drude assume que:

1. A interação entre elétrons é negligenciada, assim como a interação com os íons metálicos, fazendo que após o choque, a partícula de elétron (considerada uma esfera) mantenha seu rumo de acordo com a leis de Newton (ASHCROFT e MERMIM, 1976).
2. A colisão entre os elétrons e os íons alteram a velocidade de movimento do elétron (ASHCROFT e MERMIM, 1976).
3. A probabilidade de ocorrer uma colisão de elétrons com íons é de $\Gamma \equiv \langle \tau \rangle^{-1}$, onde $\langle \tau \rangle$ é conhecido como tempo de relaxação, de colisão ou "tempo livre". Posteriormente será visto que Γ também é denominado como parâmetro de alargamento ou coeficiente de amortecimento³ (FUJIWARA, 2007; ASHCROFT e MERMIM, 1976).
4. É assumido que os elétrons alcançam equilíbrio térmico após as colisões (FUJIWARA, 2007; ASHCROFT e MERMIM, 1976).

O modelo também determinar um valor para a condutividade DC do material. Pela lei de Ohm, a tensão em um fio de resistência R é igual a $V = IR$. Sendo a resistividade (ρ) proporcional entre o campo elétrico (E) e corrente (J), então:

$$\mathbf{E} = \rho \mathbf{J} \quad (6.31)$$

A densidade da corrente é um vetor paralelo ao fluxo da carga, portanto, se uma quantidade de N_e elétrons se movimenta com velocidade v paralelo a densidade de corrente, no tempo dt e seguindo a direção de v ; esses elétrons com carga $-e$ vão atravessar uma distância vdt ; desse modo, a densidade de corrente pode ser determinada como (MERMIM e ASHCROFT, 1976).

$$j = -N_e e v \quad (6.32)$$

Considerando um elétron no tempo $t = 0$ após a colisão, uma velocidade adicional definida por $-\frac{eE\tau}{m}$ é adquirida e então J se torna:

³ Traduzido de *damping coefficient*

$$\mathbf{J} = \left(\frac{N_e e^2 \tau}{m} \right) \mathbf{E} \quad (6.33)$$

Portanto, a condutividade pode ser definida como:

$$\mathbf{J} = \sigma \mathbf{E}; \quad \sigma = \frac{N_e e^2 \tau}{m} \quad (6.34)$$

Sendo m a massa eletrônica. Em um semicondutor com alta densidade de carga de $> 10^{-3} \text{ cm}^{-3}$, apresenta comportamento metálico se os elétrons livres preencherem a banda de valência (FUJIWARA, 2007). Elétrons livres em um semicondutor, quando submetido a uma força eletrostática F_e , flutuam com velocidade $\langle v \rangle$ na mesma direção da força e decorrente de defeitos, se espalha em um intervalo de tempo $\langle \tau \rangle$ conhecido por tempo de espalhamento⁴ (FUJIWARA, 2007). durante o período de tempo $\langle \tau \rangle$, a força F_e induz aceleração no elétron livre. Essa força de aceleração pode ser expressa como:

$$F_f = m^* \frac{dv}{dt} = m^* \frac{\langle v \rangle}{\langle \tau \rangle} \quad (6.35)$$

Onde m^* é a massa do semicondutor. sabendo que $\langle v \rangle$ é proporcional ao campo elétrico \mathbf{E} , então:

$$\langle v \rangle = -\mu^* \mathbf{E} \quad (6.36)$$

Onde μ^* representa a constante de mobilidade de flutuação da carga livre, em alguns trabalhos, referida como mobilidade de carga, valores baixos para mobilidade de carga, resulta em altas perdas no material (KYAMO, 2022; FUJIWARA, 2007). O sinal negativo na equação 6.36 indica que a direção de movimento do elétron e do campo elétrico, estão opostos.

Combinando as equações 6.35 com 6.36 e aplicando a força eletrostática $F_e = -eE$ é obtido:

⁴ Traduzido de *scattering time*

$$\mu^* = e\langle\tau\rangle/m^* \quad (6.37)$$

aplicando a equação 6.35 em 6.37:

$$m^* \frac{d^2x}{dt^2} = -F_f + F_e = -\frac{m^* dx}{\langle\tau\rangle dt} - eE_0 \exp(i\omega t) \quad (6.38)$$

Ao qual o sinal negativo em F_f indica a perda da aceleração da carga, decorrente do espalhamento. Considerando $\Gamma = \langle\tau\rangle^{-1}$ a permissividade pode ser obtida por (FUJIWARA, 2007; CHEN et al, 2019; HANNA et al, 2016):

$$\varepsilon = \varepsilon_\infty \left(1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 - i\omega\Gamma} \right) \quad (6.39)$$

sendo ε_∞ a constante dielétrica em frequências bastantes elevadas, ω_p a frequência de plasma que pode ser obtida de acordo com a equação 6.40 (FUJIWARA, 2007).

$$\omega_p = \sqrt{\frac{e^2 N_e}{\varepsilon_0 \varepsilon_\infty m^*}} \quad (6.40)$$

Enquanto que Γ pode ser determinado pela equação 6.41 (FUJIWARA, 2007).

$$\Gamma \equiv \langle\tau\rangle^{-1}; \Gamma = \frac{e}{m^* \mu^*} \quad (6.41)$$

Para a análise dos dados obtidos por elipsometria, as equações 6.42 a 6.45 são empregadas (FUJIWARA, 2007).

$$\varepsilon = \varepsilon_\infty - \frac{A^*}{E n^2 - i\Gamma E n} \quad (6.42)$$

Onde:

$$A^* = \varepsilon_\infty E_p^2 \quad (6.43)$$

$$E_p = \hbar\omega_p = \sqrt{\frac{\hbar^2 e^2 N_f}{\varepsilon_0 \varepsilon_\infty m^*}} \quad (6.44)$$

$$\Gamma = \hbar\gamma = \frac{\hbar e}{m^* \mu} \quad (6.45)$$

Sendo E_p a frequência de plasma e Γ o parâmetro de alargamento apresentado na equação 6.41 (FUJIWARA, 2007).

Hanna et al (2016), ao revisar modelos numéricos para calcular a condutividade THz em nanofios, relata que o modelo Drude não considera fenômenos de transporte que venham interferir na condutividade dos nanofios, decorrente disso, estudos de extensões de modelos de Drude são empregados para calcular a condutividade em THz com maior precisão (HANNA et al, 2016).

6.3 Modelo de Lorentz

O modelo de Lorentz assume que o elétron oscila em um fluido viscoso para um sistema em que uma carga negativa (elétron) está ligada por uma mola na carga positiva, que pode ser interpretada como o núcleo de um átomo. A posição do núcleo é fixa, decorrente da elevada diferença entre a massa do elétron e do núcleo atômico (FUJIWARA, 2007).

Aplicando esse modelo na segunda de lei de Newton, ele é expresso como:

$$m_e \frac{d^2 x}{dt^2} = -m_e \Gamma \frac{dx}{dt} - m\omega_0^2 x - eE_0 \exp(i\omega t) \quad (6.46)$$

ao qual m é massa do elétron, e é a carga do elétron e Γ é a constante proporcional de força viscosa, também referida como *damping coefficient* (FUJIWARA, 2007).

O primeiro termo da equação 6.46 representa a força viscosa do fluido viscoso; o segundo termo expressa que a restauração do elétron, movimentado pela influência do campo, está em concordância com a lei de Hook ($F^* = -k_F x$) com ω_0 sendo a frequência de ressonância da mola ($\omega_0 = \sqrt{k_F/m}$) e a força eletrostática ($F_e = qE$) está representada pelo último termo da equação, portanto, a equação 6.46 expressa a força de oscilação do elétron. Quando submetido a um campo elétrico externo, esse elétron irá oscilar na mesma frequência que o campo elétrico (FUJIWARA, 2007).

Assumindo que $(x(t) = a \exp(i\omega t))$, as derivadas dx/dt e d^2x/dt^2 serão, respectivamente $(dx/dt = ia\omega \exp(i\omega t))$ e $(\frac{d^2x}{dt^2} = -ia\omega^2 \exp(i\omega t))$, realocando esses termos na equação 6.46, é obtido (FUJIWARA, 2007):

$$a = -\frac{eE_0}{m} \frac{1}{(\omega_0^2 - \omega^2) + i\Gamma\omega} \quad (6.47)$$

Em que a amplitude “ a ” indica a existência de diferenças entre a fase do elétron oscilante com a do campo elétrico que induz a oscilação forçada (FUJIWARA, 2007).

Sabendo que $P = -eN_e x(t)$ e $E = E_0 \exp(i\omega t)$ e aplicando na equação 6.23, a constante dielétrica pode ser obtida por:

$$\varepsilon = 1 + \frac{e^2 N_e}{\varepsilon_0 m} \frac{1}{(\omega_0^2 - \omega^2) + i\Gamma\omega} \quad (6.48)$$

Essa equação representa o modelo de Lorentz. Para a análise de dados em equipamentos de elipsometria, a equação 6.49 pode ser expressa usando energia de fóton⁵ (En) (FUJIWARA, 2007; CHEN et al, 2019; KYAMO, 2022):

$$\varepsilon = 1 + \sum_j \frac{A_j En_{0j}}{(En_{0j}^2 - En^2) + i\Gamma_j En} \quad (6.49)$$

Onde j é a quantidade de osciladores e o termo A_j representa a amplitude do oscilador (FUJIWARA, 2007).

6.4 Modelo de Drude-Smith

O modelo de Drude-smith é uma extensão do modelo de Drude, que leva em consideração fenômenos de localização ou desordem, presente nas estruturas dos materiais, ao qual pode ocasionar interrupções no transporte de cargas de portadores⁶ (HANNA et al, 2016).

⁵ Tradução para *photon energy (eV)*

⁶ Na literatura é citado como *carrier charger*

O modelo de Drude-Smith permite descrição do espalhamento de cargas em direções preferenciais, diferentemente do modelo de Drude, que considera o espalhamento de cargas isotrópico (HANNA et al, 2016). A expressão para condutividade pode ser visualizada a seguir

$$\sigma(\omega) = \frac{N_e e^2}{m^*} \frac{i}{\omega + i\gamma_{DS}} \left[1 + \sum_{p=1}^{\infty} \frac{c_p}{\left(1 - \frac{i\omega}{\gamma_{DS}}\right)^p} \right] \quad (6.50)$$

Nessa equação γ_{DS} é a taxa de espalhamento⁷ de Drude-Smith, ele representa τ_{DS}^{-1} , sendo τ_{DS} tempo de espalhamento de Drude-Smith, τ_{DS} pode ser diferente do $\langle\tau\rangle$ de drude, dependendo do material (COCKER et al, 2017; HANNA et al, 2016).

Após um evento p de espalhamento da carga, a fração retida da velocidade inicial do portador é sinalizada por c_p . Esse parâmetro também é chamado como parâmetro de persistência a velocidade, ele indica a anisotropia do espalhamento ocorrido, no evento p (HANNA et al, 2016).

O valor de c_p representa $\cos\theta$, sendo θ o ângulo de espalhamento; para comportamento semelhante a Drude, $c_p = 0$; espalhamento direto⁸ é positivo ($c_p = 0 \leq 1$) para espalhamento totalmente direto $c_p = 1$; espalhamentos inversos⁹ c_p é negativo ($c_p = -1 \leq 0$) e $c_p = -1$ quando o espalhamento for totalmente inverso, o $c_p = -1$, c_p também pode ser considerado um efeito de memória, ao qual o portador retém informações de estados anteriores ao espalhamento. Estudos de Li, demonstram que o *MXene* apresenta parâmetro de espalhamento negativo, indicando a preferência por espalhamentos inversos por parte dos elétrons. (Li et al, 2019; Li et al, 2020; COCKER et al, 2017; HANNA et al, 2016).

Apesar do somatório presente na equação 6.50, é usualmente aplicado apenas o primeiro termo, também conhecido como aproximação de espalhamento único (HANNA et al, 2016).

Pelo espalhamento único a mobilidade eletrônica em corrente contínua, pode ser determinada por:

$$\mu = (1 + c_1) \frac{e}{m^* \gamma_{DS}} \quad (6.51)$$

⁷ Referido como *Scattering rate*

⁸ *Foward Scattering*

⁹ *Backward Scattering*

mas, algumas publicações também aplicam a equação 6.52:

$$\mu = \frac{e}{m^* \gamma_{DS}} \quad (6.52)$$

Contudo, a equação 6.52 acaba superestimando a mobilidade (HANNA et al, 2016). A Permittividade complexa de Drude-Smith pode ser obtida por:

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_\infty - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\omega\omega_\tau} \left[1 + c_1 \frac{\omega_\tau}{\omega_\tau - i\omega} \right] \quad (6.53)$$

onde ω_p é a frequência de plasma, ω_τ é a taxa de amortecimento definida por $\omega_\tau = 2\pi\tau_{DS}^{-1}$ e c_1 é o parâmetro fenomenológico para apenas o primeiro termo (DU et al, 2017). A densidade de carga e a condutividade DC podem ser determinados por:

$$N_e = \frac{\varepsilon_0 \omega_p^2 m^*}{e^2} \quad (6.54)$$

$$\sigma_{dc} = (1 + c_1) \frac{\varepsilon_0 \omega_p^2}{\omega_\tau} \quad (6.55)$$

Os parâmetros N_e , γ_{DS} e c_p podem ser manipulados para equiparar a dados obtidos experimentalmente (HANNA et al, 2016).

O modelo de Drude-Smith na faixa de espectroscopia no THz, permite a visualização de alguns sistemas que quando submetidos a pulsos THz, apresentam o confinamento quântico de portadores de cargas, denominado como "confinamento fraco"¹⁰, esse confinamento é perceptível ao analisar a condutividade em THz, indicando que está correlacionado com volume explorado pelos portadores de carga, quando estão submetidos a um pulso no THz, pois, decorrente da ressonância de plasmons na superfície, o pulso de sonda no THz, movimentam carga no interior de uma nanopartícula, resultando em campo de dipolo de "despolarização" ao redor da nanopartícula, em direção oposta ao campo elétrico (COCKER et al, 2017).

Devido ao modelo impor condições de contorno em nanoescala, podendo representar viés direcional com a variação de ângulo de espalhamento, esses sistemas podem ser emulados

¹⁰ Na literatura expresso como *weak-confinement effects*

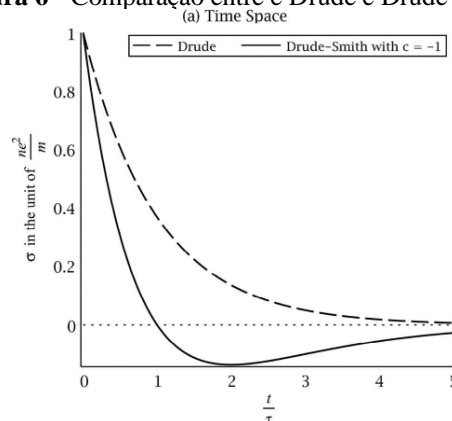
pelo modelo de Drude-Smith, ao qual permite analisar supressão de portadores de carga de longa distância (COCKER et al, 2017).

É importante frisar que existe criticismo acerca da equação para o termo c_p , isso porque quando se considera apenas a aproximação de espalhamento anisotrópica apenas para o primeiro termo, os demais eventos de espalhamento são considerados isotrópicos (HANNA et al, 2016), além disso, a origem desse parâmetro não é bem definida, limitando a percepção física nos ajustes desse modelo (HANNA et al, 2016). Entretanto, estudos de simulações Monte Carlo, feitas por NĚMEC et al (2009), indicam que os resultados fenomenológicos desse modelo, são devido a portadores livres presentes em nanopartículas (HANNA et al, 2016; NĚMEC et al, 2009).

6.5 Diferença entre os modelos

Apesar do termo de Drude conter contribuições em todos modelos discutidos nesse capítulo, é importante notar algumas diferenças entre os modelos, por exemplo, Chen e Marcus, 2021 observou que a equação de Drude promove decaimento uniforme no tempo, enquanto que o modelo de Drude-Smith apresenta um amortecimento abrupto com valor mínimo e posteriormente vai se aproximando lentamente até o valor de zero, como pode ser visto pela figura 6 (CHEN e MARCUS, 2021).

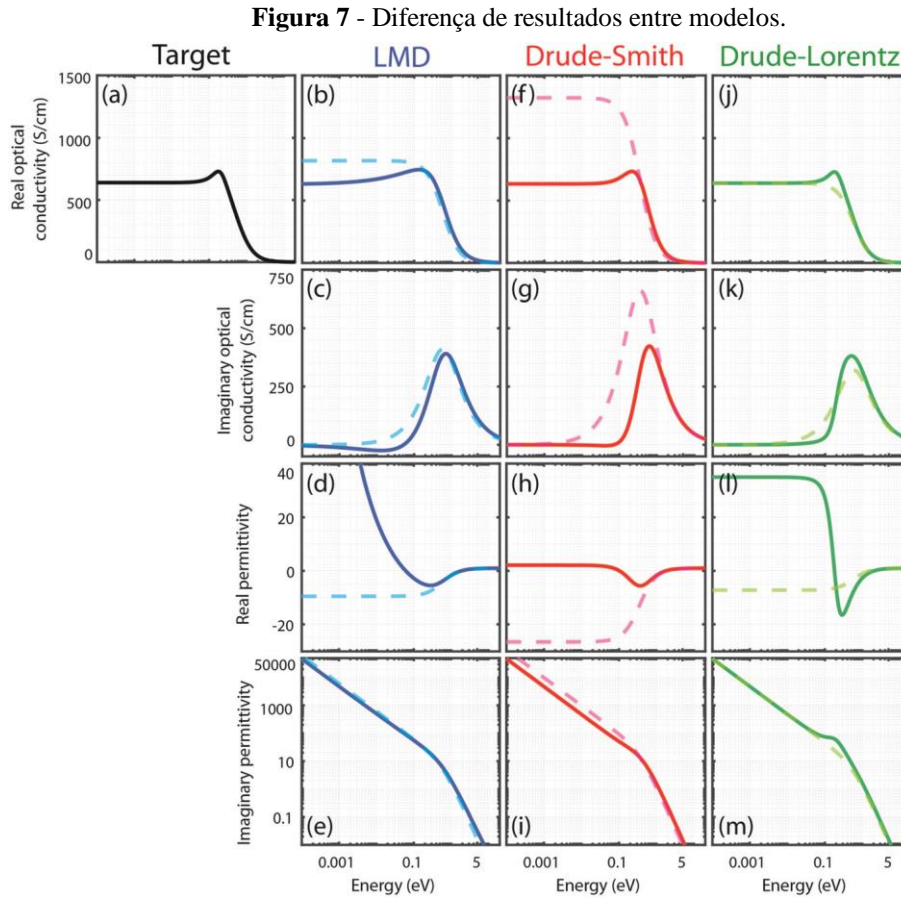
Figura 6 - Comparação entre e Drude e Drude-Smith



Fonte: CHEN e MARCUS, 2021

O trabalho de CHEN et al, 2019 promove a análise de um filme polimérico condutor, e equipara os múltiplos modelos numéricos baseados do modelo de Drude. esse estudo deixa evidente que modelo de Drude-Lorentz pode ser empregado para análise de informações no THz gap e que tanto os modelos de Drude-Lorentz e Drude-Smith, mesmo com algumas imprecisões, apresentam resultados congruentes para análise de propriedades como

condutividade complexa, porém existe a necessidade de ajustes para permitividade de acordo com o material analisado (CHEN et al, 2019). O autor também observa que o modelo de Drude - Lorentz não suprime a parte de Drude em frequências próximas ao THz gap. Diferente do que é visto em outros modelos (CHEN et al, 2019).



Fonte: CHEN et al, 2019

7 MXENE: SÍNTESE, PROPRIEDADES E APLICAÇÕES

7.1 O que é?

Desde a descoberta do grafeno em 2004, estudos focados na busca ou compreensão de materiais bidimensionais ganharam enorme interesse por parte da comunidade científica (BU et al, 2020). Em 2011, os pesquisadores Naguib, Gogots, Barsoum e seus colaboradores da Universidade de Drexel sintetizaram uma nova classe de materiais 2D composta por carbeto ou nitreto de metais de transição (NAGUIB et al, 2011; ZHAN et al, 2019). Decorrente das similaridades desse novo material com o grafeno e alusivo as características do método de síntese, esse material foi intitulado como *MXene* (DILLON et al, 2016).

O primeiro *MXene* elaborado foi o carbeto de titânio $Ti_3C_2T_x$, partindo como princípio para a busca por outros *MXenes* baseados em carbeto, como o carbeto de vanádio V_2C e o carbeto de nióbio Nb_2C . Posteriormente, inúmeros outros materiais dessa família, envolvendo nitreto e carbonitreto de metais de transição, foram sintetizados, tais como $Zr_3C_2T_x$, Mo_2CT_x , Sc_2CT_x ou Mn_2NT_x , atualmente, mais de 30 tipos de *MXenes* já foram sintetizados experimentalmente (ZHAN et al, 2019; WYATT et al, 2021).

As características dessa classe de materiais são o comportamento metálico, boa hidrofobicidade, propriedades termoelétricas favoráveis e boa condutividade, resultando em um material processável em solução, permitindo que o *MXene* apresente desenvolvimento viável em laboratório. O método padrão mais aplicado de produção de *MXene* é por meio da retirada química e seletiva do elemento *A* da fase precursora *MAX* (ZHAN et al, 2019; ZANG et al, 2020; LI et al, 2018; LI et al, 2020).

A fórmula química do *MXene* é $M_{n+1}X_nT_x$ com o *n* variando de 1 a 4, essa fórmula é uma herança da fase *MAX*, ao qual, “*M*” representa metais de transição dos grupos 3 ao 4 da tabela periódica, tais como titânio, vanádio ou nióbio; “*A*” são os elementos do grupo 13 e 14 da tabela periódica, por exemplos, cátions Al^{3+} e Si^{4+} ; “*X*” representa os elementos C ou N e “*T_x*” são grupos funcionais como -O, -OH ou -F (ZHAN et al, 2019; WYATT et al, 2021). Decorrente dos grupos funcionais (*T_x*), os *MXenes* apresentam a superfície negativamente carregada, os grupos hidrofílicos com pontes de hidrogênios entre a água, resultam e boa dispersão do material em solução aquosa (ZANG et al, 2020).

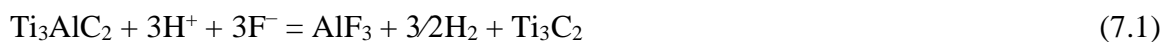
Esses materiais são produzidos em nanoflocos que podem estar dispersos ou empilhados em camadas entre si e, normalmente, são processados em filmes para inúmeras aplicações, logo, em virtude da diversidade de composição, propriedades eletrônicas, estrutura e métodos de processamento, esses nanomateriais apresentam potencial para a função de reforço em materiais

compósitos, para a substituição de nanotubos de carbono em aplicações de dispositivos fotônicos em THz ou utilização como supercapacitores, entretanto, apesar da menção de outros materiais similares, esse estudo foca na utilização do $Ti_3C_2T_x$, até o momento, o *MXene* mais condutivo (HART et al, 2019; WYATT et al, 2021; ZHAN et al, 2019).

7.2 Síntese

7.2.1 Corrosão da fase MAX (*Etching*¹¹)

O Método mais utilizado para a síntese de *MXene* é por meio da remoção do elemento A intercalado na fase MAX, por intermédio de soluções ácidas contendo íons de Flúor. A princípio, as soluções mais empregadas são o ácido hidrófluídrico (HF) e soluções contendo Fluoreto de Lítio e Ácido Clorídrico (LiF-HCL), formando HF in situ; por exemplo ZHOU e seus colaboradores (2016) sintetizaram *MXene* $Zr_3C_2T_x$ retirando Al^{3+} da fase MAX ($Zr_3Al_3C_5$) pelo emprego de ácido HF, HALIM e seus colaboradores utilizaram a solução de LiF-HCL para preparação do *MXene* Mo_2CT_x através da remoção de Ga da fase MAX (Mo_2Ga_2C), As equações 7.1 a 7.3 representam a cerne do processo para síntese de *MXene* carbeto de titânio $Ti_3C_2T_x$, o qual demonstra que a reação entre o ânion F^- e a fase MAX produz fluoreto de alumínio e *MXene* (DILLON et al, 2016; ZHAN et al, 2019; ZANG et al, 2020; ZHOU et al, 2016; HALIM et al, 2016, NAGUIB et al, 2011).

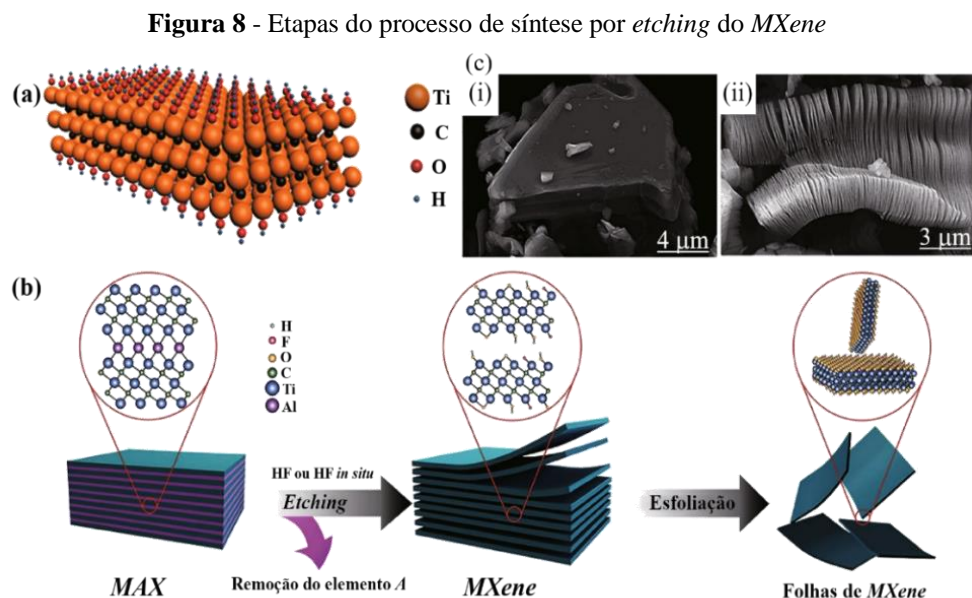


A definição da solução ácida influenciará as características apresentadas pelo *MXene* sintetizado, o método de corrosão por HF, resulta em alta concentração de Fluoretos em relação aos hidróxidos, compactando a distância entre as camadas, havendo a necessidade de inserção de cátions para auxiliar na “delaminação” de folhas de *MXene*, fomentando diferença de espaço entre as camadas e facilitando a etapa de esfoliação. Esse método pode apresentar pequenos defeitos que podem expor o íon Titânio a oxidação, resultando em TiO_2 (DILLON et al, 2016; ZANG et al, 2020).

¹¹ Na literatura, o método de síntese por ácido é constantemente chamado de *etching*, no entanto, a palavra, originalmente, apresenta a tradução de “entalhar”, como desenhar uma gravura em um pedaço de madeira. Para o sentido empregado na síntese de *MXene*, *etching* adota significados como remover, corroer, delaminar ou separar.

Entre os múltiplos métodos de esfoliação, cita-se, métodos mecânicos, como por tratamento ultrasônicos, que inibem forças estáveis entre as camadas, provendo folhas de $Ti_3C_2T_x$ com excesso de grupos funcionais, porém, essa abordagem pode causar defeitos na morfologia como o surgimento de flocos com dimensões estreitas. Outro método é a esfoliação hidrotérmica que promove a separação de camadas através do aumento de temperatura, consequentemente, a energia dos íons intercalados é elevada, acelerando a difusão do reagente de intercalação, resultando na quebra da barreira energética da ligação Ti-Ti. Esse método apresenta a possibilidade de oxidar o material, havendo a necessidade de utilização de antioxidante (ZANG et al, 2020).

A utilização da solução de LiF-HCl para síntese de *MXene* facilita a intercalação de íons de Lítio, consequentemente, promove o aumento na distância entre as camadas de *MXene*, resultando em aumento na área do flocos de *MXene* e na quantidade de grupos funcionais, a decorrente abundância de -OH, torna o material hidrofílico e o volume da amostra se expande em aproximadamente duas vezes com a intercalação do Lítio, ou seja, amostras produzidas com esse método apresentam maior qualidade superficial, estabilidade mecânica e maior tamanho de nanofolha. De forma geral, a figura 8 resume a síntese desse material para ambas as soluções (ZANG et al, 2020).



Fonte: Adaptado de ZANG et al, 2020

Maior tempo e temperatura de ataque ácido também modificam a morfologia do $Ti_3C_2T_x$, o tratamento da matéria prima também possui impacto no produto final fabricado;

estudos indicam que a duração da moagem da fase MAX contém influência em propriedades como condutividade, visto que longa durabilidade de moagem promove maior destruição de força de Van Der Waals que estão presentes em camadas internas, ocasionando maior exposição de íon carbono. Em virtude disso, estudos buscam compreender como tratamento da matéria prima (MAX) pode melhorar as propriedades do *MXene* (MATHIS et al, 2021; ZANG et al, 2020).

MATHIS e seus colaboradores (2021) proveram alterações na proporção de alumínio durante a síntese da fase MAX Ti_3AlC_2 , visando obter fase líquida durante os estágios iniciais do processo, o objetivo do autor é obter grãos de Ti_3AlC_2 com melhor morfologia e ordenamento estrutural, obtendo fase MAX altamente estequiométrica (MATHIS et al, 2021). A amostra Al- Ti_3AlC_2 produzida, apresentou morfologia de grãos diferentes do habitual, enquanto que Ti_3AlC_2 convencional, quando submetidas a ácido clorídrico, é constituído de partículas globulares irregulares. O Al- Ti_3AlC_2 apresentou partículas hexagonais, semelhante a plaquetas (MATHIS et al, 2021).

Para lidar com Al- Ti_3AlC_2 , o autor fomentou alterações na síntese do $Ti_3C_2T_x$, provendo primeiramente um ataque com mistura de HF/HCL e posteriormente, delaminou o *MXene* por agitação em uma solução aquosa de LiCl. Os filmes de *MXene* provenientes de Al- Ti_3AlC_2 obtiveram condutividade de aproximadamente 20 000 S/cm (MATHIS et al, 2021).

Outros métodos também foram empregados para a preparação do *MXene*, destes pode se citar a utilização de sais fundidos para a remoção em alta temperatura do elemento A da fase MAX, por exemplo, a produção do *MXene* Ti_4N_3 a partir da mistura de Ti_4AlN_3 em um sistema salino eutético composto 59 wt% de Fluoreto de potássio (KF), 29 wt% de Fluoreto de Lítio (LiF) e 12 wt% de Fluoreto de sódio (NaF) a 550°C por 30 min com a taxa de aquecimento de 10 °C.min⁻¹. (ZHAN et al, 2019; URBANKOWSKI et al, 2016)

Inferese-se que a vantagem dessa metodologia é a produção de *MXene* de pureza elevada, visto que a terminologia T_x fica ausente, decorrente ao fato de que o material não é produzido por intermédio de uma solução aquosa, portanto, os grupos -O e -OH estarão ausentes na superfície do material. Outra abordagem é a deposição de vapor química para a obtenção de *MXene* (ZHAN et al, 2019).

A condutividade do *MXene* pode ser manipulada com a alteração da configuração dos grupos terminais localizados na superfície do material. Não somente a condutividade; com a modificação desses grupos funcionais, existe a possibilidade de alteração das propriedades mecânicas; alinhamento de banda ou alteração das propriedades magnéticas do material (HART et al, 2019).

7.2.2 Recozimento

Estudo elucidam que propriedades, como a condutividade, podem ser favorecidas com técnicas de recozimento. Embora flocos muito finos de *MXene*, com a espessura próxima a 1 nm, seja demasiadamente mais propensos a oxidação em meio aquoso ou ar, espessuras maiores são estáveis sob altas temperaturas em ambientes controlados, ao qual sobre a influência em altas temperaturas, grupos funcionais de -OH são dessovirados na faixa de 300°C-500°C, enquanto que os grupos funcionais de -F são dessovirados na faixa de 500°C-750°C (HART et al, 2019; WYATT et al, 2021).

A partir de 700°C novas fases na estrutura do material irão surgir, isso pode alterar as características do material de 2D para super estruturas 3D, pois o $Ti_3C_2T_x$ vai formar duas fases cristalinas não estequiométricas, sendo estas a TiC_y cúbica ($0,5 < y < 1,0$) e uma super estrutura cúbica de vacância ordenada de Ti_2C , sendo que até 1000°C, essas três fases coexistem ocupando a estrutura em camadas de Ti-C (WYATT et al, 2021).

Acima de 1000°C, é formado TiC_y cúbico com vacâncias de carbono. Se a transformação for iniciada a partir de um floco de $Ti_3C_2T_x$, o TiC_y mantém a natureza estrutural do *MXene* e se transforma em morfologia lamelar, comportamento semelhante, pode ser visualizado em estruturas de carboneto/nitreto de metal de transição. O comportamento de manter a integridade da natureza do material em temperaturas acima de 1000°C, adjunto com as demais propriedades químicas, mecânicas e eletrônicas retrocitadas, reforçam o *MXene* como material promissor para o emprego como reforço na construção de compósitos (WYATT et al, 2021).

7.2.3 Armazenamento

Apesar de vantagens como processamento em soluções coloidais, possuindo água como solvente, sem a necessidade de utilizar aditivos ou surfactantes, *MXenes* também oxidam em soluções aquosas e apresentam baixa durabilidade em meio aquoso, sendo limitado a algumas semanas de armazenamento nesse meio. (MATHIS et al, 2021).

Emulações do material em condições de desgaste típicas de laboratório, indicaram gradual perda de qualidade. As amostras de MATHIS e seus colaboradores (2021), sofreram impactos nas propriedades eletrônicas, obtendo diminuição de condutividade ao longo de 6 meses de armazenamento, sendo que após 4 meses, o material apresentou diminuição de 13 000

S/cm para 10 000 S/cm e decréscimo até 6000 S/cm para os últimos 2 meses (MATHIS et al, 2021).

Os filmes produzidos por SARYCHEVA e seus colaboradores (2018) apresentaram propriedades estáveis durante 30 dias quando submetido ao ar livre, o autor concluiu que a durabilidade é decorrente da morfologia de flocos empilhados. Como solução, o autor sugeriu que é possível retardar a oxidação do dispositivo, através da laminação dos dispositivos em matrizes poliméricas (SARYCHEVA et al, 2018).

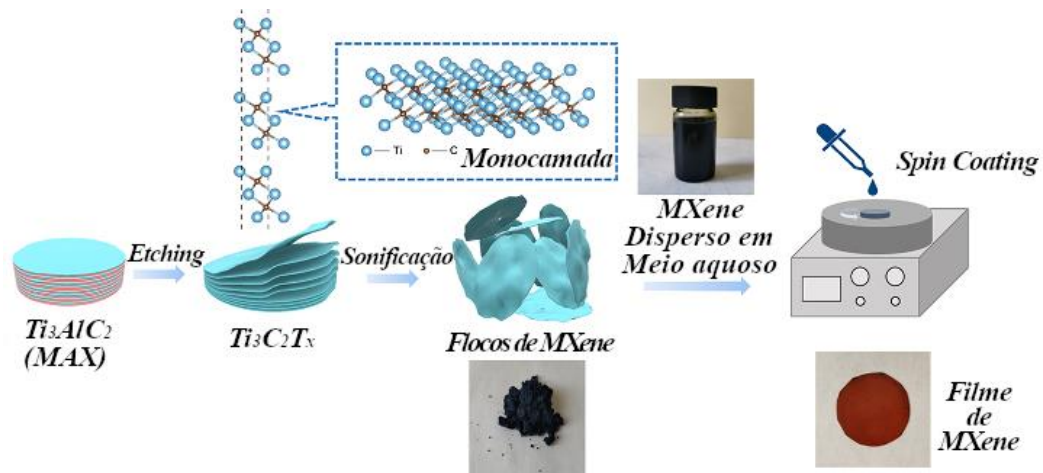
7.2.4 Processamento de Filmes

Os filmes ou dispositivos de *MXene* podem ser padronizados em substratos por meio de técnicas utilizando impressoras a laser, *spraying*, deposição facial, *spin coating* ou técnicas de impressão de microcontato (LI et al, 2019; LI et al, 2020; SARYCHEVA et al, 2018).

SARYCHEVA e seus colaboradores (2018), fabricaram dispositivos utilizando a técnica de *spraying*, depositando a solução coloidal de $Ti_3C_2T_x$ sobre substrato de Politereftalato de etileno (PET), produzindo filmes de *MXene* com espessura dos flocos variando de 62 nm - 8 um. Essa técnica pode gerar interrupções na conexão entre os flocos, podendo ocasionar diminuição da condutividade (SARYCHEVA et al, 2018).

Li e seus colaboradores (2019) fabricaram filmes por deposição facial, adquirindo flocos com espessura de aproximadamente 25 nm. Ainda, Li e seus colaboradores (2020) concluíram que fotodetecores de *MXene* podem ser fabricados por *spin coating* com a inserção de eletrodos de *MXene* Ti_3C_2 em solução aquosa sobre um substrato padronizado por fotolitografia, a qual a máscara fotoresiste pode ser removida por imersão em acetona. Essa metodologia pode ser empregada para a produção de dispositivos eletrônicos com atuação em faixas do GHz, visível ou THz (LI et al, 2020). A figura 9 apresenta um resumo para produção de filmes de *MXene*.

Figura 9 - Resumo da síntese de filmes de *MXene*.



Fonte: Adaptado de ZOU et al, 2020

7.3 Propriedades

7.3.1 Propriedades eletrônicas

Simulações elaboradas pela teoria da densidade funcional (DFT) sugerem que os *MXenes* de carbetos e nitretos metálicos como M_2C ($M = Sc, Ti, V, Cr, Zr, Nb, Ta$), com grupos de -O, -OH ou -F em suas terminações, tendem a apresentar comportamento metálico e não magnético, com exceção de Ti_2C e Zr_2C que apresentam comportamento magnético espontâneo. Em simulação, os *MXenes* Sc_2CT_2 ($T = O, OH, F$), Ti_2CO_2 , Zr_2CO_2 , e Hf_2CO_2 demonstraram comportamento de semicondutores e os *MXenes* Cr_2CT_2 ($T = OH, F$) e Cr_2NT_2 ($T = O, OH, F$) apresentaram comportamentos magnético (ZHAN et al, 2019).

Alguns *MXenes* semicondutores, apresentaram variações no *band gap*, quando submetidos a tensões mecânicas. O Sc_2CO_2 quando submetida a uma tensão crítica de 2%, teve uma transição de indireta para direta no *band gap*, comportamento semelhante foi observado para os *MXenes* Ti_2CO_2 , Zr_2CO_2 e Hf_2CO_2 quando submetido a uma tensão biaxial de 4%, 10% e 14%, respectivamente (ZHAN et al, 2019).

Simulações em DFT também indicaram que função trabalho dos *MXenes* fica em torno de 3,5-5,5 eV (ZHAN et al, 2019). Os grupos terminais -F, -O e -OH também apresentam variações na função trabalho do *MXene*, sendo que -F obteve pouco impacto na função trabalho, enquanto que -O e -OH apresentaram impactos mais significativos, ao qual -O fomentou em grande aumento para função trabalho e -OH gerou grande diminuição (ZHAN et al, 2019). O impacto provocado pelos grupos -F e -O são decorrente do momento dipolar da superfície que

gera transferência de cargas dos grupos para o substrato. A diminuição da função trabalho pelos grupos -OH é decorrente do intrínseco momento dipolar do grupo (ZHAN et al, 2019).

7.3.2 Condutividade

Em comparação com demais materiais bidimensionais, o *MXene* apresenta boa combinação de condutividade eletrônica, hidrofiliçidade e estabilidade química (HART et al, 2019). Experimentalmente, para o *MXene* $Ti_3C_2T_x$, foi obtida a condutividade de 3250 S/m para uma folha de *MXene* de aproximadamente 70 nm, entretanto, estudos como KIM et al, 2018, SARYCHEVA et al, 2018, DILLON et al, 2016 e os múltiplos estudos de Li e seus colaboradores em 2018, 2019 e 2020 observaram que o aumento de espessura de folhas de $Ti_3C_2T_x$ apresentaram maior condutividade e maior comportamento metálico, entretanto, alinhamento dos flocos e rugosidade influenciam a condutividade eletrônica dos filmes de *MXene*. Mathis e seus colaboradores alcançaram condutividade de 20 000 S/cm que é superior a valores encontrados anteriormente que variavam entre 8000 a 15 000 S/cm. (MATHIS et al, 2020; ZHAN et al, 2019; KIM et al, 2018; SARYCHEVA et al, 2018; DILLON et al, 2016; LI et al, 2018; LI et al, 2019; LI et al, 2020).

Ao utilizar o *MXene* em aplicações, torna-se evidente a necessidade do controle da espessura dos flocos para manusear a condutividade, KIM e seus colaboradores (2018) desenvolveram um sensor de gás quimiresistor utilizando filmes de $Ti_3C_2T_x$ como canais metálicos. Nesse estudo, o autor sintetiza filmes de 70 nm de espessura que apresentaram condutividade intrínseca de 3250 S/m. Os filmes sintetizados apresentam flocos pequenos de *MXene* como condicionamento para a absorção e transporte de gás no interior do filme, assim como espessuras menores e maiores regiões de contato entre o interflocos (KIM et al, 2018).

SARYCHEVA e seu colaboradores (2018) elaboraram filmes variado de 1 um-8 um para aplicações em RF¹², o filme de 8 um apresentou condutividade de 8000 S/cm. Portanto, evidencia-se que o tamanho dos flocos assim como sua espessura, são agentes predominantes para a definição da condutividade do material e que seu comportamento condutivo é variável de acordo com a síntese (KIM et al, 2018; SARYCHEVA et al, 2018).

O trabalho de HART e seus colaboradores (2019), identificam a intercalação química como agente responsável pela diminuição da condutividade de *MXene* em amostras de múltiplas camadas, isso ocorre devido a presença de intercalantes na superfície do material, provendo

¹² Radiofrequência

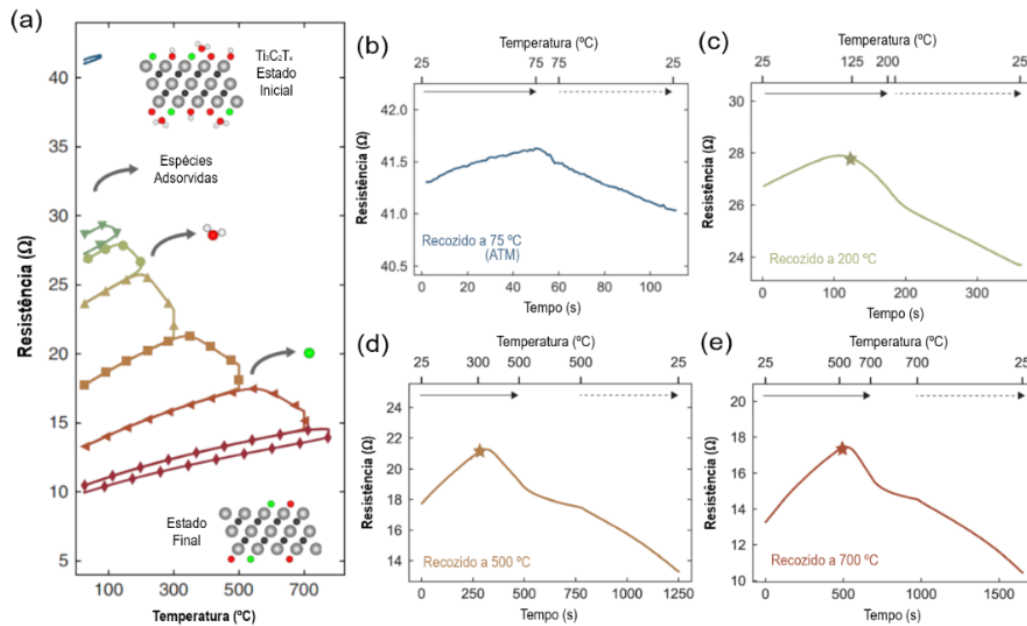
aumento no espaçamento entre as camadas ou flocos, aumentando a resistência elétrica do material (HART et al, 2019).

Para investigar o impacto da intercalação no *MXene*, amostras dos *MXenes* $Ti_3C_2T_x$, Ti_3CNT_x , $Ti_3CNT_x(TBA^+)$ e $Mo_3TiC_2T_x$ foram submetidas a recozimento a vácuo até a temperatura de 775 °C com o comportamento eletrônico do material, sendo observado por intermédio de um microscópio eletrônico de transmissão (MET). Seu estudo comprovou que a dessorção de grupos como -OH, -F e -O, promoveu melhorias na condutividade das amostras (HART et al, 2019).

O estudo de MATHIS e seus colaboradores, apresentam congruências com estudo de HART e seus colaboradores, ao notar estabilidade do material em elevadas temperaturas, aumentando o potencial do material para aplicações, tais como sensores ou eletrônicos operando sobre influência de temperaturas entre 200°C a 450°C (HART et al, 2019; MATHIS et al, 2020).

Inferese-se que a condutividade do *MXene* $Ti_3C_2T_x$ é variável de acordo com o empilhamento do material; distância entre as camadas ou flocos e também com a temperatura. Pela figura 10, denota-se que a resistência elétrica do material não sofreu grandes alterações com o aumento de temperatura até 100°C, somente a partir de 250°C que é perceptível um notório aumento da resistência elétrica do material; acima de 500°C demonstrou comportamento passível de atenção. Essa característica é favorável para aplicação desse material em altas frequências, visto que com a tendência de aquecimento e perdas por efeito joule, o material terá pequena variação na condutividade.

Figura 10 - Resistência de $Ti_3C_2T_x$ recozido quando submetido a variação de temperatura.



Fonte: Adaptado de HART et al, 2019

A condutividade do *MXene* promove absorção de ondas nos espectros de micro-ondas e em faixas do THz, LI e seus colaboradores durante o período de 2018 a 2020, elaboram estudos aplicando *MXene* $Ti_3C_2T_x$ em dispositivos THz, visando compreender o comportamento eletrônico e óptico desse material nesse range (LI et al, 2018; LI et al, 2019; LI et al, 2020).

Nesses estudos o autor promove a análise da dinâmica dos portadores de carga de uma folha de *MXene* com espessura de aproximadamente 16 nm em faixas do *Terahertz spectroscopy* (THz). O movimento dos portadores de carga da folha de *MXene* foram limitados por potenciais barreiras, comportamento semelhante a sistemas nanocristalinos ou granulares (LI et al, 2018).

A condutividade do material foi obtida experimentalmente e simulada pelo modelo numérico de Drude-Smith, esse modelo apresenta condutividade complexa para folha *MXene* e leva em consideração possíveis barreiras que possam intervir no movimento dos portadores de cargas; o autor observou que decorrente da condutividade suprimida em baixas frequências, devido a barreira de interflocos, o modelo de Drude-Smith pode ser empregado para calcular a condutividade complexa, os resultados demonstraram que o material apresentou alta condutividade em frequências na faixa de espectroscopia THz e que filmes finos de *MXene* obtiveram propriedades favoráveis para aplicações de blindagem em EMI, tabela 1 apresenta as propriedades do movimento de carga obtidas (LI et al, 2018; LI et al, 2019).

Tabela 1 - Propriedades de mobilidade de carga do *MXene*.

Referência	Tempo de dispersão (fs)	Densidade de carga (cm ⁻³)	mobilidade de carga intrínseca (cm ² V ⁻¹ s ⁻¹)
DILLON et al, 2016	-	$3,1 \times 10^{22}$	0,9
LI et al, 2018	6 ± 3	2×10^{21}	34
LI et al, 2019	19 ± 1	2×10^{21}	110
LI et al, 2020	40	4×10^{20}	-

Fonte: Autoria Própria

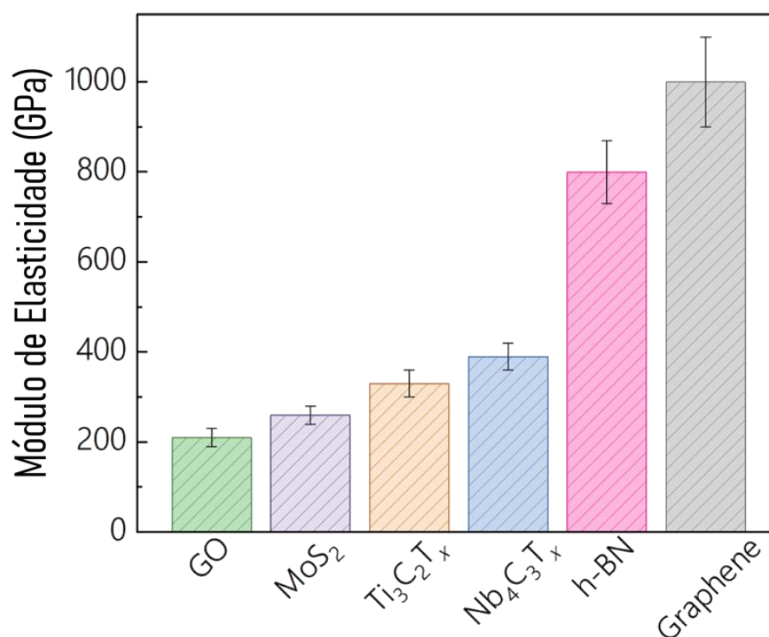
Estudo do *MXene* no espectro do visível e próximo a ele indicam permitividade negativa em comprimentos de ondas acima de 1100 nm, indicando que é um material plasmônico em frequências próximas ao infravermelho. O modelo de Drude revela condutividade de 7000 ± 2000 S/cm, medições de *Hall-effect* também comprovam a alta condutividade e o comportamento plasmônico em filmes de $Ti_3C_2T_x$ com variação de espessura entre 13 nm-75 nm (DILLON et al, 2016).

7.3.3 Propriedades Mecânicas

As propriedades mecânicas do *MXene* sofrem influência dos grupos funcionais presentes na superfície do floco, evidencia-se isso ao comparar o modulo de elasticidade obtido por simulação em DFT em que apresenta 502 GPa, mas com os resultados experimentais obtendo em torno de 330 GPa (LIPATOV et al, 2018).

Como pode ser visto pela figura 11, as fortes propriedades mecânicas tornam *MXenes* como $Ti_3C_2T_x$ e $Nb_4C_3T_x$ de grande valia para o emprego em compósitos, visto que são nanomateriais 2D com processamento em solução e, decorrente do sucesso da implementação de *MXene* em compósitos poliméricos, esse nanomaterial contém potencial para aplicação como "*fillers*" em compósitos de matriz metálica (CMM) e matriz cerâmica (CMC) (WYATT et al, 2021).

Figura 11 - Comparação do módulo de elasticidade do *MXene* com demais 2D materiais.



Fonte: Adaptado de WYATT et al, 2021

7.4 Aplicações

Apresentando boas propriedades mecânicas e eletrônicas e com processo de fabricação viável, múltiplos autores estão desenvolvendo estudos nas mais diversas aplicações que serão citadas posteriormente.

7.4.1 Pseudo capacitador

Recentemente, aplicação do *MXene* como pseudo capacitador vem recebendo grande notoriedade; as dificuldades entorno de pseudos capacitadores envolvem o baixo ciclo de estabilidade¹³, baixa taxa de capacidade¹⁴, recorrente de pouca condutividade elétrica e pela razão superfície por volume do material utilizado, *MXenes* surgem como alternativa para a solução desses problemas (BU et al, 2019).

Entretanto, para a construção de eletrodos baseados em *MXene* com alta performance, necessita resolver alguns problemas, como a limitada capacidade de transportes de íons ou a dificuldade de acesso de sítios ativos na estrutura de nanofolhas empilhadas (BU et al, 2019).

MXenes com estruturas porosas podem ser uma solução para esta problemática, LUKATSKAYA e seus colaboradores (2017) fabricaram uma estrutura tridimensional e porosa de *MXene*, estrutura promoveu melhorias no transporte de íons por dois caminhos, caminho

¹³ Referido como *poor cycle stability* na literatura

¹⁴ Referido como *Low rate capability* na literatura

longo pela lateral do eletrodo e curto pela vertical, isso promoveu melhorias em suas propriedades pseudo capacitivas. Apesar das melhorias, eletrodos porosos de *MXene* ainda apresentam desafios como baixa resistência a oxidação e resistência mecânica (BU et al, 2019; LUKATSKAYA et 2017).

HU e seus colaboradores (2016) estudaram eletrodos de *MXene* e $Ti_3C_2T_x$ imersos em eletrólitos aquosos de íons sulfato, tais como H_2SO_4 , $(NH_4)_2SO_4$ ou $MgSO_4$, e observaram que a alteração no estado de valência do elemento Ti, decorrente de ligações/desconexões nos grupos funcionais na superfície do *MXene*, resultam no implemento de pseudocapacitância do *MXene* em eletrólitos ácidos.

7.4.2 Aplicação em baterias de íons Lítio/Sódio.

A alta condutividade proveniente das reações oxiredução dos carbonetos de metais de transição presente no *MXene*, permite a aplicabilidade de *MXene* poroso como anodo para baterias de Lítio/Sódio. O transporte iônico nos poros de *MXene* promove melhorias em propriedades eletroquímicas do material. REN e seus colaboradores (2016) promoveram a síntese de um *MXene* plano com poros, denominado como P- Ti_3C_2 , quando utilizado como anodo para baterias de Li-ion, apresentou alta capacidade, acerca de 1250 mAhg^{-1} em 0,1 C e 330 mAhg^{-1} e, 10 C, contendo ciclo de estabilidade a longo prazo (BU et al, 2019; REN et al, 2016).

7.4.3 Aplicações em EMI¹⁵

Materiais condutores podem refletir ondas eletromagnéticas, decorrente da interação das ondas eletromagnéticas (EM) com os portadores de cargas¹⁶ e, logo, adsorvem EM, devido as perdas condutivas. Portanto, materiais metálicos e com carbono são bastantes estudados, visando, a interferência de ondas eletromagnéticas (EMI), porém, a alta densidade dos materiais e a leveza do carbono em baixas espessuras, dificultam o emprego como escudos EMI e adsorção de EM. A alta condutividade torna o *MXene* uma alternativa para o emprego em escudos EMI e adsorção de EM, entretanto, a densidade do material aumenta com o empilhamento de camadas de *MXene*, isso se torna um fator desfavorável, diminuindo a adsorção de EM (BU et al, 2019).

¹⁵ *Eletromagnetic Interference*

¹⁶ *carrier charger*

A variação da densidade do material pode ser proveniente na síntese de *MXene* porosos, possibilitando a otimização da condutividade e dos parâmetros dielétricos do material, permitindo a entrada de ondas no interior do material provocando múltiplas reflexões internas, melhorando a blindagem eletromagnética (BU et al, 2019).

GUO e seus colaboradores (2021) sintetizaram Nanopartículas de NiFe_2O_4 para inserir na superfície de $\text{Ti}_3\text{C}_2\text{T}_x$, visando a elaboração de nanocompósitos para aplicações como absorvedores eletromagnéticos, infere-se desse estudo que a permeabilidade magnética do $\text{Ti}_3\text{C}_2\text{T}_x$ fica aproximadamente em 1,1 em frequências de 2 GHz a 18 GHz, não foi notado grande variabilidade da permeabilidade com a inserção das nanopartículas (GUO et al, 2021).

CUI e seus colaboradores (2021) estudam a absorção eletromagnética de um metamaterial de *MXene* composto por um *nanorod* de ouro. Para isso, ele desenvolve análise numérica computacional de três superfícies contendo silício e *MXene*, silício e *nanorod* de ouro, por fim, silício, *MXene* e *nanorod* de ouro.

A estrutura contendo apenas silício e *MXene* obteve forte absorção no visível com pico próximo do infravermelho. A estrutura composta de silício, *MXene* e *nanorod* diminuiu a absorção próxima ao infravermelho e aumentou a absorção em faixas próximas a azul e violeta, apresentando pico em 530 nm. Isso decorre devido as reflexões do *nanorod*. É possível notar estabilidade na absorção até próximo do 1.2 um, o que indica que estrutura de *MXene* /Au obteve aumento na largura de banda de atuação do metamaterial (CUI et al, 2021).

JAKŠIĆ e seus colaboradores (2020) também analisaram em simulação, o comportamento metamateriais compostos por *MXene*. Para fazer a simulação, os parâmetros utilizados para a emular a propriedade de permitividade complexa do material foram: $\omega_p = 4,21 \times 10^{14}$ rad/s; $\gamma = 8,65 \times 10^{14}$ rad/s; $\omega_0 = 2,30 \times 10^{15}$ rad/s; $f_1 = 6$; $f_2 = 3$; $f_3 = 0,2$.

O material apresentou três picos de absorção em 530 nm, 630 nm e 800 nm com o último absorvendo quase 100%. A modificação na geometria promoveu forte absorção em faixas próximas ao verde e vermelho visível e próximas ao espectro infravermelho (JAKŠIĆ et al, 2020).

CHAUDHURI e seus colaboradores (2018), pela primeira vez desenvolveram um metamaterial absorvedor de fácil fabricação, composto por discos de *MXene*. O metamaterial apresentou grande absorção em faixas próximas a 1,55 um, possuindo forte absorção em faixas do visível e próximo ao infravermelho. os filmes fabricados continham espessura de entre 30 - 400 nm (CHAUDHURI et al, 2018).

O autor avaliou as propriedades eletrônicas por intermédio de Elipsômetro espectroscópico de ângulo variável (VASE), contendo um termo de drude para o comportamento

metálico e dois osciladores de Lorentz para verificar as transições eletrônicas interbandas. A permitividade do material revelou polaritons de superfície plasmônica (SPPs) em faixas próximas ao infravermelho (CHAUDHURI et al, 2018).

O autor observou que discos de *MXene*, em $\lambda < 1$ um, apresentam comportamento menos metálico do tipo drude e que sob altas energias se comporta como meio dielétrico com perdas. Na faixa de 0,4-1,4 um apresentou absorção de aproximadamente 85%, a forte absorção nessa faixa é proveniente de grande influência de transições eletrônicas inter e intrabanda presentes no material.

Para melhorar a performance do metamaterial, o autor adicionou duas camadas sob o disco de *MXene*, sendo estas compostas por alumina (Al_2O_3) e ouro (Au) com espessuras de 40 e 150 nm respectivamente. As camadas apresentaram melhorias, obtendo em torno de 85-90% de absorção até a banda de 1,55 um (CHAUDHURI et al, 2018).

7.4.4 Sensores piezoresistivos

Devido a processabilidade viável e alta condutividade do *MXene*, esse material também pode desempenhar função como sensor piezoresistivo, para isso o material deve diminuir o reempilhamento de suas nanofolhas. A melhor abordagem para esse emprego, é a integração de *MXene* em substratos porosos, visando melhor propriedades como condutividade do substrato (BU et al, 2019).

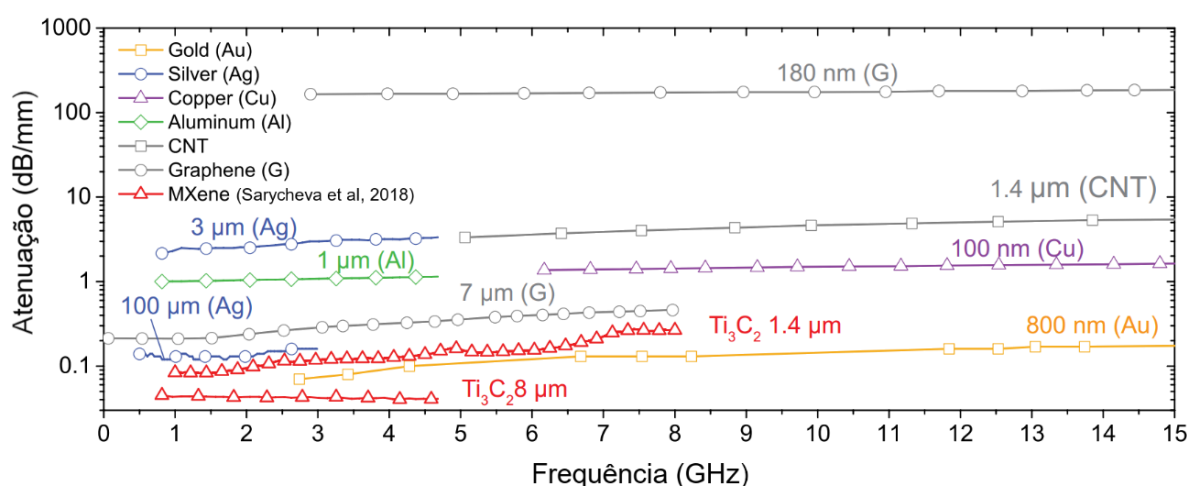
7.4.5 Radiofrequência (RF)

SARYCHEVA e seus colaboradores (2018) utilizaram o *MXene* no desenvolvimento de dispositivos wireless e radiofrequência (RF), sendo estes, antenas dipolo e linhas de transmissão CPW. As antenas de $\text{Ti}_3\text{C}_2\text{T}_x$ apresentaram bom casamento de impedância com coeficiente de reflexão (S11) de -12 dB para antenas produzidas de filmes com espessura do floco de $\text{Ti}_3\text{C}_2\text{T}_x$ de 114 nm e -65 dB para antenas de 8 um de espessura de floco. Os ganho obtidos foram 2,11 dB para 8 um e 1,7 dB para antena com 1.4 um, porém, as amostras de menor espessura obtiveram ganho negativos, isso decorre ao fato da diminuição da condutividade com a diminuição da espessura (SARYCHEVA et al, 2018).

Para quantificar as perdas do *MXene* como material condutor, o autor construiu CPWs com largura de 1,7 mm e afastamento de 0,5 mm entre as linhas de aterramento. Como esperado, a atenuação aumentou nos CPWs com flocos de menor espessura, sendo que para filmes de 8 um, a atenuação ficou em aproximadamente 0,3; 0,1 em 1,4 um e 0,5 em 378 nm, resultados

demasiadamente favoráveis quando comparado com outros materiais com espessura superior (Figura 12), tais como ouro, cobre e alumínio; tornando o material com grande potência para a construção de dispositivos ultrafinos de RF (SARYCHEVA et al, 2018).

Figura 12 - Comparação de desempenho de filmes de *MXene* e relação a outros materiais.



Fonte: Adaptado de SARYCHEVA et al, 2018

HAN et al, 2020 desenvolveu antena patch ultrafina de *MXene* para atuar no 5G por fabricação de *spray coating*, as antenas ressoaram nas frequências de 5,6 GHz, 10,9 GHz e 16,4 GHz e uma matriz para 28 GHz. Os filmes de *MXene* nas antenas produzidas continham espessura de 1 µm, 3,2 µm e 5,5 µm e apresentaram desempenho semelhante a antenas de cobre com 35 µm de espessura (Han et al, 2020).

Ao analisar o *MXene* como linha transmissão, observou que o material apresentou maior atenuação que o cobre, no entanto, com a espessura significativamente menor e com a variabilidade mínima de 0,01 de atenuação, o *MXene* ainda se apresenta como candidato promissor para aplicações futuras (HAN et al, 2020).

Sendo aproximadamente 7% mais leve e 15% mais fina a antena com *MXene* de 5 µm, obteve eficiência de 90 % para 5,6 GHz, 92% para 10,9 GHz e 99% em 16,4 GHz, desempenho semelhante obtido pela antena de cobre. O ganho obtido pela antena de *MXene* foi inferior que o cobre, no entanto, apresentando pequena diferença numa média de 0,6 dBi (HAN et al, 2020).

8 METAMATERIAIS

Metamateriais (MTM) são uma classe de materiais compósitos que apresentam propriedades que não são encontradas por materiais naturais. O termo "Metamaterial" vem do grego "*meta*" que significa além do normal, modificado, alterado ou algo avançado. Esse termo foi determinado por Rodger M. Walser em 1999, no entanto, no primeiro estudo proposto por Victor Veselago em 1968, nomeou o material como meio *left-handed* (KRZYSZTOFIK e NGHIA, 2019; VESELAGO, 1968; WALSER, 2001).

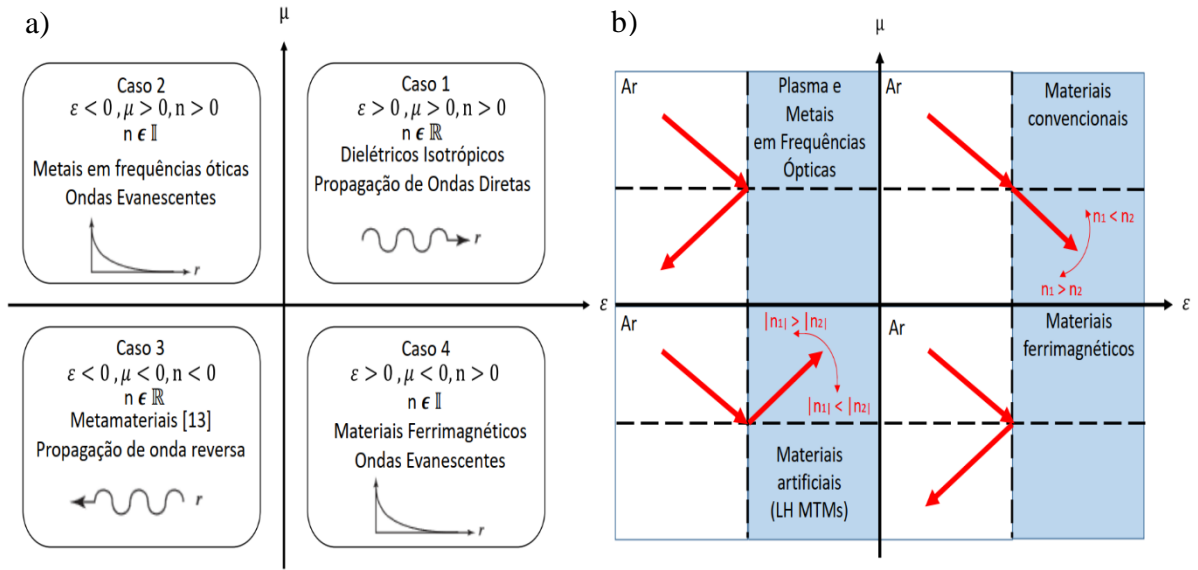
Dentre as inúmeras aplicações de metamateriais, destaca-se camuflagem de submarinos, lentes com índice de refração negativa e aplicações para componentes de micro-ondas como filtros ou antenas compactas e eficientes. Comumente, MTMs são aplicados para a produção ou melhora de performance de antenas, MTMs podem ser empregados no substrato ou como componente adicional em antenas (KRZYSZTOFIK e NGHIA, 2019). Modificando a forma do MTM, tamanho ou geometria, MTMs podem ser usados para absorver, espalhar, melhorar ou focar campos eletromagnéticos, obtendo altas performances, dependendo do objetivo proposto (KYAMO, 2022).

A aplicação de metamateriais pode ser na forma de célula única ou em muitas, estruturadas como uma matriz, portanto, a etapa inicial é a definição da frequência de ressonância desejada para atuação da célula, posteriormente, a análise das propriedades de ϵ_{eff} e μ_{eff} . A construção do projeto é baseada em cálculos e simulação da célula unitária nos mais diversos tamanhos, mas de modo geral, o tamanho da célula deve ser muito menor que o comprimento de onda de atuação (KRZYSZTOFIK e NGHIA, 2019; CUNHA, 2022).

8.1 Propriedades

Materiais convencionais, em que os valores de ϵ e μ são positivos, apresentam a direção de propagação normal, seguindo o comportamento de onda refratada em um meio, ou seja, o ângulo de propagação é positivo em relação a componente normal. Quando somente ϵ ou μ são negativos, a direção de propagação da onda segue como ondas evanescentes, como pode ser visto na figura 13 a). Para a situação de metamateriais *left-handed* com ϵ e μ negativos, a direção de propagação é oposta ao vetor de *Poynting* (*Backwards wave*) e a onda é refrata no meio com o comportamento de reflexão, como pode ser visto de acordo com a figuras 13 b) (CUNHA, 2022).

Figura 13 - Comportamento de MTMs.



Fonte: CUNHA, 2022

Também pode ser visualizado ao analisar índice de refração (N) na equação 8.1, valores de ε e μ positivos na equação do índice de refração, resulta em valores positivos. Pela equação 8.2, valores positivos indicam κ puramente real, sugerindo a propagação de onda, enquanto que valores negativos indicam $|\kappa|$ imaginário, sugerindo supressão da onda. Considerando que o MTM analisado contenha valores de ε e μ negativos, o índice de refração pode apresentar tanto positivo quanto negativo, como indica a equação 8.1, nesse caso, N positivo é aplicado ao vetor de onda, sugerindo propagação, e o sinal negativo na equação 8.1 possui o sentido físico de indicar que a propagação do vetor de onda segue em direção contrária a energia transportada pelo vetor de *Poynting* (CUNHA, 2022; KRZYSZTOFIK e NGHIA, 2019).

$$N = \sqrt{(-\varepsilon_r)(-\mu_r)} = \sqrt{(-1)\varepsilon_r(-1)\mu_r} = \sqrt{(-1)^2\varepsilon_r\mu_r} = \sqrt{(-1)^2}\sqrt{\varepsilon_r\mu_r} = \pm\sqrt{\varepsilon_r\mu_r} \quad (8.1)$$

O vetor de propagação pode ser determinado como:

$$|\kappa| = N\kappa_0 = N\frac{\omega}{c} \quad (8.2)$$

Aplicando os valores negativos de μ e ε nas equações 8.3 e 8.4, é observado a inversão dos sinais nas equações 8.5 e 8.6:

$$|\boldsymbol{\kappa}| \times \mathbf{E} = \omega\mu\mathbf{H} \quad (8.3)$$

$$|\boldsymbol{\kappa}| \times \mathbf{H} = -\omega\varepsilon\mathbf{E} \quad (8.4)$$

$$|\boldsymbol{\kappa}| \times \mathbf{E} = -\omega|\mu|\mathbf{H} \quad (8.5)$$

$$|\boldsymbol{\kappa}| \times \mathbf{H} = \omega|\varepsilon|\mathbf{E} \quad (8.6)$$

Portanto as equações 8.5 e 8.6 podem ser reescritas como:

$$|\boldsymbol{\kappa}| \times \mathbf{E} = s\omega|\mu|\mathbf{H} \quad (8.7)$$

$$|\boldsymbol{\kappa}| \times \mathbf{H} = -s\omega|\varepsilon|\mathbf{E} \quad (8.8)$$

onde s representa o termo "*handedness*" e pode ser 1 para um meio convencional e -1 para metamaterial. é notável que os valores de ε e μ não apresentam mudança na direção do vetor de *Poynting*, indicando que aplicabilidade do vetor de *Poynting* em materiais convencionais é semelhante a metamateriais (CUNHA, 2022; KRZYSZTOFIK e NGHIA, 2019).

Alguns modelos são empregados para promover análise dos parâmetros efetivos dos materiais, O modelo presente em NUMAN e SHARAWI (2013) pode ser utilizado para a extração dos parâmetros efetivos do metamaterial, através de parâmetros de espalhamento. Por esse modelo, a impedância de onda pode ser definida como:

$$Z = \pm \sqrt{\frac{(1 + S_{11})^2 - S_{21}^2}{(1 - S_{11})^2 - S_{21}^2}} \quad (8.9)$$

sendo que os valores de S_{11} e S_{21} são números complexos. Esse modelo também permite a extração de parâmetros efetivos do metamaterial, por intermédio dos parâmetros de espalhamentos obtidos na análise da célula (NUMAN e SHARAWI, 2013; CUNHA, 2022). o índice de refração pode ser definido como:

$$N = \frac{1}{\kappa_0 w c} \left[\left\{ [\ln(e^{i n \kappa_0 w c})]'' + 2m\pi \right\} - i [\ln(e^{i n \kappa_0 w c})]' \right] \quad (8.10)^{17}$$

¹⁷ No contexto dessa equação, m é referente ao modo de ressonância do guia de onda e não a massa do elétron.

ao qual $e^{in\kappa_0 d}$ pode ser determinado como:

$$e^{in\kappa_0 wc} = \frac{S_{21}}{1 - S_{11} \frac{Z - 1}{Z + 1}} \quad (8.11)$$

Assim os valores de ε_{eff} e μ_{eff} efetivos são:

$$\varepsilon_{eff} = N/Z \quad (8.12)$$

$$\mu_{eff} = NZ \quad (8.13)$$

Em Cunha (2022) é utilizado outro modelo, ao qual possibilita a obtenção dos parâmetros efetivos analisando os parâmetros de espalhamento, número de onda (κ_0) e o comprimento da célula unitária (wc) (CUNHA, 2022).

$$\varepsilon_{eff} = \frac{2}{-i\kappa_0 wc} \left(\frac{1 - S_{11} - S_{12}}{1 + S_{11} + S_{12}} \right) \quad (8.14)$$

$$\mu_{eff} = \frac{2}{-i\kappa_0 wc} \left(\frac{1 + S_{11} - S_{12}}{1 - S_{11} + S_{12}} \right) \quad (8.15)$$

8.2 Ganho em antenas

Entre as múltiplas abordagens da utilização do MTM para implementar ganho em antenas, existe a aplicação de matrizes de MTMs com parâmetros de materiais com índice de refração zero ¹⁸(ZIM), baixo índice de refração ¹⁹(LIM), ε próximo a zero (ENZ) ²⁰ou negativo (ENG) e μ próximo a zero²¹ (MNZ) ou negativo (MNG) (ESMAIL et al, 2022).

Ressonadores de anéis divididos (SRR) ²²é um dos mais aplicados MTMs para a obtenção μ negativo, essa célula é composta por dois anéis separados por vazios entre eles, esse vazio tem a função de capacitor, enquanto que os anéis atuam como indutores. Esse MTM é semelhante a um circuito LC, podendo apresentar formato circular ou quadrático (Figura 14). Para adquirir propriedade de MTM duplo negativo ²³(DNG), ao qual apresenta ε e μ negativos,

¹⁸ Zero-Index Materials

¹⁹ Low-Index Materials

²⁰ Epsilon-Near-Zero

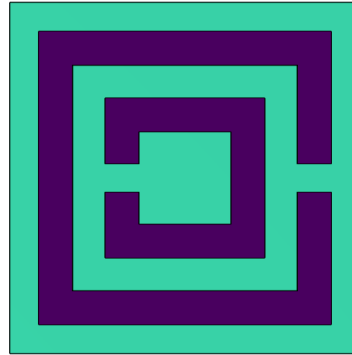
²¹ Mu-Near-Zero

²² Split Ring Resonator (SRR)

²³ Double Negative Materials

SRRs são combinados com *Wire* ou *Rods* metálicos (KRZYSZTOFIK e NGHIA, 2019; CUNHA, 2022).

Figura 14 - Exempla de SRR com o formato quadrático.

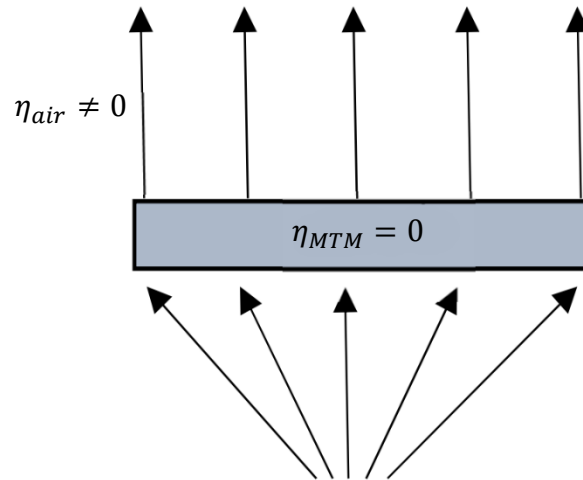


Fonte: Autoria Própria

Apesar de não ser um viés de regra, essas estruturas geralmente são empregadas como matrizes acima do patch de antenas de baixo perfil, também chamados superstratos. No entanto, pode se acrescentar células de MTMs ao redor do material ressonador da antena (ESMAIL et al, 2022; KRZYSZTOFIK e NGHIA, 2019).

A lei de Snell ajuda a explicar como a variação na direção da onda em um meio pode implementar ganho para uma antena de baixo de perfil. Se uma onda que está atravessando o ar ($N = 1$) incidindo com ângulo θ em MTMs ZIM ou LIM ($N = 0$), a onda refratada no MTM sairá com mesmo ângulo que a direção normal. Logo, o ganho induzido é decorrente da mudança de fase da onda que após sair do meio, será próximo ou igual a zero, esse comportamento pode ser visto na figura 15.

Figura 15 - Ondas incidindo em MTM com índice de refração próximo ou igual a zero (ZIM).



Fonte de raios eletromagnéticos (Antena)

Fonte: Adaptado de ESMAIL et al, 2022

Esse mecanismo da lei de Snell também pode ser visualizado para MTMs ENZ e MNZ, pois, pela equação 8.1, qualquer valor de zero na permissividade ou permeabilidade irá resultar em $N = 0$, visto que o produto do múltiplo de zero é zero. A diferença entre os tipos de MTMs é que o valores de permissividade e permeabilidade podem interferir com o casamento de impedância com ar, resultando em perdas de ganho.

9 MODELAGEM E SIMULAÇÃO

Neste capítulo será descrito as etapas de modelagem aplicadas em simulação. Para a realização desse estudo, foram utilizados os softwares Matlab para a tabulação de dados e os módulos de Radiofrequência e Ótica do COMSOL multiphysics.

Os procedimentos foram realizados no computador pessoal do autor, contendo especificações de acordo com o quadro 1:

Quadro 1 - Especificações do computador utilizado para a realização das simulações.

Processador		
Modelo	Frequência	Núcleos
Intel(R) Core (TM) i3-10100F	3,6 GHz	4 núcleos
Unidade de processamento gráfico (GPU)		
Modelo	Memória de vídeo	Frequência de atuação
NVIDIA GeForce GT 1030	2048 MB	1253 MHz
Memória de acesso aleatório (RAM)		
Modelo	Memória	Frequência de atuação
Crucial Ballistix Sport LT 2X8GB	16384 MB	2666 MHz
Unidade de disco		
Modelo	Memória	Tipo de unidade
ST1000DM010-2EP102	932 GB	HD (Hard disk)
Sistema operacional		
Edição	Arquitetura	Compilação
Windows 10 Pro	64 bits	19045.2486

Fonte: Autoria própria

O presente estudo é estruturado nas seguintes etapas:

1. Busca de referencial teórico acerca de teoria de antenas e metamateriais, conseguinte de busca de referencial para seleção do material e revisão do material, sendo que o material selecionando foi carbetto de titânio $Ti_3C_2T_x$.
2. Construção do modelo numérico abordando as propriedades óticas desse material para a construção da modelagem em softwares comerciais de simulação.
3. Elaboração de simulações para conhecimento do software e determinação das condições de contorno a serem aplicadas.
4. Simulação e otimização do projeto baseado na teoria de antenas e no estudo acerca do material selecionado.

5. Pós-Processamento e análise dos resultados.

A nomenclatura adotada para identificar as simulações foram: Metamaterial com $Ti_3C_2T_x$ modelo por Drude-Smith (MTM DS), o equivalente para Drude-Lorentz é (MTM DL); Antena Patch simulada com $Ti_3C_2T_x$ modelado por Drude-Smith (ADS) e por Drude-Lorentz (ADL); por fim, a nomenclatura adotada para as simulações de antenas com metamateriais foram ADS MTM para Drude-Smith e ADL MTM para Drude-Lorentz.

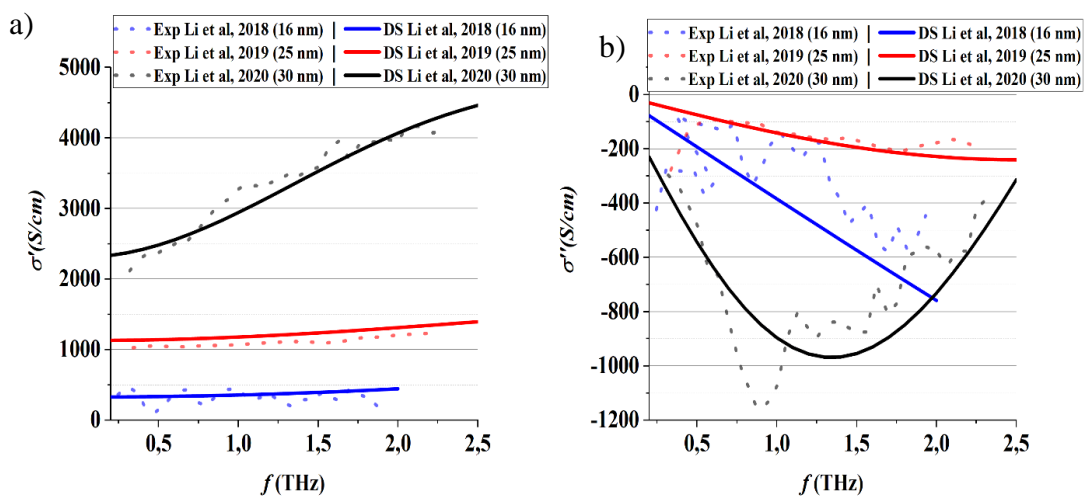
9.1 Análise numérica das propriedades do $Ti_3C_2T_x$.

9.1.1 Permittividade

As propriedades utilizadas para análise do material foram a permitividade complexa e a condutividade; para a construção dessas propriedades foram utilizados os modelos numéricos de Drude-lorentz e Drude-Smith. Os dados utilizados para modelagem foram extraídos dos estudos de CHAUDHURI et al (2018), JAKŠIĆ et al (2020) e de LI et al, dentre 2018, 2019 e 2020.

Li em seus trabalhos promoveram a análise da condutividade do $Ti_3C_2T_x$ através de espectroscopia THz no domínio do tempo para nanofolhas que variavam de 15, 30 a 35 nm em um range de 0,2 a 2 THz, em seus trabalhos são aplicado o modelo de Drude-Smith (DS) para a obtenção de condutividade complexa e posterior modelagem numérica em simulações, os resultados entre o modelo e os dados experimentais apresentaram congruência como pode ser visto pela figura 16 (Li et al, 2018; Li et al, 2019; Li et al, 2020;).

Figura 16 - Condutividade de filmes de $Ti_3C_2T_x$ obtida experimentalmente comparadas com o modelo de Drude-Smith ao decorrer dos estudos de Li. a) Parte Real; b) Parte imaginária.



Fonte: Autoria Própria

CHAUDHURI et al (2018) promove a análise de filmes de *MXene* com espessura de 30 e 400 nm utilizando um Elipsômetro espectroscópico de ângulo variável (VASE) atuando na faixa de 0,4 a 2,5 um (120-750 THz) contudo, a propriedade analisada é a permitividade complexa do material (CHAUDHURI et al, 2018). Estudos como JAKŠIĆ et al (2020), retrocitando o capítulo 7, propõe as constantes a serem empregadas para modelo de Drude-Lorentz (DL) para uma folha de 30 nm, essa monografia promove suaves alterações em seu modelo numérico para o emprego em faixas entre 0,1-10 THz. O quadro 2 apresenta os dados proposto nessa monografia, adjunto com dados presente nas referências (JAKŠIĆ et al, 2020; CHAUDHURI et al, 2018).

Quadro 2 - Dados utilizado para o cálculo dos modelos.

JAKŠIĆ et al, 2020									
f_j			ω_p (rad/s)	ω_1 (rad/s)	γ (rad/s)	Espessura (nm)			
f_1	f_2	f_3							
6	3	0,2	$4,21 \times 10^{15}$	$2,3 \times 10^{15}$	$8,65 \times 10^{14}$	30			
Esse estudo									
f_j			ω_p (rad/s)	ω_1 (rad/s)	ω_2 (rad/s)	γ (rad/s)	γ_2 (rad/s)	γ_3 (rad/s)	Espessura (nm)
f_1	f_2	f_3							
8	0,35	0,2	$4,21 \times 10^{15}$	$2,3 \times 10^{15}$	$8,15 \times 10^{15}$	$8,65 \times 10^{14}$	$1,12 \times 10^{15}$	$7,28 \times 10^{15}$	30
CHAUDHURI et al, 2018									
f_j			ω_p (eV)	ω_1 (eV)	ω_2 (eV)	γ (eV)	γ_2 (eV)	γ_3 (eV)	Espessura (nm)
f_1	f_2	f_3							
0,901	5,21	190,97	3,9	1,549	5,362	0,298	0,74	4,79	400
Esse estudo									
f_j			ω_p (rad/s)	ω_1 (rad/s)	ω_2 (rad/s)	γ (rad/s)	γ_2 (rad/s)	γ_3 (rad/s)	Espessura (nm)
f_1	f_2	f_3							
7,501	0,4	0,2	$5,92 \times 10^{15}$	$2,35 \times 10^{15}$	$8,146 \times 10^{15}$	$4,527 \times 10^{14}$	$1,124 \times 10^{15}$	$7,277 \times 10^{15}$	400

Fonte: Autoria Própria

Aplicando esses dados na equação 9.1 é obtido o valor de permitividade pelo modelo de Drude-Lorentz.

$$\varepsilon = \varepsilon_{\infty} + \sum_{j=1}^M \frac{f_j \omega_p^2}{\omega_{0j}^2 - \omega^2 + i\Gamma_j \omega} \quad (9.1)$$

Para mensurar e extrair os dados, o modelo foi construído no software Matlab, ao qual o núcleo do código para flocos de 30 nm e 400 nm pode ser visualizado a seguir. O código está disponível no apêndice B.

30 nm - Esse estudo

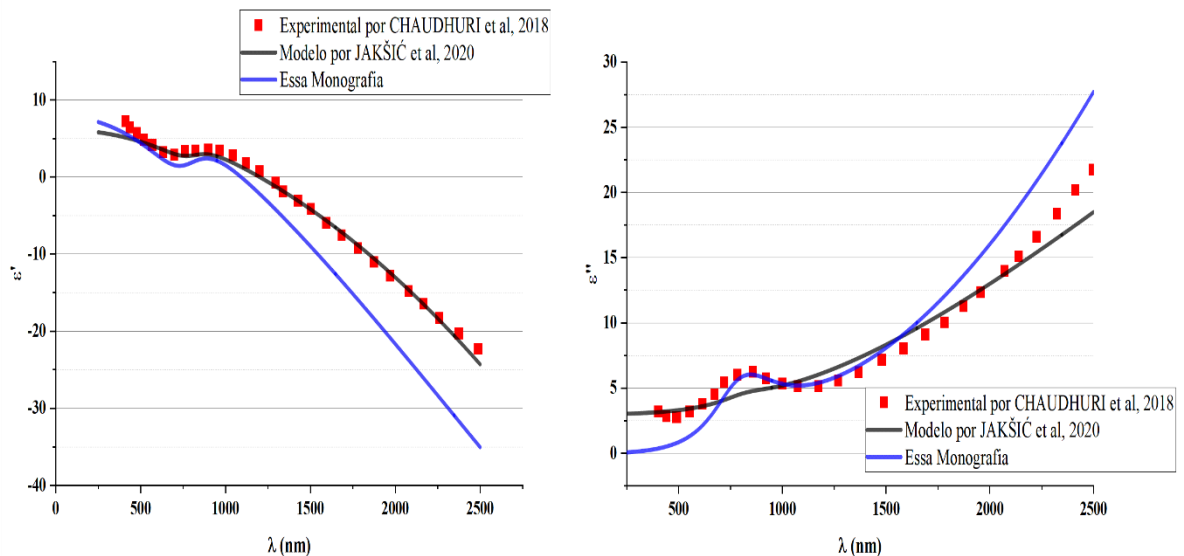
```
d_model30=e1+((wp2.^2)./(-(w.^2)-i*gamma_p.*w))+ (e2*(wp2.^2)./((w2.^2)-(w.^2)-i*gamma_y2.*w))+((wp.^2)./((w3.^2)-(w.^2)-i*gamma_y3.*w));
```

400 nm - Esse estudo

```
d_model400=e1c+((wp2.^2)./(-(w.^2)-i*gamma_p.*w))+ (e2c.*(wp2.^2)./((w2.^2)-(w.^2)-i*gamma_y2.*w))+ (e3c.*(wp2.^2)./((w3.^2)-(w.^2)-i*gamma_y3.*w));
```

Através desse código é possível comparar esse modelo com a análise proposta por JAKŠIĆ et al (2020) e com os dados experimentais de CHAUDHURI et al (2018), esse comparativo é apresentado na figura 17.

Figura 17 - Permittividade para folhas de 30 nm de espessura. a) parte real; b) parte imaginária.



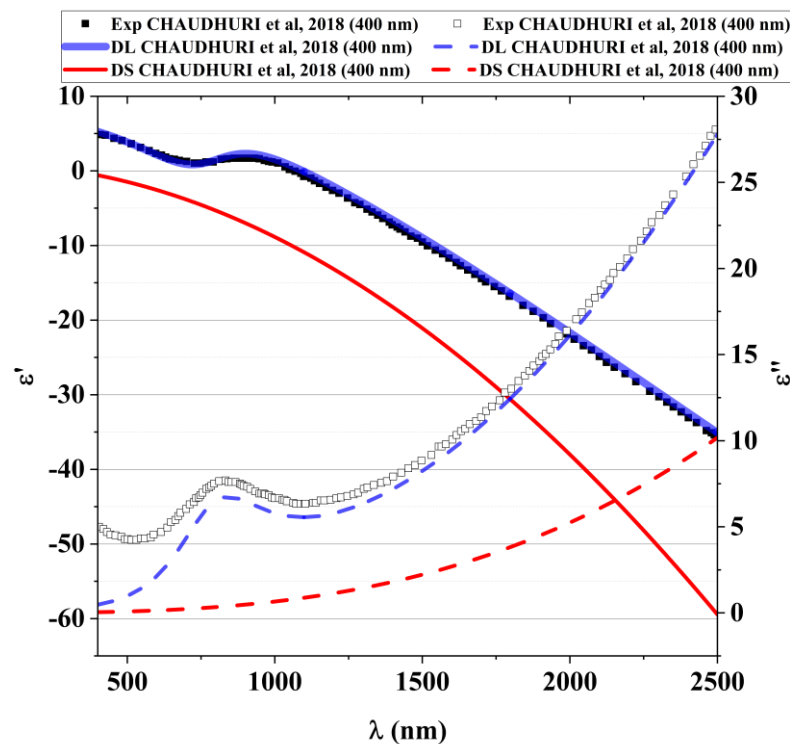
Fonte: Autoria própria

Infer-se que o modelo proposto nessa monografia apresentou boa precisão na faixa de 500-1500 nm, representando os picos de polarização elétrica presente em aproximadamente

750 nm, no entanto, a precisão foi diminuindo com o aumento do comprimento de onda (FUJIWARA, 2007).

Contudo, como pode ser visto na figura 18, o cálculo da permitividade por Drude-Lorentz para espessura de 400 nm apresentou boa precisão, também pode ser visualizado que o modelo de Drude-Smith contém resultados com relativa aproximação, no entanto, o modelo DS não demonstra o pico de polarização elétrica que é proveniente do termo de Lorentz presente na equação 9.1 (FUJIWARA, 2007). Infere-se que essa relativa aproximação entre os modelos, é indicativo de que ambos os modelos estão apitados para a modelagem do material em softwares de simulação.

Figura 18 - Permitividade para folhas de 400 nm. Os valores em azul sólido e azul traçado foram obtidos pela equação 9.1, utilizando os dados relatados no quadro 2.



Fonte: Autoria própria

A espessura do material foi o principal critério para a decisão de abordar ambos os modelos, visto que trabalhos de CHAUDHURI et al (2018) e LI et al (2020) promoveram a produção de filmes com espessura de 30 nm, viabilizando a comparação entre os modelos através de propriedades obtidas, uma vez que em concordância com as equações 6.40, 6.48 e 6.53, os modelos apresentam propriedades congruentes, tais propriedades como frequência de plasma (ω_p) e taxas de espalhamento (γ), e de acordo com as equações 6.37 e 6.40, são propriedades proporcionalmente correlacionadas com a mobilidade e densidade do portador de

carga. Portanto, propriedades de ω_p e γ obtidos em CHAUDHURI et al (2018) para folhas de 30 nm e 400 nm foram aplicadas para o modelo de Drude-Smith.

O modelo de Drude-Smith foi selecionado devido a sua precisão para emular a condutividade do material, levando em consideração as interferências das condições estruturais do material, ao qual promove a supressão da mobilidade de carga devido a presença de nanofloco no filme, diferentemente do modelo de Drude-Lorentz que no THz gap o termo de Drude é predominante, logo, a teoria de movimentação eletrônica como “Gás de elétrons” atravessando sem meios para suprimir a condutividade é mais influente nessa faixa (Li et al, 2019; COCKER et al, 2017; CHEN et al, 2019; FUJIWARA, 2007).

No mais, como pode ser visto em LI et al (2018):

It should be noted that such complex conductivity spectra cannot be well-reproduced by the Lorentz conductivity model used to describe plasmon- and phonon-related effects, as frequency-dependent negative imaginary conductivity in the Lorentz model is accompanied by a significant dispersion in the real conductivity component (LI et al, 2018)

Logo, infere-se que o modelo Drude-Lorentz é viável para a analisar o comportamento plasmônico do material na faixa do THz gap, no entanto, nesse espectro as partes real e imaginária da condutividade apresentam dispersão significativa. Entretanto, CHEN em seus colaboradores (2019), ao analisar polímeros condutores, demonstrou que o modelo de Drude-Lorentz contém grande precisão para análise da propriedade de permitividade nessa faixa (CHEN et al, 2019; Li et al, 2018).

Também é importante recorda que, de acordo com o que foi discutido no capítulo 7, flocos de baixa espessura apresentam menor “propriedade metálica” e pode se comportar como semicondutor com a elevação de energia, isso resultaria em maiores perdas em aplicações de RF como em antenas, que é objeto desse estudo.

9.1.2 Malha

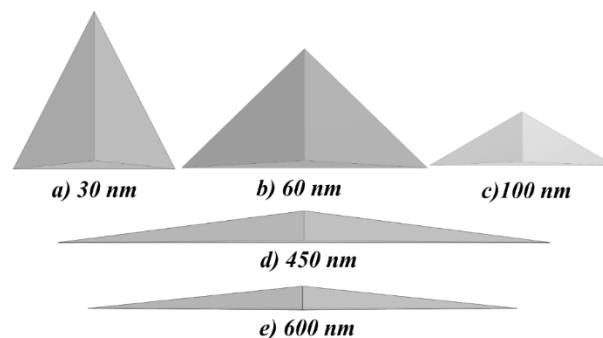
Quando se analisa espessura, é importante levar em consideração a construção da malha, que é influenciada pelas dimensões do projeto, pois, como a espessura do material é fundamental para a simulação de suas propriedades, negligenciar a espessura em modelos de casca acaba sendo ineficaz para representar o comportamento do material em simulação, logo, sabendo que a faixa utilizada para atuação da antena é de 0,1-10 THz (THz gap) e que nessa faixa, pela equação 5.1, antenas apresentam dimensões dentre 10 a 1000 um, haveria a

necessidade da construção de malhas robustas para que a simulação contenha precisão adequada.

Para maior compreensão, se levar em consideração apenas 1 elemento de malha na forma de tetraedro, esse elemento, para que ele não se torne um elemento grosseiro e distorcido que promoveria erros numéricos à simulação; suas dimensões seriam limitadas a valores próximos a sua espessura, conseqüentemente, resultando em uma malha robusta.

Quantificando isso, uma malha com limites de tamanho de elementos definido como: mínimo de 450 nm e máximo de 900 nm apresentam em torno de 1 milhão de elementos em unidade *swerkness*, enquanto que a capacidade computacional disponível para o computador do Quadro 1, consegue lidar somente 200 mil *swerkness*, é importante ressaltar que o tamanho de elemento mínimo ideal, deveria ser de 100 nm, que resultaria em uma malha muito mais robusta que essa. A figura 19 apresenta a distorção de um elemento com espessura de 30 nm ao aumentar o limite de tamanho do elemento, sem modificar a espessura. infere-se que a partir de 450 nm o elemento apresenta grande distorção que pode provocar imprecisão aos resultados.

Figura 19 - Deformação de um elemento de 30 nm de espessura.



Fonte: Autoria própria

9.1.3 Condutividade

Portanto, decorrente da dificuldade de análise em simulação e da desvantagem obtida em termo de condutividade com a diminuição da espessura, o filme de $Ti_3C_2T_x$ com espessura de 400 nm, proposto por CHAUDHURI et al (2018) foi utilizado para as simulações. Contudo, essa espessura não contém material experimental na faixa do THz gap para fins comparativos, portanto, para a modelagem desse material, primeiramente, foi construído o modelo para a folha de 30 nm – que contém aparato comparativo presente nos estudos de LI - e posteriormente, foi construído o modelo para folhas de 400 nm.

Sabendo que pelo modelo de Drude-Smith a condutividade pode ser obtida por:

$$\sigma(\omega) = \frac{\sigma_0}{1 - i\omega\tau_{DS}} \left(1 + \frac{c_1}{1 - i\omega\tau_{DS}} \right) \quad (9.2)$$

Aplicando a equação 6.54 em 6.34 é obtido:

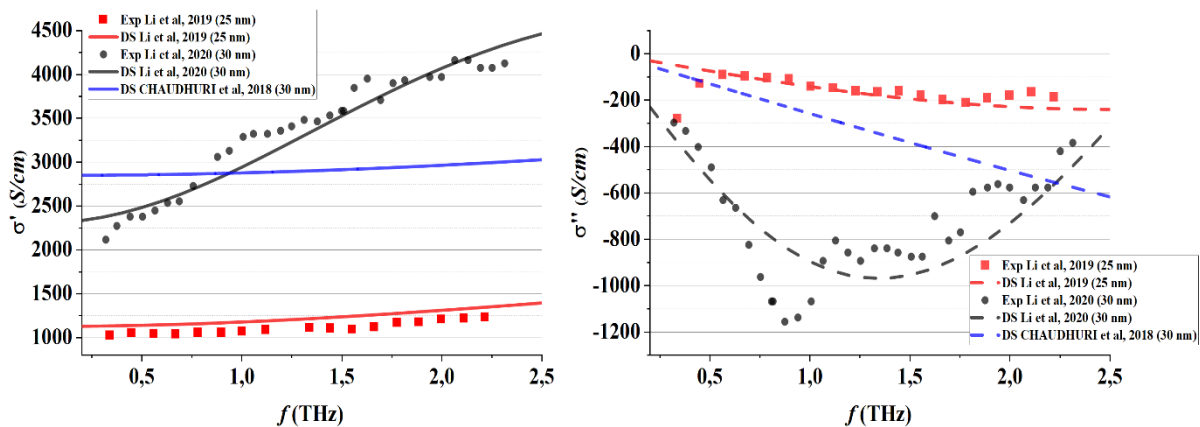
$$\sigma_0 = \varepsilon_0 \omega_p^2 \tau_{DS} \quad (9.3)$$

A equação 9.3 é fundamental perante a ausência das constantes m^* e N_e para as folhas de 400 nm. Considerando $\tau_{DS} = 2\pi/\gamma$, $c_1 = -0.75$ que é parâmetro obtido por LI et al, 2020 e aplicando 9.3 em 9.2, é possível obter a condutividade complexa por Drude-Smith, utilizando os dados de presentes no estudo de CHAUDHURI et al (2018). Os valores obtidos para filmes de 30 nm são apresentados na figura 20, enquanto que o núcleo do código (Apêndice B) utilizado nesse modelo pode ser observado abaixo:

Condutividade Drude-Smith em S/cm

```
M=e*Tds./(mi);
sigma0=(N.*(e.^2).*Tds)./M;
sigmap2=1+(c./(1-i*w.*Tds));
sigma=(sigma0./(1-i*w.*Tds)).*(1+(c./(1-i*w.*Tds)));
```

Figura 20 - Condutividade por Drude-Smith para folhas de 30 nm.

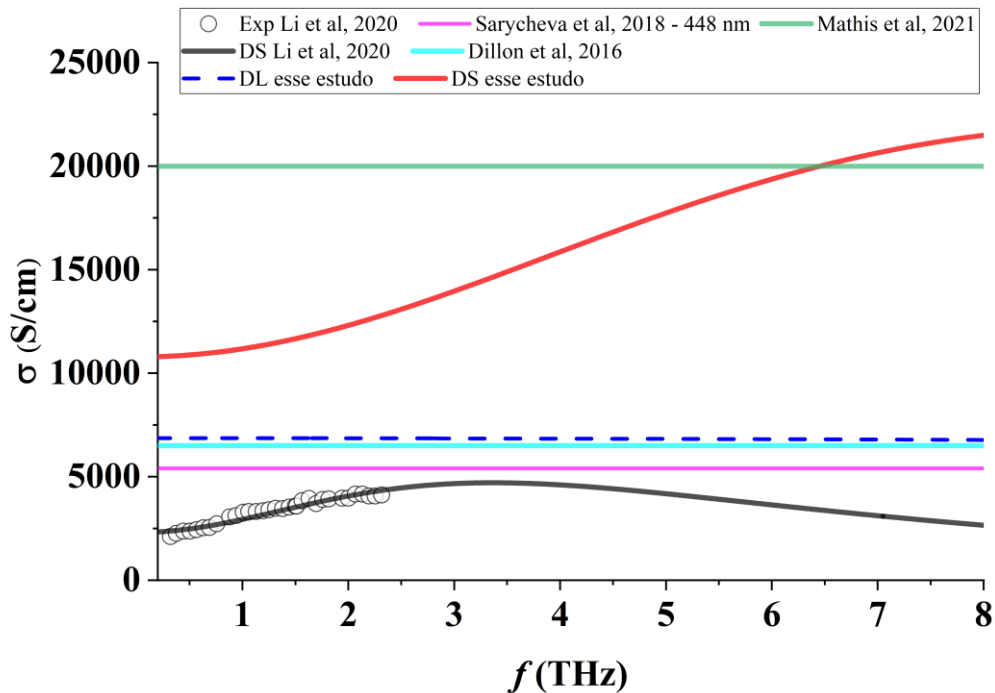


Fonte: Autoria própria

Considerando que as espessuras propostas nos estudos de LI e seus colaboradores apresentavam margem de erro de ± 5 nm e que a síntese do material promove grande interferência na condutividade, os resultados da figura 20 apresentam boa congruência, visto que estão dentro do parâmetro para folhas de 25-30 nm.

Os resultados da figura 20 são de suma relevância para a validação do modelo, visto que os dados obtidos para o filme de 400 nm também será submetido ao mesmo modelo, contudo, sem aporte experimental no THz gap para comparar. A figura 21 representa os resultados de condutividade para folhas de 400 nm de $Ti_3C_2T_x$ em comparação com a literatura.

Figura 21 - Comparação da condutividade calculada para 400 nm e comparação com a literatura.



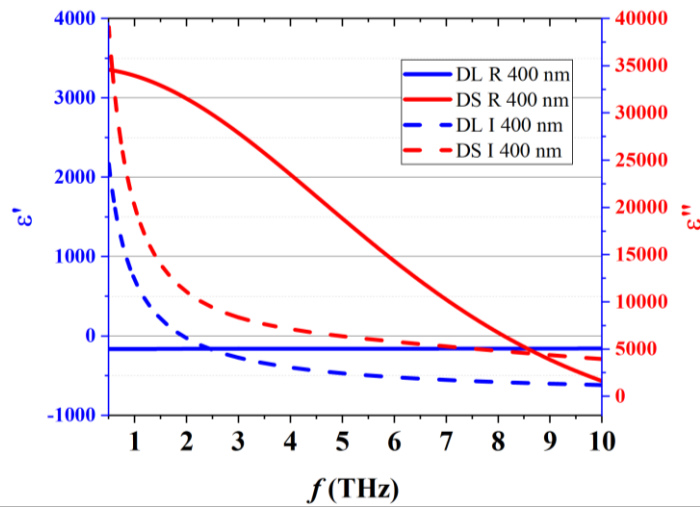
Fonte: Autoria própria

Como pode ser visualizado pela figura 21, os valores calculados estão dentro do parâmetro visualizado na literatura, portanto, aptos para ser empregados em simulação.

É importante reiterar que a proposta desse estudo é analisar o comportamento do material no espectro do THz, por isso, não foi considerado os valores constantes obtidos na literatura, ao qual está presente na figura 21, representando os estudos de DILLON et al (2016), MATHIS et al (2021) e SARYCHEVA et al (2018).

Ainda acerca desse argumento, para analisar o comportamento do material submetido a determinada frequência, a permitividade é um parâmetro fundamental, e como pode ser visto pela figura 7, ϵ é a propriedade que apresenta maior discrepância ao comparar os modelos, esse comportamento também é visualizado ao analisar a figura 22 que analisa a permitividade obtida entre os modelos para filme de 400 nm (CHEN et al, 2019).

Figura 22 - Comparação da permissividade entre os modelos.



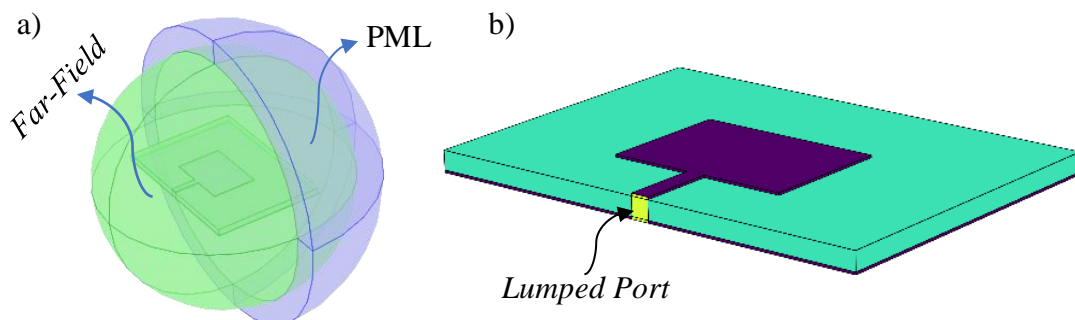
Fonte: Autoria própria

Infere-se pela figura 22 que a permissividade do modelo Drude-Lorentz apresenta comportamento metálico, semelhante ao exposto por FUJIWARA (2007), enquanto que a permissividade obtida por Drude-Smith apresenta tendência de maior polarização dielétrica. A fim sanar dúvidas, ambos os modelos foram empregados para simulação.

9.2 Projeto de antena patch

O projeto foi construído através dos softwares Matlab e pelo módulo de RF do COMSOL multiphysics, o apêndice A apresenta o código utilizado para o desenvolvimento das dimensões do projeto, A física e as condições de contorno foram definidas no COMSOL sendo elas, respectivamente: *Electromagnetic Waves, Frequency Domain; Perfectly Matched Layer, Far-Field Domain e Lumped Port* na face entre o plano terra e a microfita (figura 23 b)). Foi utilizado o *Direct Solver: MUMPS* para a realização dos cálculos.

Figura 23 - a) Condição de contorno PML, em azul claro, em verde claro está a condição de contorno *far-field*.
b) Modelo de antena patch simulada.



Fonte: Autoria própria

O material definido para o substrato foi Sílica Glass de $N = 1,45$, presente na biblioteca do software; como ressonador e plano terra foi definido $Ti_3C_2T_x$ MXene com 400 nm de espessura. A permitividade complexa e a parte real da condutividade foram selecionados para representar o material na construção do modelo, a escolha da parte real da condutividade é referente ao fato de que o software não interpreta o valor imaginário da condutividade complexa, portanto, para melhor representação do material em frequências no THz gap, a permitividade complexa foi selecionada, pois, como indicado pela equações 6.13 a 6.19, por intermédio da permitividade a parte imaginária da condutividade pode ser interpretada fisicamente (EPISKOPOU et al, 2012).

As dimensões foram definidas de acordo com as equações 5.2 a 5.8 e foram otimizadas para maior casamento de impedância na frequência ressonante, a tabela 2 apresenta as dimensões da antena.

Tabela 2 - Dimensões das antenas simulada em micrômetros.

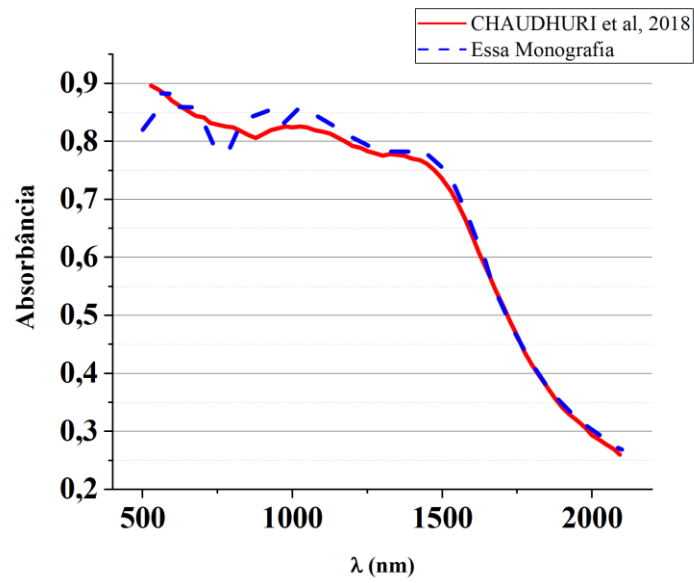
Dimensões da antena							
W (um)	L (um)	W_s (um)	L_s (um)	w_0 (um)	L_f (um)	h (um)	h_m (um)
30	21	75	52,5	3	12	3	0,4

Fonte: Autoria Própria

9.3 Projeto de metamaterial

Para a construção do metamaterial, foi levado em consideração a simulação elaborada por CHAUDHURI et al (2018). Em seu estudo, ele promove a simulação de $Ti_3C_2T_x$, portanto, os parâmetros utilizados na simulação também serão aplicados nessa monografia. As simulações ocorreram no software COMSOL multiphysics utilizando o módulo de ótica; ao todo foram feitas duas simulações, utilizando Drude-Lorentz e Drude-Smith como modelos para determinar as propriedades do material. A figura 24 apresenta o resultado comparativo para a definição da condição de contorno em relação a literatura consultada.

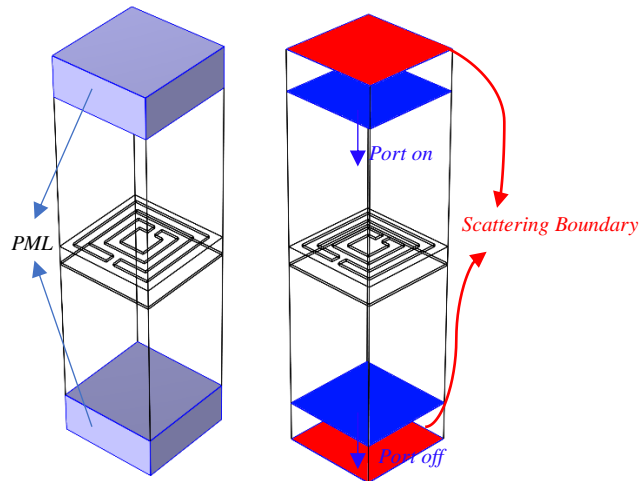
Figura 24 - Comparativo entre simulação desse estudo com a literatura.



Fonte: Autoria própria

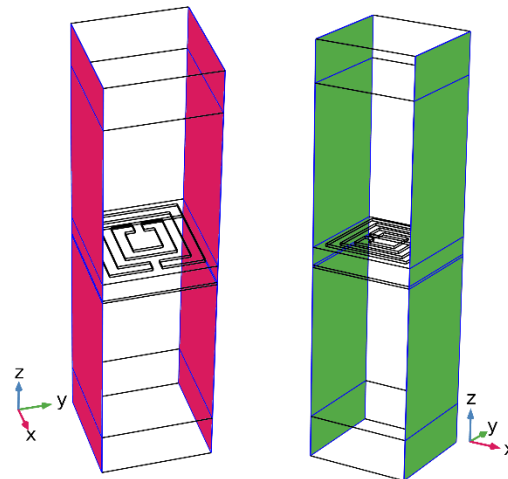
As condições de contornos e física utilizadas foram: *Electromagnetic Waves, Frequency Domain; Perfectly Matched Layer; Scattering Boundary Condition, Port 1: periodic floquet on, Port 2: periodic floquet off.*

Figura 25 - a) Condição de contorno *PML*; b) Condição de contorno *scattering* (editar para colocar as portas)



Fonte: Autoria própria

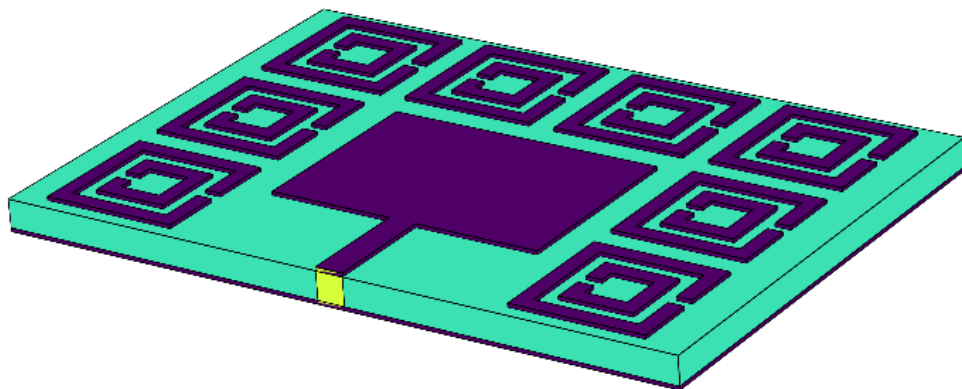
Figura 26 - Direção da periodicidade definida para as portas *floquet*.



Fonte: Autoria Própria

O modelo de metamaterial simulado foi SRR com plano terra na base ao invés de uma pequena fita ao centro, essa substituição ocorre por causa do custo computacional. Elucidando, células de metamateriais podem ser aplicadas acima ou aos lados da antena, contudo, em ambas as situações o custo computacional é elevado, portanto, para diminuir a quantidade de células presentes na antena, o metamaterial foi colocado acima do substrato, ao redor da plaqueta da antena, sobre a influência do plano terra da antena, como pode ser visualizado pela figura 27.

Figura 27 - Antena patch com MTM ao redor do ressonador, proposta nesse estudo.



Fonte: Autoria própria

As dimensões do projeto serão apresentadas pelas equações 9.4 a 9.6, para a determinação das dimensões do projeto foram utilizadas as ferramentas de otimização do software, determinando um tamanho inicial de célula wc , após isso toda a geometria foi

confeccionada baseado nesse tamanho que representa $\lambda/24$. Para uma célula com dimensões de $wc = 17,5 \mu m$:

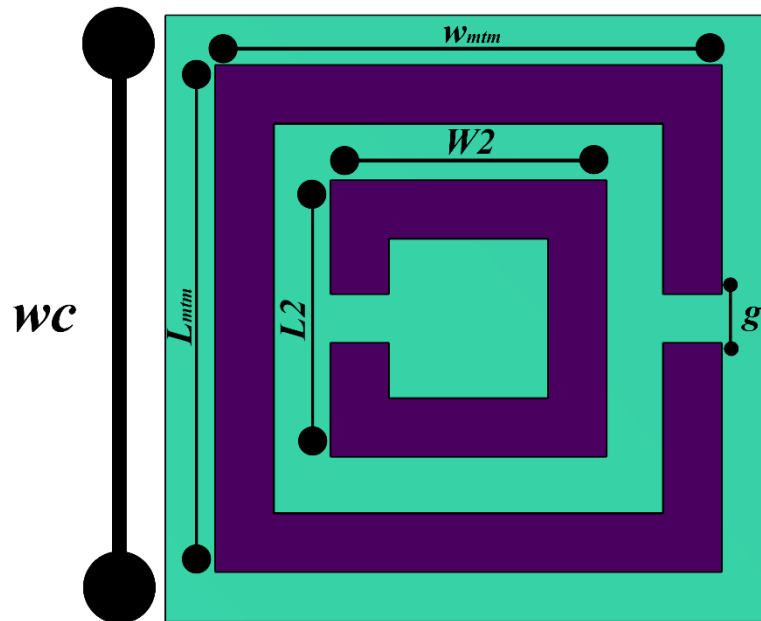
$$W_{mtm} = \frac{wc}{1,2}; L_{mtm} = \frac{wc}{2,2} \quad (9.4)$$

$$W2 = \frac{W_{mtm}}{1,3}; L2 = \frac{W_{mtm}}{1,4} \quad (9.5)$$

$$g = W2/8 \quad (9.6)$$

Por essa abordagem, foi possível otimizar todo o tamanho do metamaterial de acordo com a figura 28, apenas modificando a dimensão da célula unitária wc .

Figura 28 - Geometria SRR definida pelas equações 9.4 a 9.6.



Fonte: Autoria própria

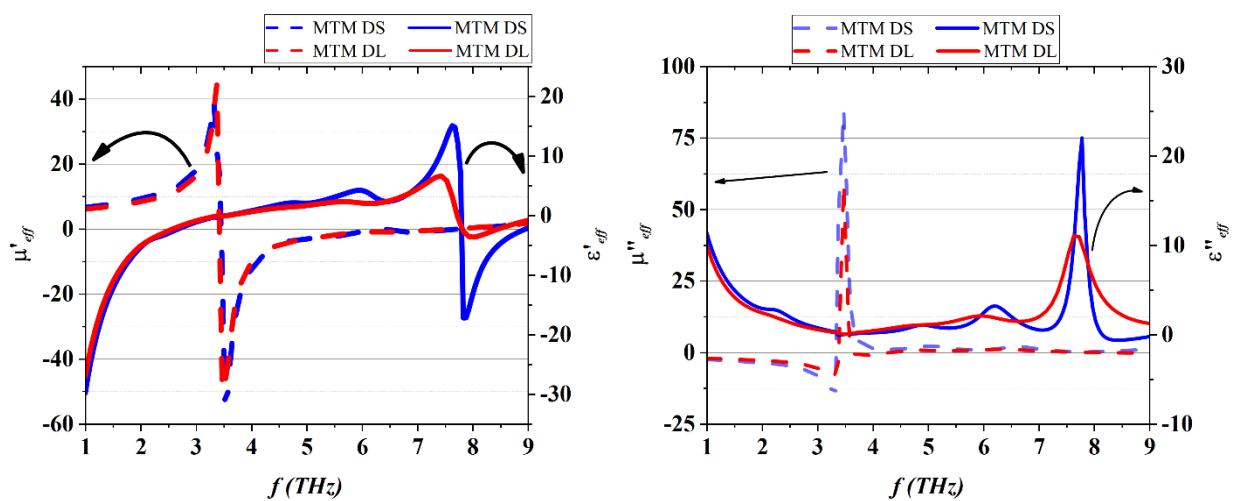
10 RESULTADOS E DISCUSSÃO

10.1 Metamaterial

10.1.1 Permittividade e Permeabilidade

A figura 29 a) apresenta a permissividade e permeabilidade real efetiva do MTM, enquanto que a figura 29 b) apresenta a parte imaginária, infere-se que na faixa de 1-3 THz o MTM se comporta como meio ENG e a partir de 3-6 THz se torna meio MNG com permissividade próximo de zero (ENZ), novos picos e comportamento ENG pode ser visualizado a partir de 7,5-9 THz. A parte imaginária da permeabilidade representa perda do meio magnético (LEE e CHOI, 2021). A figura 29 b) denota acentuada perda durante a faixa de 3,2-3,5 THz. No entanto, pela figura 29 a), a faixa de 3-6 THz representa uma faixa de atuação e o comportamento da antena com MTM nessa faixa será observado.

Figura 29 - Permeabilidade e permissividade. a) parte real, b) parte imaginária.



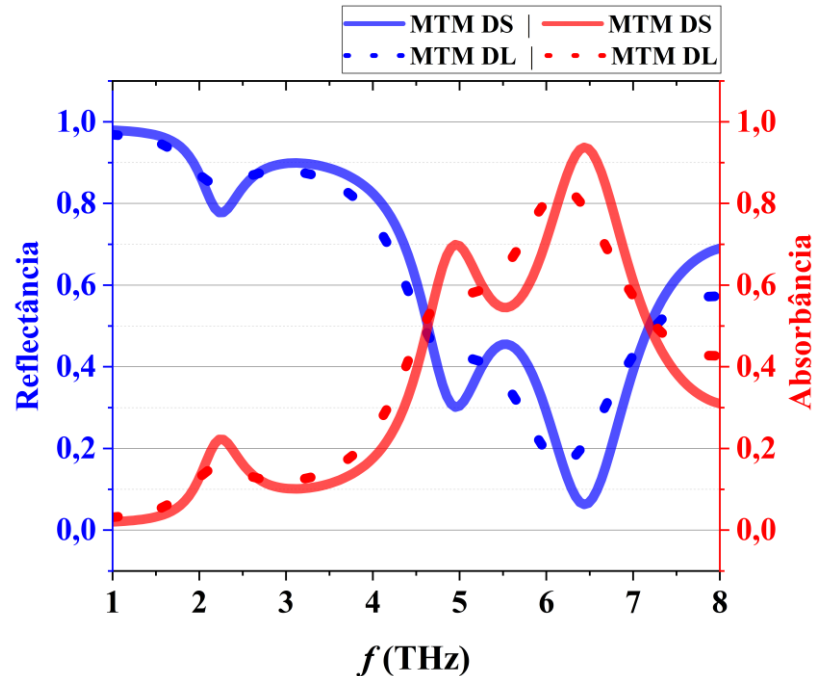
Fonte: Autoria Própria

10.1.2 Absorbância e Reflectância

A figura 30 apresenta a absorvância e reflectância do MTM, denota-se alta absorvância entre 6-7 THz e elevada reflexão de 3-4 THz. Elevada absorção é indicativo de faixa de atuação do MTM como absorvedor de ondas EM, podendo o MTM se comportar como escudo eletromagnético, a influência dessa faixa na antena com MTM deve ser observada (JAKŠIĆ et al, 2020; CUI et al, 2021). De modo geral, os resultados apresentaram forte congruência entre si, logo, a variação do modelo não apresentou grandes alterações entre os resultados obtidos,

significando menor margem de erros, caso apenas um dos modelos contenha valores próximos ao experimental para uma folha de 400 nm.

Figura 30 - Absorbância e reflectância; linhas sólidas MTM DS e linhas pontuadas MTM DL.

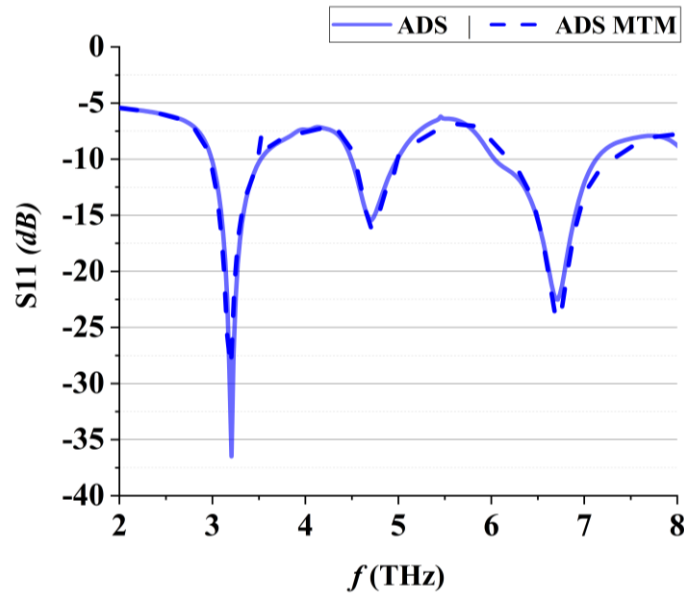


Fonte: Autoria Própria

10.2 Antena patch e Antena patch com MTM

10.2.1 Parâmetro de espalhamento

As figuras 31 e 32 apresentam o parâmetro de espalhamento S_{11} em dB, denota-se que as antenas simuladas apresentaram três frequências de ressonância em proximidades de 3-4,5-6,5 THz, percebe-se também que a adição de MTM na estrutura não promoveu drásticas alterações em termos de largura de banda e frequência de ressonância, no entanto, as antenas ADL e ADL MTM apresentaram maior reflexão em frequências no modo fundamental, próximas a 3,2 THz, enquanto que as simulações de ADS e ADS MTM, apresentaram menor reflexão no modo fundamental, sendo esse o modo de ressonância predominante nessas antenas.

Figura 31 - Parâmetro de espalhamento para $Ti_3C_2T_x$ modelado por Drude-Smith.

Fonte: Autoria Própria

A tabela 3 apresenta os dados obtidos para as antenas com $Ti_3C_2T_x$ modelado por Drude-Smith.

Tabela 3 - Tabela com os resultados de ADS e ADS MTM.

Parâmetros	ADS			ADS MTM		
Frequência de Ressonância (THz)	3,205	4,712	6,715	3,2	4,72	6,72
Espalhamento S11 (-dB)	36,478	15,422	22,517	28,5	16,27	24,38
Largura de Banda (GHz)	527	494	1094	520	464	1122

Fonte: Autoria Própria

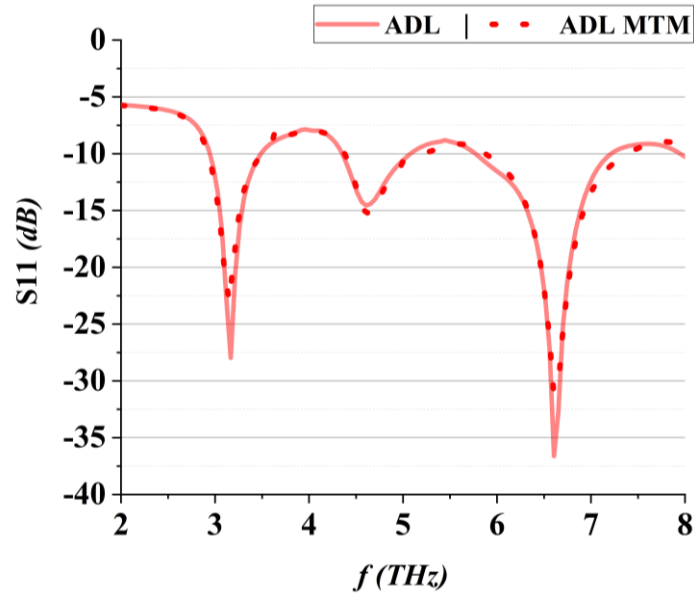
Ao analisar a largura de banda em termos percentuais ($\%BW$), foi possível notar maior largura de banda para a frequência de 3,2 THz na antena ADS, representando um total de 16,44 % de $\%BW$, enquanto que na faixa de 6,715 THz, $\%BW$ foi de 16,3 %.

Com o incremento de MTM foi possível observar aumento de 0,4% de $\%BW$ para frequência 6,72 THz obtendo 16,7%, as demais frequências de ressonância obtiveram diminuição de 0,15 % (16,25%) e 0,68 % (9,83%), respectivamente, para as frequências de aproximadamente 3,2 THz e 4,72 THz; pela figura 30 é possível notar que o aumento de largura de banda está atrelado a forte absorbância do MTM na faixa de 6-7 THz.

A seguir será analisado os resultados para as antenas com $Ti_3C_2T_x$ modelado por Drude-Lorentz, de antemão, pela figura 32, é possível notar maior reflexão em $\approx 3,2 THz$ do que em

$\approx 6,7 \text{ THz}$ e que o MTM não proveu grandes mudanças nesse aspecto, provendo $6,6 \text{ THz}$ como frequência de maior ressonância.

Figura 32 - Parâmetro de espalhamento para $\text{Ti}_3\text{C}_2\text{T}_x$ modelado por Drude-Lorentz.



Fonte: Autoria Própria

Tabela 4 - Resultados de ADL e ADL MTM.

Parâmetros	ADL			ADL MTM		
Frequência de Ressonância (THz)	3,167	4,607	6,606	3,15	4,65	6,6
Espalhamento S11 (-dB)	27,968	14,558	36,613	23	15,233	30,805
Largura de Banda (GHz)	543	726	1443	587	833	1516

Fonte: Autoria Própria

De acordo com a tabela 4, é perceptível que em faixas próximas ao $3,2 \text{ THz}$, a largura de banda da antena não obteve grande alteração com a mudança da modelagem do $\text{Ti}_3\text{C}_2\text{T}_x$ para Drude-Lorentz obtendo $17,14\%$, no entanto, nas faixas $\approx 4,5 \text{ THz}$ ($15,76\%$) e $\approx 6,7 \text{ THz}$ ($21,84\%$) é possível perceber aumento de largura de banda em relação as simulações ADS e ADS MTM, pois em $4,6 \text{ THz}$ e proximidades, foi notado o aumento de $5,28\%$ de $\%BW$, mudança semelhante pode ser visualizada em faixas próximas a $6,6 \text{ THz}$, ao qual teve aumento de $5,54\%$ em relação ao modelo anterior, esse aumento de $\%BW$ pode ser referente ao comportamento metálico do $\text{Ti}_3\text{C}_2\text{T}_x$ proposto pelo modelo de Drude, pois, retrocitando o capítulo 6, o modelo de Drude-Lorentz não suprime a parte de Drude em frequências entre 1 a 10 THz e ainda acerca desse capítulo, pela figura 7, a permissividade é o principal valor que

altera entre os modelos, percebe-se também pela figura 22 no capítulo 9 que os valores do modelo de Drude-Lorentz para o filme de 400 nm de $Ti_3C_2T_x$ apresentaram permitividade negativa, comportamento visualizado em metais como ouro, prata e cobre (CHEN et al, 2019; PANDEY et al, 2016; ZOU, 2013; BLANCHARD et al, 2012; TUKMAKOVA et al, 2020).

Analisando a adição do MTM na superfície da antena ADL, é possível perceber aumento $\%BW$ ao custo de maior reflexão em frequências de 3,15 THz, pois, como pode ser visualizado na figura 32, adjunto do aumento de 1,49% (18,63%) de $\%BW$, contém o aumento de -27,968 dB do parâmetro de espalhamento para -23 dB, aspecto semelhante é visto em 6,6 THz, adjunto do aumento de 1,13% (22,96%) tem o aumento de -36,613 para 30,805 dB, somente 4,65 THz que conteve diminuição da reflexão em -14,558 para -15,233 dB.

De modo geral, as antenas foram efetivas em ressoar na faixa do THz gap e apresentaram largura de banda coerente com o que foi exposto pela literatura, O quadro 3 compara os resultados obtidos desse estudo com diversas antenas encontradas na literatura que atuam no gap do THz.

Quadro 3 - Comparativo de dados obtidos com literatura.

Nomenclatura	Frequência de Ressonância (THz)	$\%BW$	Referência
CPDRA	3,53	18,41	VISHWANATH et al, 2022
NoGNR-PBG	3,984	4,227	SOUZA, 2021
Graphene SIW G3	4,67	21,84	ALoui et al, 2022
Microstrip Array	3,2	1,875	VIJAYALAKSHMI et al, 2021
Dual-Port MIMO Antenna	1,82	6,06	VARSHNEY et al, 2019
ADS	3,205	16,44	Esse estudo
ADS MTM	3,15	16,25	Esse estudo
ADL	3,167	17,14	Esse estudo
ADL MTM	3,15	18,63	Esse estudo

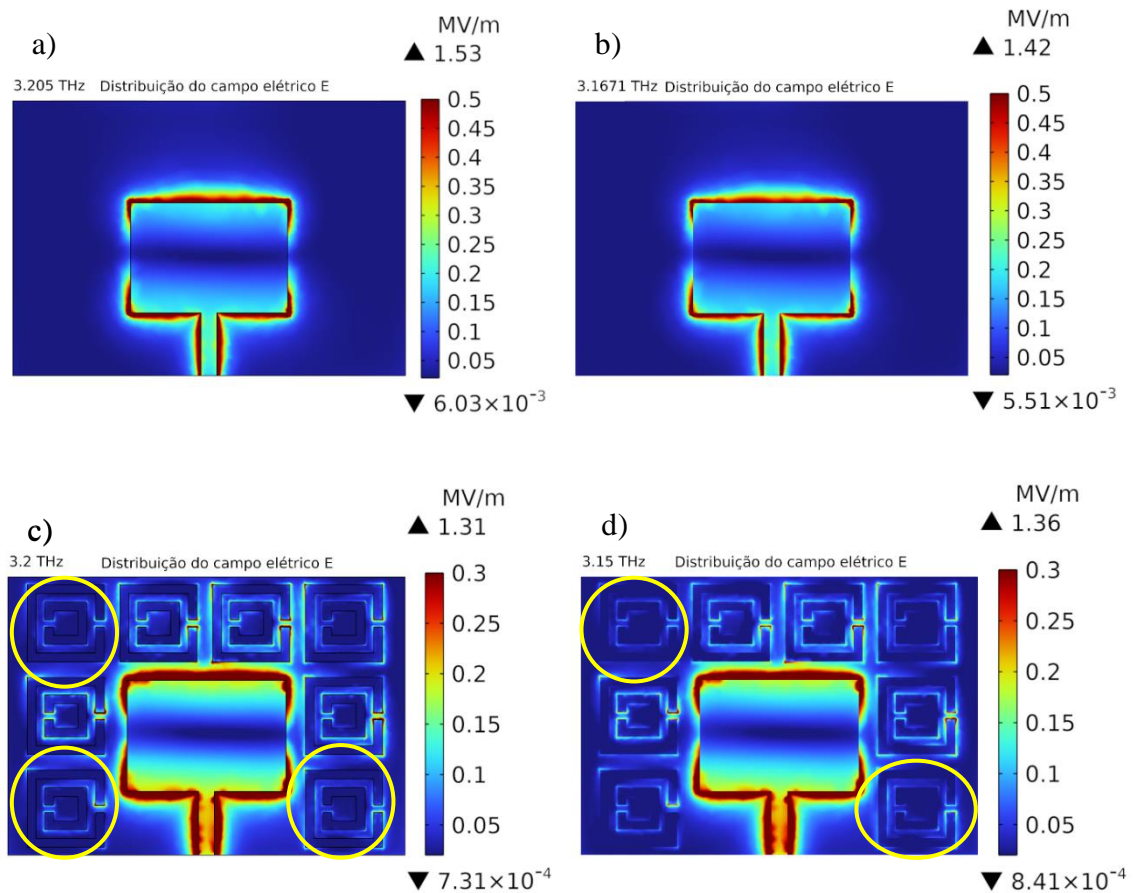
Fonte: Autoria Própria

É importante frisar que nem todas as antenas apresentadas no Quadro 3 são antenas de baixo perfil e em muitas delas foram implementadas técnicas, como o substrato PBG, para fomentar aumento de performance.

10.2.2 Distribuição de Campo

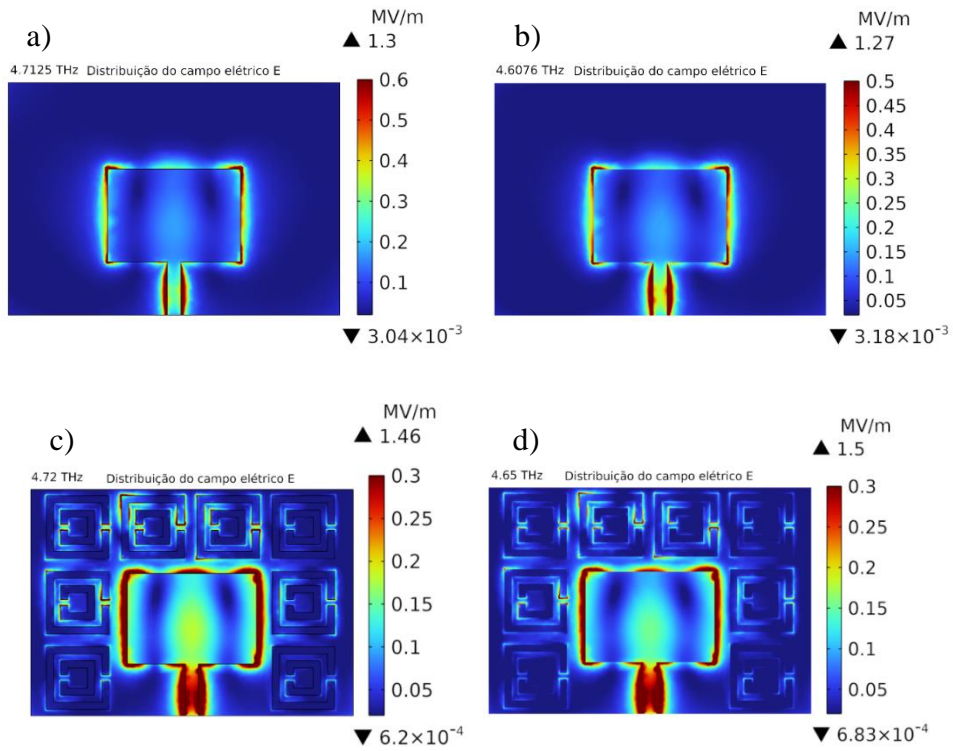
Como exposto pelo parâmetro de espalhamento, as antenas apresentaram múltiplas frequências ressonantes, essas frequências são indícios de radiação espúria ou de modos em outras ordens, sendo que radiação espúria é uma desvantagem nesse tipo de antenna. Através dos gráficos de distribuição de campo é possível identificar qual é modo fundamental da antenna e quais os modos espúrios, as figuras 33, 34 e 35 irão apresentar a distribuição do campo elétrico (E) e os modos ressonantes das antenas nesse estudo (BALANIS, 2014, v.2; CUNHA, 2020).

Figura 33 - Distribuição de campo no modo fundamental TM₁₀ para as antenas a) ADS; b) ADL; c) ADS MTM e d) ADL MTM.



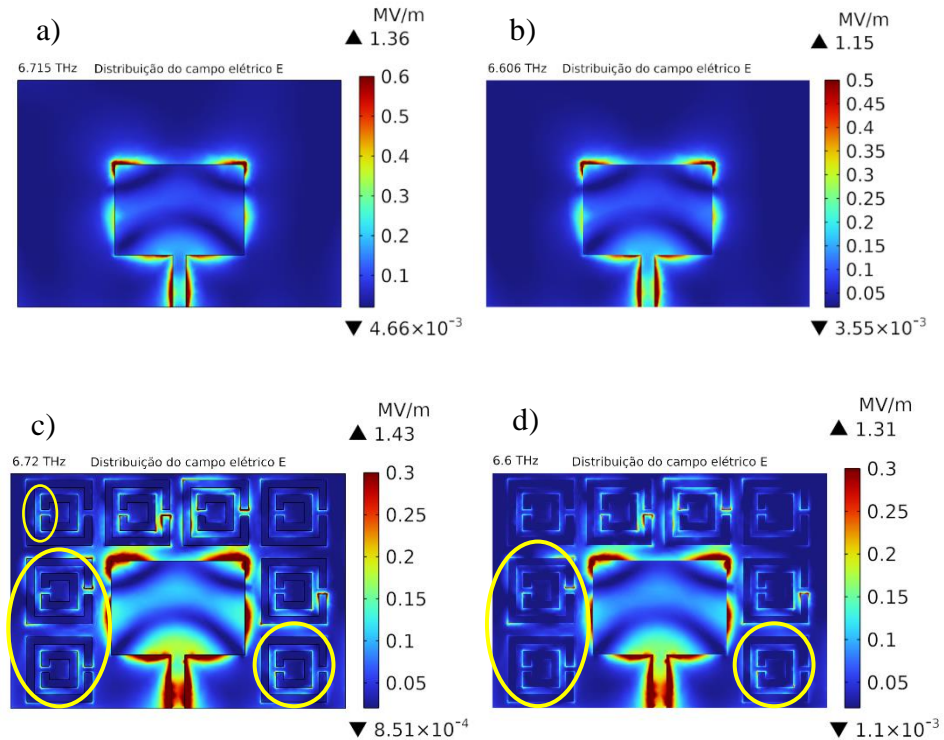
Fonte: Autoria própria

Figura 34 - Distribuição de campo no modo TM₀₂ para as antenas a) ADS; b) ADL; c) ADS MTM e d) ADL MTM.



Fonte: Autoria própria

Figura 35 - Distribuição de campo no modo TM₂₀ para as antenas a) ADS; b) ADL; c) ADS MTM e d) ADL MTM.



Fonte: Autoria própria

Ao verificar as figuras 33, 34 e 35 e consultar a literatura, é possível determinar que a antena opera em três modos distintos e segundo SOUZA et al (2020), são os modos: fundamental TM₁₀ na faixa de 3,1-3,2 THz, TM₀₂ em 4,6-4,7 THz e TM₂₀ na faixa de 6,6-6,7 THz (SOUZA et al, 2020). Também é possível visualizar o efeito de franjamento ao redor do patch das antenas e aumento da uniformidade de distribuição do campo elétrico E no substrato das antenas com MTM, ao decorrer do aumento da frequência, esse comportamento foi visualizado no estudo de CUNHA (2020), pelo qual propõe que é decorrente das células MTM atuando como extensão do elemento radiante, por sua vez, acaba resultando em modos artificiais (CUNHA, 2020).

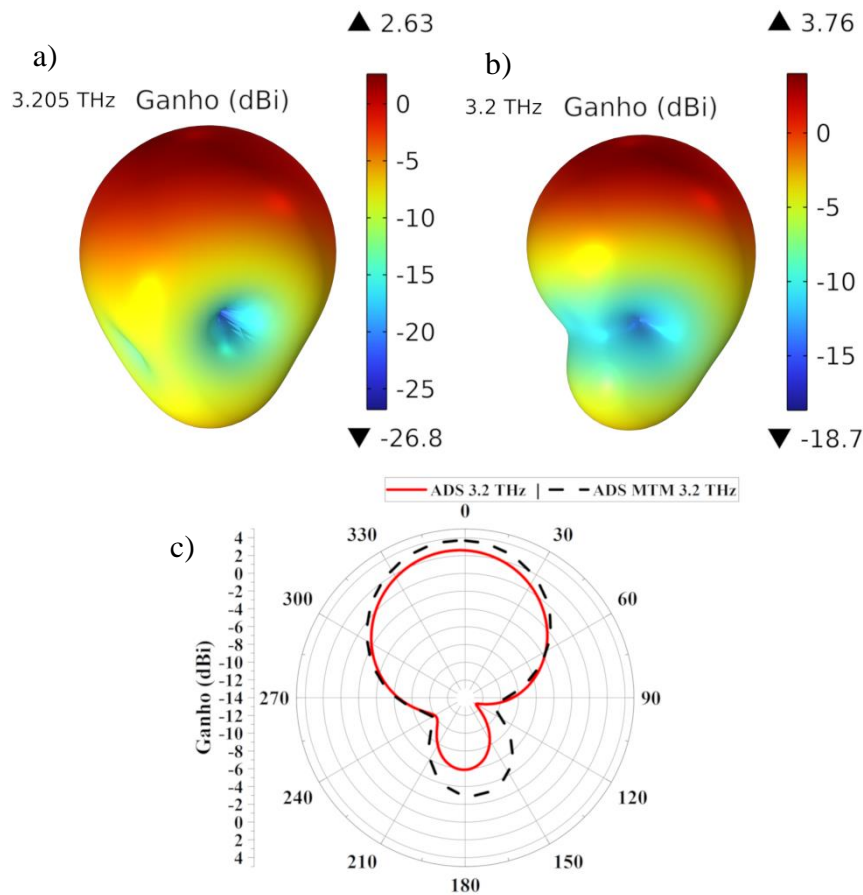
No presente estudo, ao analisar as faixas 3-6,7 THz nas figuras c) e d) de 33 e 35, é possível visualizar aumento da distribuição do campo elétrico nas antenas ADS MTM e ADL MTM; as regiões destacadas na figura 33 c) e d) representam localidades que apresentaram déficit de campo elétrico, enquanto que na figura 35 c) e d) demonstram o surgimento de ilhas formadas com aumento da frequência e, conseqüentemente, com mudança de modo do TM₁₀ para TM₂₀.

Esse comportamento é provocado pela indução de campo elétrico do patch para os elementos ressonantes do MTM e isso pode acarretar aumento na largura de banda em certos modos, apesar de que a intensidade desse aumento não é suficiente pra originar modos artificiais nas antenas simuladas, essa distribuição pode ter acarretado o aumento da largura de banda na faixa 6,7 THz que foi visualizado na antena ADS MTM, no mais, esse comportamento reforça o MTM como material absorvedor de ondas eletromagnéticas, pois essa faixa está alinhada com os picos de absorbância presentes na figura 30.

10.2.3 Ganho

A seguir, as figuras 36, 37, 38, 39 e 40 irão apresentar os diagramas de radiação 2D e 3D para as antenas simuladas, podendo observar o comportamento dos campos radiados pelas antenas.

Figura 36 - Diagrama de radiação para as antenas: a) ADS; b) ADS MTM, Atuando no modo fundamental TM₁₀. Em c) pode ser visualizado o diagrama de radiação do 2D de ambas antenas.



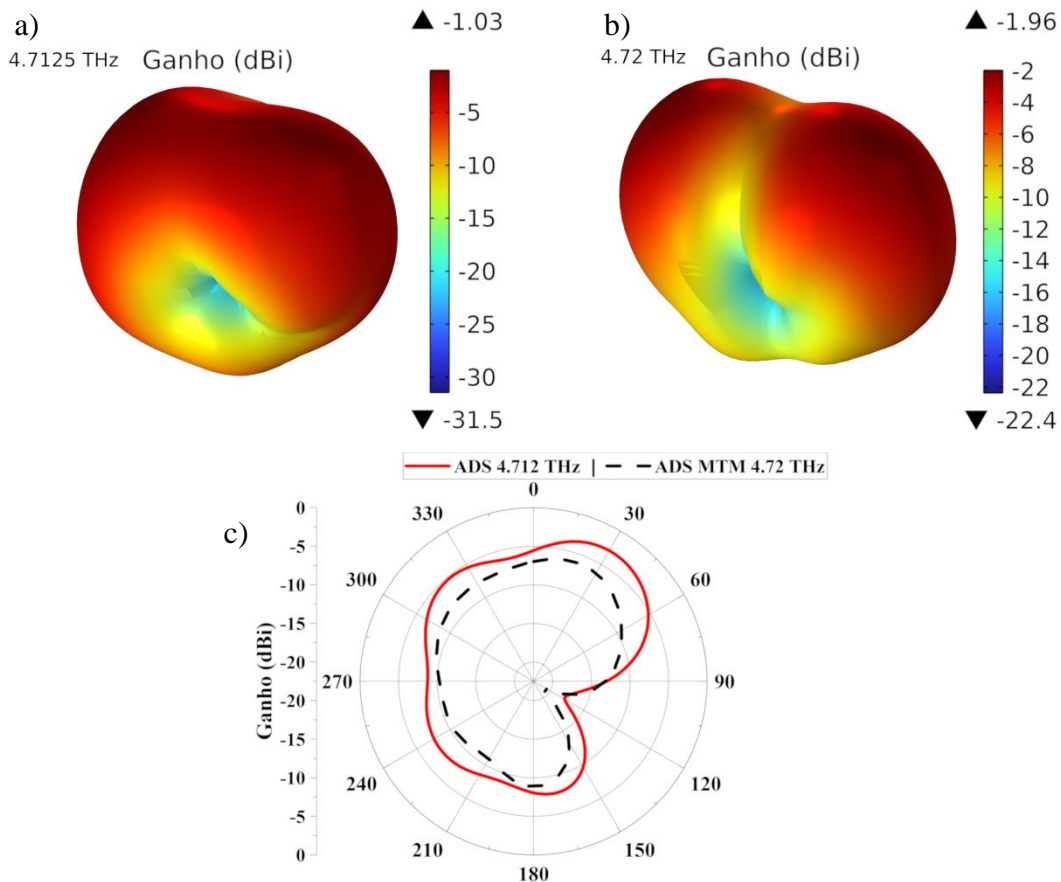
Fonte: Autoria própria

A antena ADS apresentou ganho de 2,63 dBi em 3,205 THz, valor próximo de literaturas como SOUZA (2020) e KHALEEL et al (2022), esse valor também está em concordância com comportamento de antenas de baixo perfil. A antena apresentou boa diretividade nessa frequência chegando a 7,34 dB. Pelo diagrama de radiação percebe-se a presença de um lóbulo principal de alta intensidade em 3,2 THz e um lóbulo secundário de menor intensidade; com incremento do MTM, o lóbulo principal demonstra aumento de 1,13 dBi que pode ser decorrente do pico de permeabilidade magnética do MTM que pode ser visualizado pela figura 29 a) sendo que conseguinte, o MTM apresenta o comportamento de metamaterial MNG-ENZ.

Pela figura 36 c), também é possível visualizar significativo aumento ao redor do lóbulo secundário. Segundo análise de CUNHA, 2020 aumento no lóbulo secundário pode ser proveniente do princípio de funcionamento do MTM, ao qual é baseado por reflexão e transmissão, como pode ser visto nas equações 8.9 a 8.13, logo, uma vez que o MTM promove o espalhamento de campo elétrico, lóbulos secundários acabam sofrendo influência desse

espalhamento (CUNHA, 2022). A figura 37 apresenta o diagrama de radiação para antenas ADS na faixa de 4,7 THz.

Figura 37 - Diagrama de radiação para as antenas: a) ADS; b) ADS MTM, Atuando no modo TM02. Em c) pode ser visualizado o diagrama de radiação do 2D de ambas antenas.



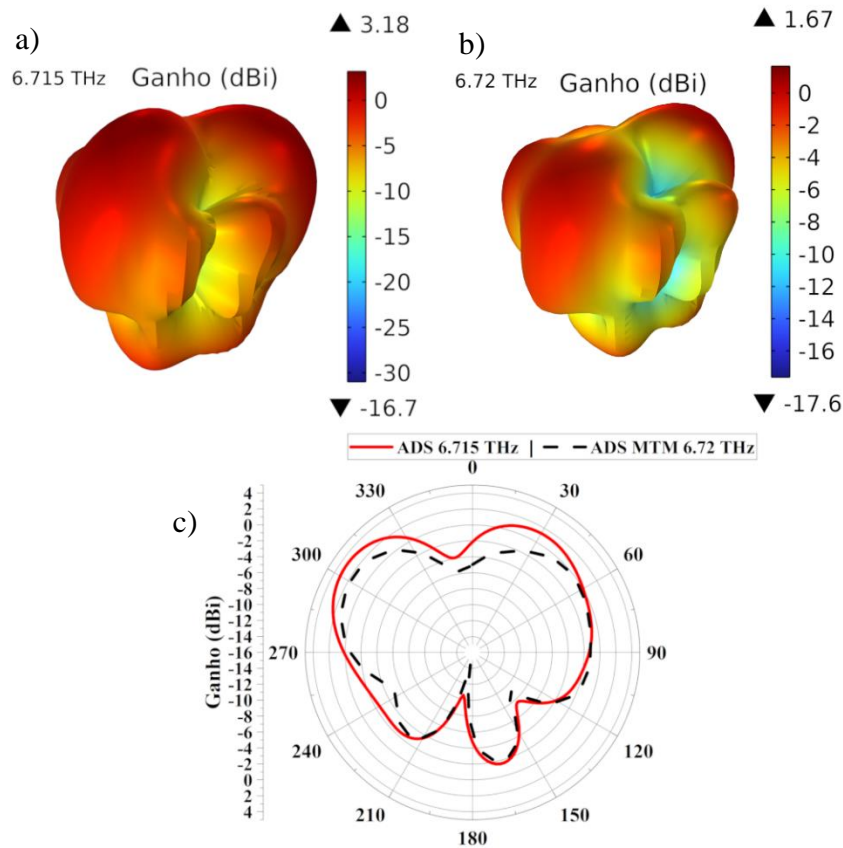
Fonte: Autoria própria

De acordo os diagramas na figura 37, o modo TM02 não está apto para a operação e funcionamento da antena, o ganho obtido é de -1,03 dBi na antena ADS, indicando que a radiação está abaixo de uma antena padrão, ou seja, não apresentando eficácia para a conversão energia \leftrightarrow ondas (CUNHA, 2020).

O incremento de MTM, não proveu melhorias em termo de ganho, como demonstra o diagrama na figura 37 b). O acréscimo de MTM na superfície do substrato gerou diminuição do campo radiado em 4,72 THz, no entanto, o MTM promoveu uma ligeira melhoria na diretividade, ao qual variou de 4,67 dB para 4,78 dB.

Posteriormente será apresentado os diagramas de radiação para ADS na faixa de 6,7 THz na figura 38 a), b) e c).

Figura 38 - Diagrama de radiação para as antenas: a) ADS; b) ADS MTM, Atuando no modo TM₂₀. Em c) pode ser visualizado o diagrama de radiação do 2D de ambas antenas.

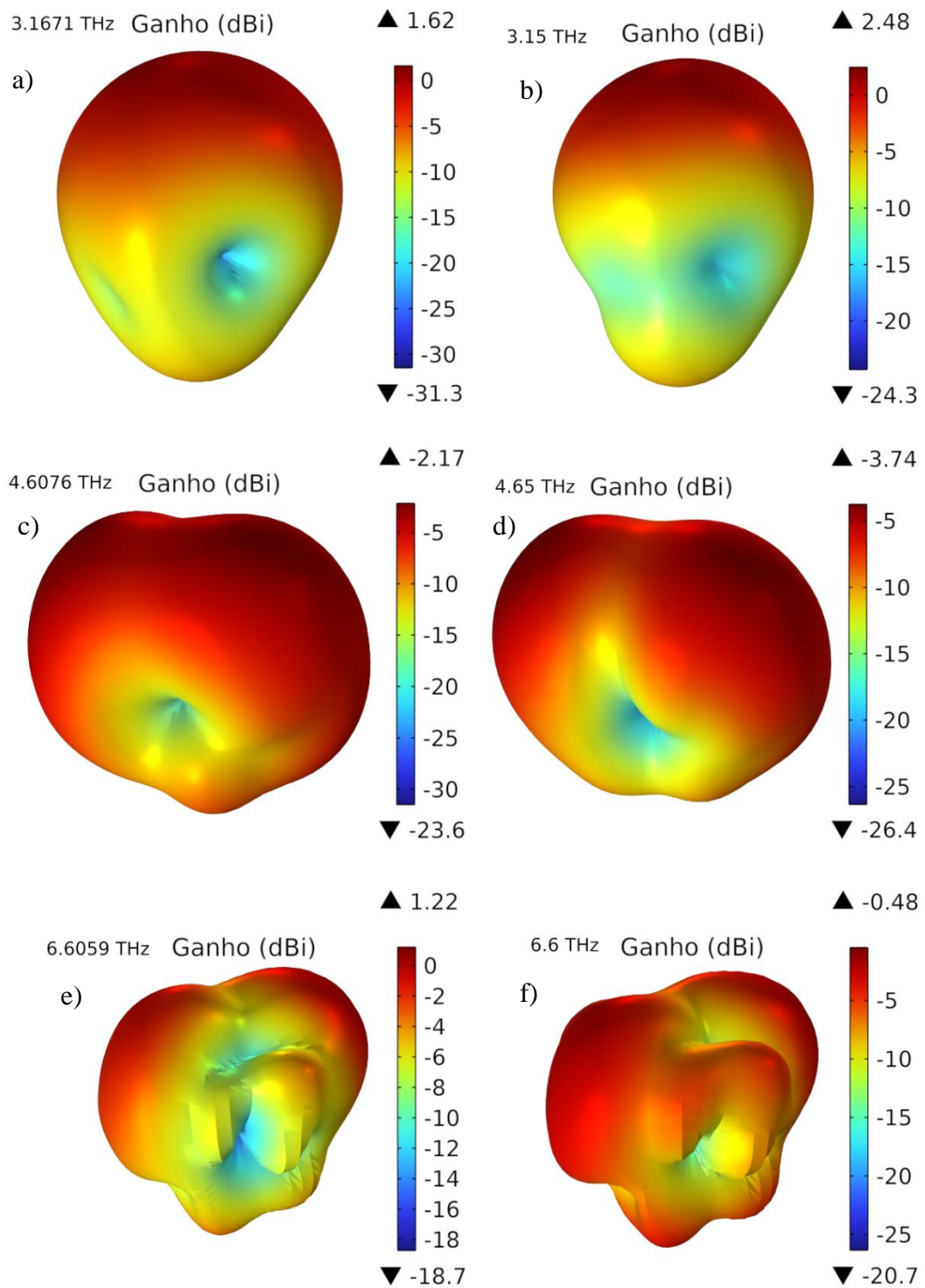


Fonte: Autoria própria

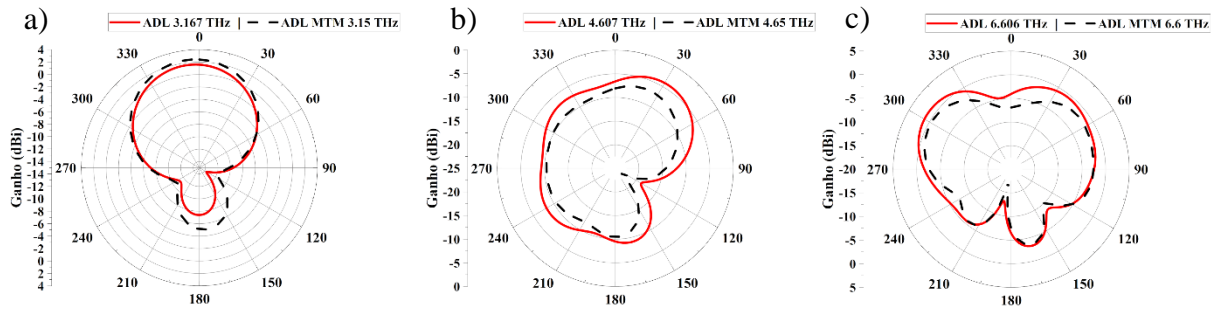
O diagrama de radiação na figura 37 a) revela que no modo TM₂₀, a antena ADS contém ganho de 3,18 dB, sendo mais eficiente que em 3,205 THz no modo fundamental, no entanto, apresenta menor diretividade contendo 6,27 dB, enquanto que ADS no modo fundamental apresenta diretividade de 7,34 dB, o diagrama corrobora essa informação, visto que a geometria apresentada nas figuras 38 a) e b) aparentam ter a intensidade de radiação compartilhada em dois lóbulos em direções distintas.

As figuras 38 b) e c), demonstram que o acréscimo de MTM promove a diminuição da intensidade de radiação na faixa de 6,7 THz, promovendo variação de ganho de 3,18 dB para 1,67 dB. Essa informação é importante para otimizar a aplicação da antena, visto que ao analisar a largura de banda no modo TM₂₀, o MTM promoveu melhorias na faixa de 6,7 THz e decréscimo em 3,2 THz, ou seja, existe correlação de melhoria de ganho ao custo de largura de banda para antenas que utilizam o modelo de Drude-Smith. As figuras 39 e 40 apresentam o diagrama de radiação para as antenas ao qual foi aplicado o modelo de Drude-Lorentz para simular as propriedades do Ti₃C₂T_x.

Figura 39 - Diagrama de radiação para as antenas ADL e ADL MTM nos modos: a) e b) TM10; c) e d) TM02 e e) e f) TM20.



Fonte: Autoria própria

Figura 40 - Diagrama de radiação 2D para: a) TM10; b) TM02 e c) TM20

Fonte: Autoria própria

De acordo com as figuras 39 e 40, é possível notar que a influência do MTM em ADL apresenta comportamento semelhante ao que foi visto em antenas ADS, também é possível inferir que antenas ADL apresentaram baixa eficiência quando comparadas ADS, apresentando ganho máximo de 2,48 dBi em ADL MTM, entretanto, esse valor de ganho ainda está em concordância com literatura para antenas de baixo perfil, o Quadro 4 compara os dados obtidos nesse estudo com a literatura.

Quadro 4 - Comparativo de dados obtidos com literatura.

Nomenclatura	Frequência de Ressonância (THz)	Ganho (dBi)	Referência
Patch tri-band with (G-TSRR) double faced	3,53	1,93	KHALEEL et al, 2022
NoGNR	2,963	3,722	SOUZA, 2021
Patch graphene	1	5	SEYEDSHARBATY e SADEGHZADEH, 2017
Dual-polarized graphene Patch	2,6	2,8	SHALINI e MADHAN, 2019
ADS	3,205	2,63	Esse estudo
ADS MTM	3,15	3,76	Esse estudo
ADL	3,167	1,62	Esse estudo
ADL MTM	3,15	2,48	Esse estudo

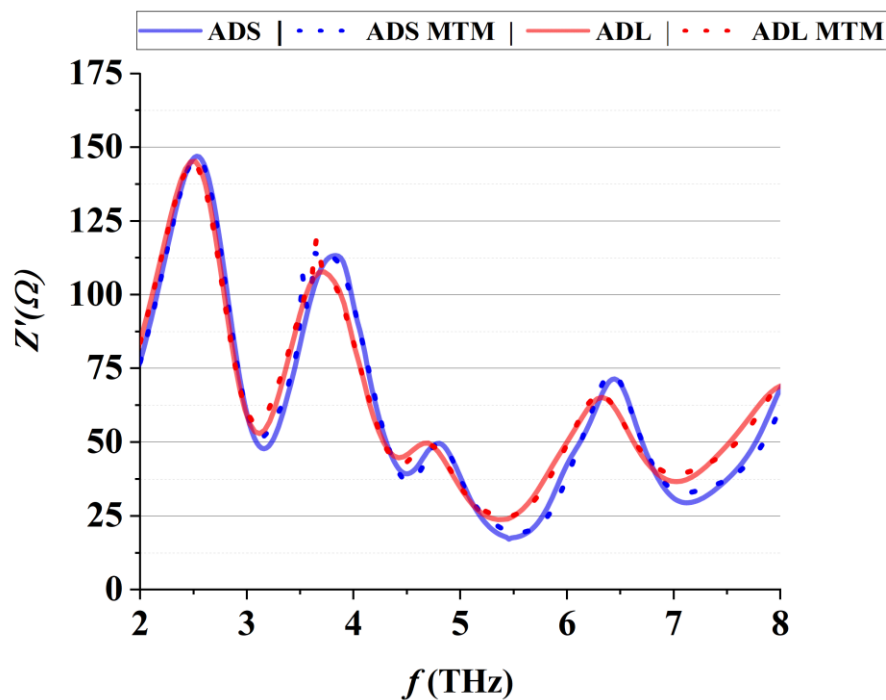
Fonte: Autoria Própria

A razão para menor eficiência no modelo de Drude-Lorentz pode ser decorrente da menor condutividade obtida, como foi visto na figura 21 do capítulo 9; ou decorrente da parte metálica representada pelo termo de Drude na equação de Drude-Lorentz que leva em consideração as perdas do meio devido ao comportamento metálico do material (FUJIWARA, 2007; CHEN et al, 2019).

10.2.4 Casamento de Impedância

A figuras 41 e 42 apresentam a impedância obtida pelas antenas, no qual a figura 41 representa a parte real da impedância e figura 42 a imaginária, sendo que essas partes compõe a resistência e reatância da antena, respectivamente. As figuras apresentam pouca alteração em relação aos modelos, também é possível denotar que o incremento de MTM proveu pequenas alterações no casamento de impedância.

Figura 41 - Resistência das antenas simuladas.

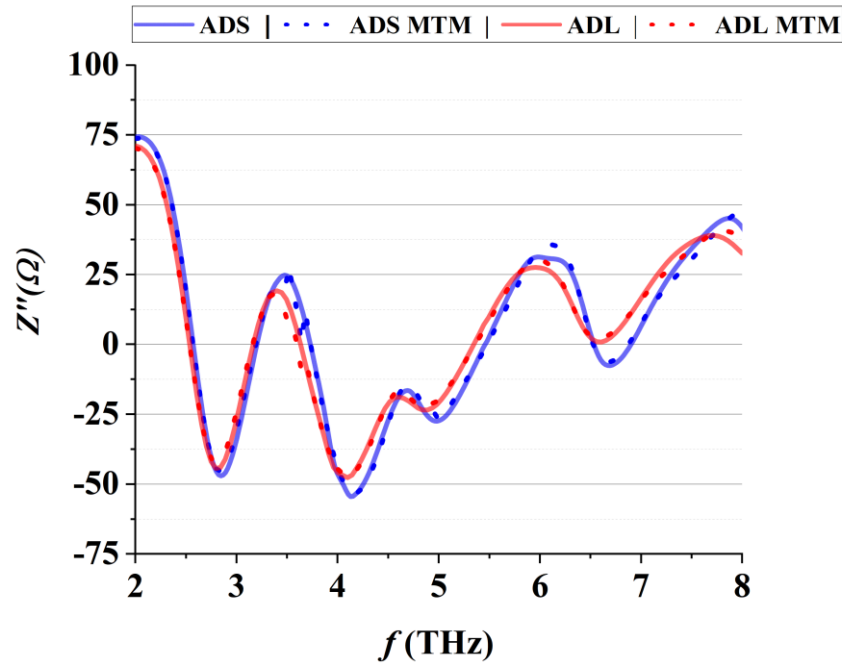


Fonte: Autoria Própria

A antena ADS apresentou melhor casamento de impedância obtendo $z' = 48,702 \Omega$ em 3,205 THz, o casamento de impedância ideal ocorre quando a resistência da antena obtém o mesmo valor da impedância característica aplicada na modelagem e reatância nula $z'' = 0$, nesse estudo a impedância característica utilizada foi de $z_c = 50 \Omega$. Em termos de resistência, as demais frequências apresentaram valores próximos ao ideal, obtendo $z' = 47,745 \Omega$ em

4,712 THz e $z' = 48,881 \Omega$ em 6,715 THz, no entanto, apenas em 3,205 THz que a reatância apresentou o valor mais próximo de zero, obtendo $z'' = 0,712 \Omega$ de Reatância, as demais frequências obtiveram $z'' = -16,643 \Omega$ e $z'' = -7,336 \Omega$, respectivamente, para as frequências de 4,712 THz e 6,715 THz.

Figura 42 - Reatância das antenas simuladas.



Fonte: Autoria Própria

O incremento de MTM diminuiu o casamento de impedância em todas as frequências, essa alteração pode ser visualizada pelas figuras 41 e 42 e pela tabela 5. Entretanto, apesar da alteração, todas as antenas apresentaram bom casamento de impedância para os modos TM10 e TM20, Enquanto que o modo TM02 apresentou maior descasamento de impedância, o que era esperado, decorrente da baixa eficiência apresentado pelos diagramas de radiação nessa faixa, ao qual indicavam perdas nesse modo de operação.

Tabela 5 - Dados de Impedância para antenas ADS.

ADS			ADS MTM		
Frequência	Resistência	Reatância	Frequência	Resistência	Reatância
3,205	48,702	0,712	3,2	53,594	1,502
4,712	47,745	-16,643	4,72	47,147	-14,830
6,715	48,881	-7,336	6,72	48,853	-5,870

Fonte: Autoria Própria

As antenas simuladas com $Ti_3C_2T_x$ modelado por Drude-Lorentz, demonstraram mesmo comportamento, no entanto, o modo TM20 apresentou o melhor casamento de impedância, obtendo $z' = 51,229 \Omega$ e $z'' = 0,8504 \Omega$, as demais frequências obtiveram, $z' = 54,140 \Omega$ e $z' = 48,792 \Omega$ para as frequências de 3,167 THz e 4,607 THz, respectivamente. Os valores de reatância para os modos TM10 e TM02, são de $z'' = 0,414 \Omega$ e $z'' = -18,776 \Omega$. A tabela 6 apresenta os dados de impedância para as antenas de ADL e ADL MTM.

Tabela 6 - Dados de Impedância para antenas ADS.

ADL			ADL MTM		
Frequência (THz)	Resistência (Ω)	Reatância (Ω)	Frequência (THz)	Resistência (Ω)	Reatância (Ω)
3,167	54,140	0,414	3,15	57,564	-1,001
4,607	48,792	-18,776	4,65	48,719	-17,304
6,606	51,229	0,850	6,65	49,195	2,776

Fonte: Autoria Própria

Pela tabela 6, é perceptível que antena ADL MTM no modo TM02, pareceu se beneficiar com a aplicação do MTM, no entanto, a melhoria apresentada não é o suficiente para suprimir as perdas, sendo esse modo não indicado para atuação da antena. Assim como exposto anteriormente, nos modos TM10 e TM20 as antenas apresentaram bom casamento de impedância, apesar das flutuações com a aplicação do MTM.

11 CONCLUSÃO

O presente estudo promove a análise numérica das propriedades óticas do $Ti_3C_2T_x$ para a construção de antenas e metamateriais, para isso, foi elaborado a construção da modelagem numérica baseado em resultados experimentais obtidos na literatura; em razão da precisão apresentada experimentalmente para folhas de 30 nm, foi utilizando dois métodos, Drude-Smith e Drude-Lorentz que obtiveram valores de condutividade em conformidade com exposto na literatura.

Quando aplicado em antenas, os métodos apresentaram boa congruência entre si, exibindo bons resultados para a construção de projetos de antenas e metamateriais.

Os metamateriais foram aplicados localizados na superfície do substrato ao redor do patch ressonador, visando melhorar as propriedades da antena. A resultante foi maior comportamento como meio MNG-ENZ do que *left-handed*, isso é decorrente ao fato de que na base do MTM, por ser aplicado adjunto da antena, contém plano terra ao invés de fitas que seriam responsáveis pelo ϵ_{eff} negativo.

Nas faixas entre 3-4 THz o material apresentou picos positivos e negativos de μ_{eff} , sendo essa a faixa que o meio se comportou como MTM. Os valores de absorbância revelaram maior reflexão na faixa de 3-4 THz e maior absorbância em 6-7 THz, o impacto desses dois comportamentos foram visualizados nas antenas com MTM, sendo que na faixa de maior absorbância foi possível visualizar melhorias na largura de banda para o modelo de Drude-Smith e maior reflexão em 3-4 THz, melhorou a eficiência das antenas em termos de ganho.

De modo geral, as antenas apresentaram comportamento coeso para antenas de baixo perfil no THz gap, foi constatado três modos de operação: TM10, TM02 e TM20, sendo que apenas os modos TM10 e TM20 dispuseram de eficiência para a operação do dispositivo como antena.

As antenas simuladas obtiveram boa largura de banda em todos os modos, sendo que nos modos de operação TM10 e TM20 chegaram a apresentar valores de, respectivamente, 587 GHz e 1516 GHz, representando um total de 18.63% para TM10 e 22.97% em TM20.

A distribuição de campo elétrico E , revelou o comportamento do MTM na superfície da antena e a influência do MTM no aprimoramento da largura de banda no dispositivo. Também foi possível visualizar melhorias em termos de ganho com o emprego de MTM, aspecto favorável, visto que em faixas do THz gap apresentam fortes atenuações, havendo a necessidade de aprimoramento de ganho das antenas.

Por fim, todas as antenas apresentaram bom casamento de impedância nos modos TM10 e TM20, sendo o TM02 demonstrou a presença de perdas e pouco casamento de impedância. Portanto, esse estudo conclui os objetivos propostos de modelar aplicar $\text{Ti}_3\text{C}_2\text{T}_x$ para o desenvolvimento de antenas e metamateriais para atuarem no THz gap.

12 SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

O autor aborda como sugestão para trabalhos futuros:

- Síntese de filmes de $\text{Ti}_3\text{C}_2\text{T}_x$;
- Aplicação de substrato *photonic band gap* (PBG) para prover melhorias na antena;
- Simulações de $\text{Ti}_3\text{C}_2\text{T}_x$ em MTMs com geometrias modernas;
- Construção do protótipo desse projeto.

REFERÊNCIA BIBLIOGRÁFICA

- ALLOUI, Radhoine; ZAIRI, Hassen; MIRA, Fermin; LLAMAS-GARRO, Ignacio; MHATLI, Sofien. **Terahertz antenna based on graphene material for breast tumor detection**. Sensing and Bio-Sensing Research. v.38. p. 100511. 2022. ISSN 2214-1804. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.sbsr.2022.100511>
- ASHCROFT, Neil W; MERMIM, David N. **Solid State Physics**. Orlando: Brooks/Cole, 1976. ISBN-10: 0-03-083993-9
- BALANIS, Constantine A. **Teoria de antenas: análise e síntese**. 3.ed. Tradução: J. R. Souza. Rio de Janeiro: LTC, 2014. v.1
- BALANIS, Constantine A. **Teoria de antenas: análise e síntese**. 3.ed. Tradução: J. R. Souza. Rio de Janeiro: LTC, 2014. v.2
- BLANCHARD, Cédric; GUIZAL, Brahim; FELBACQ, Didier. **Broadband computation of the scattering coefficients of infinite arbitrary cylinders**. Phys. Rev. E. v.86. n.1. 2012. DOI: 10.1103/PhysRevE.86.016711
- BU, Fanxing; ZAGHO, Moustafa M; IBRAHIM, Yasseen; MA, Bing; ELZATAHRY, Ahmed; ZHAO, Dongyuan. **Porous MXenes: Synthesis, structures, and application**. Nano Today. v.30. ISSN 1748-0132. 2020. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.nantod.2019.100803>
- CHASHMI, Jafari M; REZAEI, Pajmen; KIANI, Narges. **Polarization Controlling of Multi Resonant Graphene-Based Microstrip Antenna**. Plasmonics v.15, p.417–426 (2020). <https://doi.org/10.1007/s11468-019-01044-2>
- CHAUDHURI, Krishnakali; ALHABEB, Mohamed; WANG, Zhuoxian; SHALAEV, Vladimir M; GOGOTSI, Yury; BOLTASSEVA, Alexandra. **Highly Broadband Absorber Using Plasmonic Titanium Carbide (MXene)**. ACS Photonics. v.5. n.3. p.1115-1122. 2018 DOI: <https://doi.org/10.1021/acsp Photonics.7b01439>
- CHEN, Shangzhi et al. **On the anomalous optical conductivity dispersion of electrically conducting polymers: ultra-wide spectral range ellipsometry combined with a Drude–Lorentz model**. Journal of Materials Chemistry C. v. 7. n. 15. p.4350-4362, 2019. <http://dx.doi.org/10.1039/C8TC06302H>
- CHEIN, Wei C; MARCUS, Rudolph A. **The Drude-Smith Equation and Related Equations for the Frequency-Dependent Electrical Conductivity of Materials: Insight from a Memory Function Formalism**. ChemPhysChem. v.22. n.16, 2021. DOI <https://doi.org/10.1002/cphc.202100299>
- COCKER, Tyler et al. **Microscopic origin of the Drude-Smith model**. Phys. Rev. B. v.96. n. 20, 2017. DOI 10.1103/PhysRevB.96.205439
- COSTA, Fabrício M; SOUZA, Karlo Q. **Análise pelo Método dos Momentos do Diagrama de Radiação de Dipolos de Grafeno com Diferentes Potenciais Químicos**. XL SIMPÓSIO BRASILEIRO DE TELECOMUNICAÇÕES E PROCESSAMENTO DE SINAIS - SBRT 2022. STA. RITA DO SAPUCAÍ: Instituto Nacional de Telecomunicações – Inatel, 2022

CHASHMI, Jafari M; REZAEI, Pajmen; KIANI, Narges. **Polarization Controlling of Multi Resonant Graphene-Based Microstrip Antenna**. Plasmonics v.15, p.417–426 (2020). <https://doi.org/10.1007/s11468-019-01044-2>

COSTA, Rodrigo C.S. **Estudo experimental e numérico de uma antena ressoadora Dielétrica Baseada em $\text{CaTi}_{1-x}(\text{Nb}_{1/2}\text{Ln}_{1/3})_x\text{O}_3-\delta$ (CNLTO) e $\text{CaTi}_{1-x}(\text{Nb}_{1/2}\text{Ln}_{1/2})_x\text{O}_3$ (Ln = Bi (CNBTO) e Fe (CNFTO)) para aplicações em bluetooth**. Dissertação (mestrado em Engenharia de Teleinformática), Fortaleza: Universidade Federal do Ceará, 2007

CUI, Wei; LI, Lingqiao; XUE, Weiwei; XU, Hui; HE, Zhihui; LIU, Zhimin. **Enhanced absorption for MXene/Au-based metamaterials**. Results in Physics. v.23. ISSN 2211-3797. 2021. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.rinp.2021.104072>

CUNHA, Nilson H.O. **Análise de Células Unitárias Com Metamaterial Utilizando Substratos EBG para Aplicações em Estruturas Planares**. Dissertação (Mestrado em Ciências) - Pós-Graduação em Engenharia Elétrica e de Computação, NATAL: Universidade Federal do Rio Grande do Norte – UFRN, 2020

DILLON, Andrew D; GHIDIU, Michael J; KRICK, Alex L; GRIGGS, Justin; MAY, Steven J; GOGOTSI, Yury; BARSOUM, Michel W; FAFARMAN, Aaron T. **Highly Conductive Optical Quality Solution-Processed Films of 2D Titanium Carbide**. Advanced Functional Materials. v.26. n.13. p.4162-4168. 2016. <https://doi.org/10.1002/adfm.201600357>

DU, Yan et al. **Dielectric Properties of DMSO-Doped-PEDOT:PSS at THz Frequencies**. physica status solidi (b), v.255, n.4, 2018. <https://doi.org/10.1002/pssb.201700547>

EPISKOPOU, Elpida; PAPANTONIS, Stergios; OTTER, William. J; LUCYSZYN, Stepan. **Defining Material Parameters in Commercial EM Solvers for Arbitrary Metal-Based THz Structures**. IEEE Transactions on Terahertz Science and Technology, v. 2, n. 5, p. 513-524, 2012, doi: 10.1109/TTHZ.2012.2208456.

ESMAIL, Bashar A. F; KOZIEL, Slawomir; SZCZEPANSKI, Stanislaw. **Overview of Planar Antenna Loading Metamaterials for Gain Performance Enhancement: The Two Decades of Progress**. IEEE Access, v. 10, p. 27381-27403. 2022. doi: 10.1109/ACCESS.2022.3157634.

FUJIWARA, Hiroyuki. **Spectroscopic Ellipsometry: Principles and Applications**. Chichester: John Wiley & Sons, Ltd, 2007. DOI: 10.1002/9780470060193. ISBN: 9780470016084

GLAVIN, Nicholas R; RAO, Rahul; VARSHNEY, Vikas; BIANCO, Elisabeth; APTE, Amey; ROY, Ajit; RINGE, Emilie; AJAYAN, Pulickel M. **Emerging Applications of Elemental 2D Materials**. Advanced Materials. 2020, v.32, 1904302. <https://doi.org/10.1002/adma.201904302>

GUO, Yan; WANG, Dedong; BAI, Tiantian et al. **Electrostatic self-assembled NiFe₂O₄/Ti₃C₂T_x MXene nanocomposites for efficient electromagnetic wave absorption at ultralow loading level**. Advanced Composites and Hybrid Materials. v.4. n.3. p.602–613. 2021. <https://doi.org/10.1007/s42114-021-00279-0>

HALLIDAY, David; RESNICK, Robert; WALKER, Jearly. **Fundamento de física**. 10.ed. Rio de Janeiro: LTC, 2016. 4.v.

HALIM, Joseph et al. **Synthesis and Characterization of 2D Molybdenum Carbide (MXene)**. *Advanced Functional Materials*. v.26. n.18. p.3118-3127. 2016. <https://doi.org/10.1002/adfm.201505328>

HAN, Meikang; LIU, Yuqiao; RAKHMANOV, Roman et al. **Solution-Processed Ti₃C₂T_x MXene Antennas for Radio-Frequency Communication**. *Advanced Materials*. v.33. 2021. DOI: <https://doi.org/10.1002/adma.202003225>

HANNAH, Joyce J et al. **A review of the electrical properties of semiconductor nanowires: insights gained from terahertz conductivity spectroscopy**. *Semiconductor Science and Technology*. v. 30. n. 10, 2016. DOI: 10.1088/0268-1242/31/10/103003

HART, James L; HANTANASIRISAKUL, Kanit; LANG, Andrew C. et al. **Control of MXenes' electronic Properties through termination and intercalation**. *Nature Communications*. v.10. p.522. 2019. DOI: <https://doi.org/10.1038/s41467-018-08169-8>

HU, Minmin; LI, Zhaojin; HU, Tao; ZHU, Shihao; ZHANG, Chao; WANG, Xiaohui. **High-Capacitance Mechanism for Ti₃C₂T_x MXene by in Situ Electrochemical Raman Spectroscopy Investigation**. *ACS Nano*. v.10. n.12. p.11344-11350. 2016. DOI: 10.1021/acsnano.6b06597

JAKŠIĆ, Zoran; OBRADOV, Marko; TANASKOVIĆ, Dragan et al. **Electromagnetic simulation of MXene-based plasmonic metamaterials with enhanced optical absorption**. *Optical and Quantum Electronics*. v.52. n.2. p.83. 2020. <https://doi.org/10.1007/s11082-020-2227-8>

KHALEEL, Sherif A; HAMAD, Ehab K. I; SALEH, Mohamed B. **High-performance tri-band graphene plasmonic microstrip patch antenna using superstrate double-face metamaterial for THz communications**. *Journal of Electrical Engineering*. v.73. n.4. p.226-236. 2022. DOI: <https://doi.org/10.2478/jee-2022-0031>

KHEZZAR, Djamel; KHEDROUCHE, Djamel; DENIDNI, Tayeb A. **New design of a broadband PBG-based antenna for THz band applications**. *Photonics and Nanostructures - Fundamentals and Applications*. v.46. 2021. ISSN 1569-4410. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.photonics.2021.100947>

KIM, Seon J; KOH, Hyeong-Jun; REN, Chang E; KWON, Ohmin; MALESKI, Kathleen; CHO, Soo-Yeon; ANASORI, Babak; KIM, Choong-Ki; CHOI, Yang-Kyu; KIM, Jihan; GOGOTSI, Yury; JUNG, Hee-Tae. **Metallic Ti₃C₂T_x MXene Gas Sensors with Ultrahigh Signal-to-Noise Ratio**. *ACS Nano*. v.12. n2. p.986-993. 2018. DOI: 10.1021/acsnano.7b07460

KRZYSZTOFIK, Wojciech J; NGHIA, Thanh C. **Metamaterials in Application to Improve Antenna Parameters**. *Metamaterials and Metasurfaces*. 2019. doi: 10.5772/intechopen.80636

KYAMO, Mohamed J. **Infrared Electric Field Enhancement via a Hyperbolic-Metalens Coupled Nanoantenna**. Tese (doutorado em engenharia elétrica) - College of Engineering and Science. Florida: Florida Institute of Technology, 2022.

LEE, Eun S; CHOI, Byeong G. **Calculation Methodologies of Complex Permeability for Various Magnetic Materials**. *Electronics*. v.10. n.17. p.2167, 202. DOI: <https://doi.org/10.3390/electronics10172167>

LI, Guangjiang; KUSHNIR, Kateryna; DONG, Yongchang et al. **Equilibrium and non-equilibrium free carrier dynamics in 2D Ti₃C₂T_x MXenes: THz spectroscopy study**. *2D Materials*. v.5. n.3. 2018. DOI: <https://dx.doi.org/10.1088/2053-1583/aacb9e>

LI, Guangjiang et al. **Dynamical Control over Terahertz Electromagnetic Interference Shielding with 2D Ti₃C₂T_y MXene by Ultrafast Optical Pulses**. *Nano Letters*. v.30. n.1. p.636-643, 2019. DOI 10.1021/acs.nanolett.9b04404

LI, Guangjiang et al. **Terahertz Polarizers Based on 2D Ti₃C₂T_z MXene: Spin Cast from Aqueous Suspensions**. *Advanced Photonics Research*. v.1. n.2, 2020. <https://doi.org/10.1002/adpr.202000084>

LIPATOV, Alexey et al. **Elastic properties of 2D Ti₃C₂T_x MXene monolayers and bilayers**. *Science Advances*. v.4. n.6. 2018. DOI: 10.1126/sciadv.aat0491

LUKATSKAYA, Maria R; KOTA, Sankalp; LIN, Zifeng *et al.* **Ultra-high-rate pseudocapacitive energy storage in two-dimensional transition metal carbides**. *Nature Energy*. v.2. n.8. p.17105. 2017. DOI: <https://doi.org/10.1038/nenergy.2017.105>

MATHIS, Tyler S; MALESKI, Kathleen; GOAD, Adam; SARYCHEVA, Asia et al. **Modified MAX Phase Synthesis for Environmentally Stable and Highly Conductive Ti₃C₂ MXene**. *ACS Nano*. v.15. n.4. p.6420-6429. 2021. DOI: <https://doi.org/10.1021/acsnano.0c08357>

MIRANDA, Igor R.S. **Projeto de Antenas de Microfita para o 5G**. Dissertação (Mestrado em Engenharia Elétrica) - Programa de Pós-Graduação em Engenharia Elétrica, Belém: Universidade Federal do Pará, 2021

NAGUIB, Michael; KURTOGLU, Murat; PRESSER, Volker; LU, Jun; NIU, Junjie; HEON, Min; HULTMAN, Lars; GOGOTSI, Yury; BARSOUM, Michel W. **Two-Dimensional Nanocrystals Produced by Exfoliation of Ti₃AlC₂**. *Advanced Materials*. 2011, v.23: p.4248-4253. <https://doi.org/10.1002/adma.201102306>

ŇĚMEC, Hynek; KUŽEL, Petr; SUNDSTRÖM, Villy. **Far-infrared response of free charge carriers localized in semiconductor nanoparticles**. *Phys. Rev. B*, v.79. n.11, 2009. DOI 10.1103/PhysRevB.79.115309

NUMAN, Ahmad B; SHARAWI, Mohammad S. **Extraction of Material Parameters for Metamaterials Using a Full-Wave Simulator [Education Column]**. *IEEE Antennas and Propagation Magazine*. v. 55. n. 5. p. 202-211. 2013. DOI: 10.1109/MAP.2013.6735515.

PANDEY, Shashank; GUPTA, Barun; CHANANA, Ashish; NAHATA, Ajay. **Non-Drude like behaviour of metals in the terahertz spectral range**. *Advances in Physics: X*. v.1. n.2. p.176-193. 2016. DOI: <https://doi.org/10.1080/23746149.2016.1165079>

POZAR, David M. **Microwave Engineering**. 4.ed. New Jersey: John Wiley & Sons, Inc, 2011. ISBN 978-0-470-63155-3

REN, Chang E; ZHAO, Meng-Qiang; MAKARYAN, Taron; HALIM, Joseph et al. **Porous Two-Dimensional Transition Metal Carbide (MXene) Flakes for High-Performance Li-Ion Storage**. *ChemElectroChem*. v.3. n.5. p.689-693. 2016. ISSN 2196-0216. DOI: <https://doi.org/10.1002/celec.201600059>

RIEH, Jae-Sung. **Introduction to Terahertz Electronics**. Cham: Springer Cham, 2021. ISBN 978-3-030-51842-4

SARYCHEVA, Asia; POLEMI, Alessia; LIU, Yuqiao et al. **2D titanium carbide (MXene) for wireless communication**. *Science Advances*. v.4. n.9. 2018. DOI: <https://doi.org/10.1126/sciadv.aau0920>

SEBASTIAN, Mailadil T; UBIC, Rick; JANTUNEN, Heli. **Microwave Materials and Applications**. Chichester, UK ; Hoboken, NJ : John Wiley & Sons, 2017. v.1

SEYEDSHARBATY, Mir M; SADEGHZADEH, Ramazan A. **Antenna gain enhancement by using metamaterial radome at THz band with reconfigurable characteristics based on graphene load**. *Optical and Quantum Electronics*. v.49. n.6. p.221. 2017. DOI: <https://doi.org/10.1007/s11082-017-1052-1>

SHALINI, M; MADHAN, Ganesh M. **Design and analysis of a dual-polarized graphene based microstrip patch antenna for terahertz applications**. *Optik*. v.194. p. 163050. 2019. ISSN 0030-4026. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ijleo.2019.163050>

SOUZA, Fiterlinger M. **NANOFITAS DE GRAFENO COM BORDAS ARMCHAIR E ZIGZAG APLICADAS A ANTENAS COM SUBSTRATO PBG NA BANDA THz**. Tese (Doutorado em Engenharia Elétrica na área de Telecomunicações) - Programa de Pós-Graduação em Engenharia Elétrica, Belém: Universidade Federal do Pará - UFPA, 2021.

SOUZA, Francisco. A. A. C; SIQUEIRA, Antonio. L. P; GOMES NETO, Alfredo; SERRES, Alexandre. J. R; ALBUQUERQUE, Camila. C. R. **Higher Order Mode Attenuation in Microstrip Patch Antenna with DGS H Filter Specification from 5 to 10 GHz Range**. *Journal of Microwaves, Optoelectronics and Electromagnetic Applications*. v.19. 2020. ISSN 2179-1074. DOI: <https://doi.org/10.1590/2179-10742020v19i2823>

TUKMAKOVA, Anastasiia S; ASACH, Alexei, V; NOVOTELNOVA, Anna V; TKHORZHEVSKIY Ivan L; KABLUKOVA, Natallya S; DEMCHENKO, Petr S; ZAITSEV, Anton D; KHODZITSKY, Mikhail K. **FEM Simulation of THz Detector Based on Sb and Bi88Sb12 Thermoelectric Thin Films**. *Applied Sciences*. v.10. n. 6. 2020. DOI: <https://doi.org/10.3390/app10061929>

URBANKOWSKI, Patrick; ANASORI, Babak; MAKARYAN, Taron; ER, Dequan et al. **Synthesis of two-dimensional titanium nitride Ti₄N₃ (MXene)**. *Nanoscale*. v.8. n.22. p.11385-11391. 2016. ISSN 2040-3364. DOI: <http://dx.doi.org/10.1039/C6NR02253G>

VARSHNEY, Gaurav; GOTRA, Shailza; PANDEY, V.S; YADUVANSHI, R.S. **Proximity-coupled two-port multi-input-multi-output graphene antenna with pattern diversity for THz applications**. *Nano Communication Networks*. v.21. p. 100246. 2019. ISSN 1878-7789. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.nancom.2019.05.003>

VESELAGO, Viktor G. **THE ELECTRODYNAMICS OF SUBSTANCES WITH SIMULTANEOUSLY NEGATIVE VALUES OF ϵ AND μ** . *SOVIET PHYSICS USPEKHI*. v.10. n. 4. 1968. DOI: 10.1070/PU1968v010n04ABEH003699

VIJAYALAKSHMI, K; SELVI, C.S.Kanimozhi; SAPNA, Baskaran. **Novel tri-band series fed microstrip antenna array for THz MIMO communications**. *Optical and Quantum Electronics*. v.53. n.7. p.395. 2021. DOI: <https://doi.org/10.1007/s11082-021-03065-w>

VISHWANATH; SAHANA, Bikash C; VARSHNEY, Gaurav. **Tunable terahertz dual-band circularly polarized dielectric resonator antenna**. *Optik*. v.253. p. 168578. 2022. ISSN 0030-4026. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ijleo.2022.168578>

WALSER, Rodger M. **Electromagnetic metamaterials**. *Proc. SPIE*. v.4467. Complex Mediums II: Beyond Linear Isotropic Dielectrics. 2001. DOI: <https://doi.org/10.1117/12.432921>

WYATT, Brian C; NEMANI, Srinivasa K; ANASORI, Babak. **2D transition metal carbides (MXenes) in metal and ceramic matrix composites**. *Nano Convergence*. v.8. n.16. 2021. <https://doi.org/10.1186/s40580-021-00266-7>

ZANG, Xiaobei et al. **Enhancing Capacitance Performance of Ti₃C₂T_x MXene as Electrode Materials of Supercapacitor: From Controlled Preparation to Composite Structure Construction**. *Nano-Micro Letters*. v.12. n.77. 2020. <https://doi.org/10.1007/s40820-020-0415-5>

ZHAN, Cheng; SUN, Weiwei; XIE, Yu; JIANG, De-en; KENT, Paul R. C. **Computational Discovery and Design of MXenes for Energy Applications: Status, Successes, and Opportunities**. *ACS Applied Materials & Interfaces*. v.11. n.28. p.24885-24905. 2019. DOI: 10.1021/acsami.9b00439

ZOU, Longfang. **Dielectric Resonator Antennas: From Multifunction Microwave Devices to Optical Nano-antennas**. Tese (Doutorado em engenharia elétrica). Adelaide: The University of Adelaide, 2013.

ZOU, Qi et al. **MXene-based ultra-thin film for terahertz radiation shielding**. *Nanotechnology*. v.30. n.50. 2020. DOI 10.1088/1361-6528/abb6a7

APÊNDICE A-CÓDIGO PARA PROJETAR AS DIMENSÕES DA ANTENA DE PLAQUETA

```
close all
clear all
clc

% código de antena patch BALANIS
```

Base de dados

```
f=3; % em THz
f_Hz=f*1e12; % em Hz
es=3.75; % permitividade do substrato
c=299792458; % Velocidade da luz em m/s
%hs=input('Coloque a altura do substrato em um'); % em micrometros
hs=2; % tá em um
hs_metros=hs.*1e-6; % metros
lambda=c/f_Hz;
```

Equações da antena patch

```
format long

W=(c./(2.*f_Hz)).*sqrt(2./(es+1)); % Largura (Width) do patch
es_eff=((es+1)./2)+(((es-1)./2)*(sqrt(1./(1+((12*hs_metros)/W))))); % Para W>1
Delta_L=hs_metros*0.412*(((es_eff+0.3).*(W/hs_metros)+0.264))./(es_eff-
0.258).*((W/hs_metros)+0.8));
Leff=(c./(2.*f_Hz.*sqrt(es_eff)));%-(2.*Delta_L); % metros
L=Leff-2*Delta_L;
```

Equação da microfita

```
format long

wph1=linspace(0.1,1);
zc=(60*(log((8*(1./wph1))+((1/4).*wph1)))/sqrt(es_eff));
wph2=linspace(1,6);
zcp=(wph2+1.393+(0.667.*(log(wph2+1.444))));
zc2=(120*pi)./((sqrt(es_eff)).*zcp);
%plot(wph1,zc,'b',wph2,zc2,'r')
disp('tabela'),      disp('razão wo/p          Zo impedancia característica')
disp([wph1', zcp'])
disp('a mudança dessa duas tabelas se deve a mudança da equação caso 1> ou < do que
wo/h')
disp('tabela'),      disp('razão wo/p          Zo impedancia característica')
disp([wph2', zc2'])

subplot(1,1,1)

plot(wph1,zc,'b',wph2,zc2,'r')
title('Razão wo/h em função de Zo')
xlabel('wo/h')
ylabel('Impedância característica Zo')
grid

wph=input("coloque a razão wo/h: ");
wo=wph*hs_metros;
%wo=wo; % em metros

lambda_g = lambda/(sqrt(es_eff));
```

```
fL = lambda_g/4; % metros
```

Dimensões da antena patch

```
disp(['Altura do substrato: ',num2str(hs_metros*1e6),' um'])  
disp(['Comprimento da microfita (Lf): ',num2str(fL*1e6),' um'])  
disp(['Largura da microfita (Wo): ',num2str(wo*1e6),' um'])  
disp(['Comprimento do Patch (L): ',num2str(L*1e6),' um'])  
disp(['Largura do Patch (W): ',num2str(W*1e6),' um'])  
disp(['Inset:',num2str(inset*(1e6)), ' um']);  
disp(['Inset Gap:',num2str(g*(1e6)), ' um']);
```

APÊNDICE B-CÓDIGO PARA A TABULAÇÃO DE DADOS DAS PROPRIEDADES DO Tl_3C_2Tx .

```
Clc
clear all
close all
```

Modelo de Drude-Lorentz

```
% Constantes

%wavelength=[30000:100:3000000]; % em nm (aplicado para THz gap)
wavelength=[250:1:2500]; % em nm (aplicado para Visível)
c_const=299792458; %m/s (Velocidade da Luz)
epsilon_0=8.85e-12; % em F/m (Permitividade de ar)
fr=c_const./(wavelength*1e-9); %frequencia em Hz
w=2.*pi.*fr; %frequencia angular em rad/s
wp=4.21e15; %frequência de plasma em rad/s por JAKŠIĆ et al, 2020
wo=2.3e15; % frequencia polar em rad/s por JAKŠIĆ et al, 2020
gamma_y=8.65e14; %damping time em rad/s por JAKŠIĆ et al, 2020
e1=8;
%e1=9.7; %epsilon infinito por zoran, 2019
e2=0.35; %lorentz oscillator
e3=0.2; %lorentz oscillator

% por CHAUDHURI et al, 2018
ev_hz=2.417990504024e+14; % conversão de 1 eV para Hz, em Hz
e1c=7.501;
e2c=0.4;
e3c=190;
e3c=0.2;
%e3c=190.97;
wp2c=3.9; % em eV
%wp2c=3.5;
wp2=wp2c*ev_hz*2*pi;
%gamma_pc=0.33;
gamma_pc=0.298; % em eV
%gamma_p=gamma_pc*ev_hz*2*pi;
gamma_p=gamma_pc*ev_hz*2*pi;
w2c=1.549; %frequência polar por CHAUDHURI et al, 2018 para folhas de 400 nm em eV
w2=w2c*ev_hz*2*pi; % em rad/s
gamma_y2c=0.74; % gamma y para w2 por CHAUDHURI et al, 2018 para folhas de 400 nm em eV
gamma_y2=gamma_y2c*ev_hz*2*pi; % em rad/s
w3c=5.362; % em eV
w3=w3c*ev_hz*2*pi; % em rad/s
gamma_y3c=4.79;
gamma_y3=gamma_y3c*ev_hz*2*pi; % em rad/s
```

Função

real e imaginary drude model por JAKŠIĆ et al, 2020

```
% Real
e1z=6;
e2z=3;
e3z=0.2;

Re_drude=e1z-((wp./w).^2);

% Imaginary
```

```
r_imagdp1=(wp.^2).*gamma_y;
r_imagdp2=w.*((w.^2)+(gamma_y.^2));
Imag_drude=e2z+(r_imagdp1./r_imagdp2);
```

modelo de lorentz JAKŠIĆ et al, 2020

```
% real
re_Lorentz_numerador=(wo.^2)-(w.^2);
re_Lorentz_denominador=(re_Lorentz_numerador.^2)+(gamma_y.^2).*(w.^2);
Re_lorentz=e3z.*(1+((wp.^2).*re_Lorentz_numerador)./re_Lorentz_denominador));

% imaginário
imag_Lorentz_numerador=(wo.^2).*gamma_y.*w;
imag_Lorentz_denominador=(re_Lorentz_numerador.^2)+((gamma_y.^2).*(w.^2));
Imag_lorentz=(e3z.*imag_Lorentz_numerador)./imag_Lorentz_denominador;

permittivity=Re_drude+Re_lorentz+Imag_drude*i+Imag_lorentz*i;
```

30 nm - Esse estudo

```
d_model30=e1+((wp2.^2)./(-(w.^2)-i*gamma_p.*w))+(e2*(wp2.^2)./((w2.^2)-(w.^2)-i*gamma_y2.*w))+((wp.^2)./((w3.^2)-(w.^2)-i*gamma_y3.*w));
```

400 nm - Esse estudo

```
d_model400=e1c+((wp2.^2)./(-(w.^2)-i*gamma_p.*w))+(e2c.*(wp2.^2)./((w2.^2)-(w.^2)-i*gamma_y2.*w))+((e3c.*(wp2.^2)./((w3.^2)-(w.^2)-i*gamma_y3.*w)));
```

Condutividade drude-smith

```
F=96485.33212; % C.mol^-1 Constante de Faraday
Av=6.02214076e23; % em mol^-1 é número de avogrado
e=F/Av; % Em C é a Carga elemental
c1=-0.75; % parâmetro fenomenológico
Tds=2*pi/gamma_p; % scattering time
sigma0=epsilon_0*((wp2)^2)*Tds; % S/m
ds2=1+c1./(1-i*w.*Tds);
sigma=(sigma0./(1-i*w.*Tds)).*ds2; % em S/m condutividade

sigma_dl=-epsilon_0.*w*i.*(d_model400-e1c); % Utiliza os dados do modelo de Drude Lorentz
```

permitividade Drude-Smith

```
schmith=1+(c1./(1-Tds.*w*i));

%schmith=1+((c*gamma_y1./(gamma_y1-i*w)));
drude=(Tds.*(wp2.^2))./((Tds.*w.^2)+w*i);
DS=1-(((Tds.*(wp2.^2))./((Tds.*w.^2)+w*i)).*(1+(c1./(1-Tds.*w*i))));
```

Gráficos para análise

```
% Permittividade real
subplot(3,2,1)
%plot(fr*1e-12,real(d_model),'_-',fr*1e-12,real(DS),'r')
plot(wavelength,real(d_model400),'_-',wavelength,real(DS),'r')
```

```

%plot(wavelength,real(d_model),'b', 'LineWidth',2)
%plot(fr*1e-12,real(d_model),'b', 'LineWidth',2)
title('Permitividade')
xlabel('comprimento de onda (nm)')
ylabel('\epsilon')
grid
legend('Drude lorentz','Drude-Smith')
%ylim([10 -40])
%xlim([freq_i freq_f])

% Permitividade imaginário
subplot(3,2,2)
%plot(fr*1e-12,imag(d_model),'_',fr*1e-12,imag(DS),'r')
plot(wavelength,imag(d_model400),'_',wavelength,imag(DS),'r')
%plot(wavelength,imag(d_model),'b', 'LineWidth',2)
%plot(fr*1e-12,imag(d_model),'b', 'LineWidth',2)
title('Permitividade')
xlabel('comprimento de onda (nm)')
ylabel('\epsilon")')
grid
legend('Drude lorentz','Drude-Smith')

% condutividade real
subplot(3,2,3)
%plot(fr*1e-12,real(sigma)*1e-2,'_',fr*1e-12,real(sigma_dl)*1e-2,'r')
plot(wavelength,real(sigma)*1e-2,'_',wavelength,real(sigma_dl)*1e-2,'r')
title('condutividade real')
xlabel('\lambda (nm)')
%xlabel('frequência (THz)')
ylabel('\sigma')
grid
legend('Drude-Smith','Drude-lorentz')

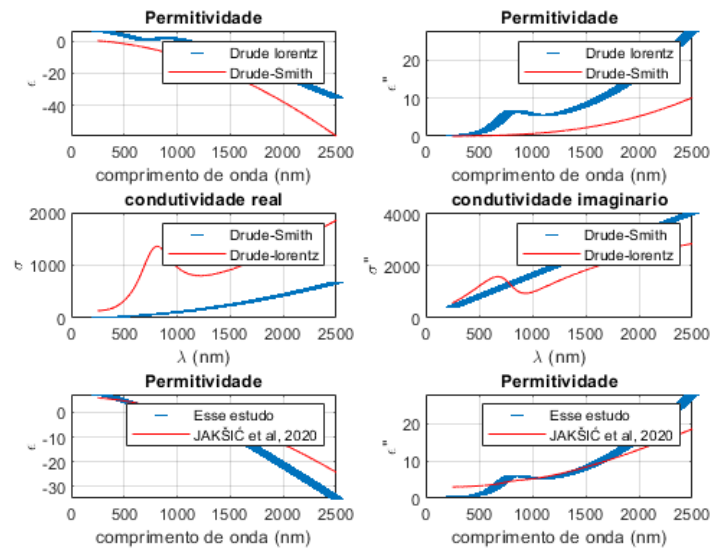
% condutividade imaginária
subplot(3,2,4)
%plot(fr*1e-12,imag(sigma)*1e-2,'_',fr*1e-12,imag(sigma_dl)*1e-2,'r')
plot(wavelength,imag(sigma)*1e-2,'_',wavelength,imag(sigma_dl)*1e-2,'r')
title('condutividade imaginario')
xlabel('\lambda (nm)')
%xlabel('frequência (THz)')
ylabel('\sigma")')
grid
legend('Drude-Smith','Drude-lorentz')

% Permitividade desse estudo | JAKŠIĆ et al, 2020

% Permitividade real
subplot(3,2,5)
%plot(fr*1e-12,real(d_model),'_',fr*1e-12,real(DS),'r')
plot(wavelength,real(d_model30),'_',wavelength,real(permittivity),'r')
title('Permitividade')
xlabel('comprimento de onda (nm)')
ylabel('\epsilon')
grid
legend('Esse estudo','JAKŠIĆ et al, 2020')

% Permitividade imaginário
subplot(3,2,6)
%plot(fr*1e-12,imag(d_model),'_',fr*1e-12,imag(DS),'r')
plot(wavelength,imag(d_model30),'_',wavelength,imag(permittivity),'r')
title('Permitividade')
xlabel('comprimento de onda (nm)')
ylabel('\epsilon")')
grid
legend('Esse estudo','JAKŠIĆ et al, 2020')

```



Extração de dados

```

% dados separados para a extração direta para o software COMSOL
% multiphysics

% Permittividade Real comsol em THz

format long
XY=[fr*1e-12; real(d_model400) ]';
%XY=[wavelength; real(d_model) ]';
XY=double(XY);
tab_XY_array=array2table(XY,'variablenames',{'X','Y'});
writetable(tab_XY_array,'C:\Users\ Sua Localização
\DL_Real_permittivity_Mxene_Titanium_Carbide_THz.txt','filetype','text','delimiter',
' ')

% Permittividade Imaginário comsol em THz

format long
XY=[fr*1e-12; imag(d_model400) ]';
%XY=[wavelength; imag(d_model) ]';
XY=double(XY);
tab_XY_array=array2table(XY,'variablenames',{'X','Y'});
writetable(tab_XY_array,'C:\Users\ Sua Localização
\DL_Imaginario_permittivity_Mxene_Titanium_Carbide_THz.txt','filetype','text','delim
iter','\t')

% Extração de dados para análise em softwares de controle de dados e
% gráficos

% Permittividade complexa meu modelo

format long
%XY=[fr*1e-12; real(d_model); imag(d_model) ]';
XY=[wavelength; real(d_model400); imag(d_model400) ]';
XY=double(XY);
tab_XY_array=array2table(XY,'variablenames',{'X','Y','Z'});
writetable(tab_XY_array,'C:\Users\ Sua Localização
\Esse_estudo_400nm_chiadhuri2018.txt','filetype','text','delimiter','\t')

```

```

% Condutividade complexa em THz Drude-Lorentz

%format long
XY=[fr*1e-12; real(sigma_dl)*1e-2; imag(sigma_dl)*1e-2 ]';
XY=double(XY);
tab_XY_array=array2table(XY,'variablenames',{'X','Y','Z'});
writetable(tab_XY_array,'C:\Users\ Sua Localização
\ D_model_condutividade_400_nm.txt','filetype','text','delimiter','\t')

% Condutividade complexa em THz por Drude-Smith

format long
XY=[fr*1e-12; real(sigma)*1e-2; imag(sigma)*1e-2 ]';
XY=double(XY);
tab_XY_array=array2table(XY,'variablenames',{'X','Y','Z'});
writetable(tab_XY_array,'C:\Users\ Sua Localização
\ DS_condutividade_400nm.txt','filetype','text','delimiter','\t')

% Extração de dados para COMSOL Multiphysics
% apenas alterar a variável para a extração por modelo

% Condutividade complexa Real em THz

format long
XY=[fr*1e-12; real(sigma_dl) ]';
XY=double(XY);
tab_XY_array=array2table(XY,'variablenames',{'X','Y'});
writetable(tab_XY_array,'C:\Users\ Sua Localização
\ DL_Real_condutividade.txt','filetype','text','delimiter',' ')

% Condutividade complexa Imaginario em THz

format long
XY=[fr*1e-12; imag(sigma_dl) ]';
XY=double(XY);
tab_XY_array=array2table(XY,'variablenames',{'X','Y'});
writetable(tab_XY_array,'C:\Users\ Sua Localização
\ DL_Imaginario_condutividade.txt','filetype','text','delimiter',' ')

```

APÊNDICE C-CÓDIGO PARA ANALISAR AS PROPRIEDADES DE METAMATERIAL SRR

```
Clc
clear all
close all
```

código para calcular dados extraídos

**Dados de frequência S11 (não complexo), S21 (não complexo)
e número de ondas (K0)**

```
format long
date='C:\Users\ Sua Localização \S11, S21 e k0 DS mod.txt';
dados=readtable(date); dados=dados{:, :}; % Os dados estarão organizados na seguinte
ordem Freq, S11, S21 e K0

freq=dados(:,1); S11abs=dados(:,2); S21=dados(:,3); K0=dados(:,4);
```

Dados permitividade e permeabilidade eff e uff do COMSOL

```
format long
absdate='C:\Users\ Sua Localização \eff uff ds mod.txt';
absd=readtable(absdate); effabs=absd(:,2); uffabs=absd(:,3);
```

Dados para S11 e S21 complexos

```
complexs11='C:\Users\ Sua Localização \S11 Complex DS mod.txt';
s11d=readtable(complexs11); s11d=s11d{:, :};
complexs21='C:\Users\ Sua Localização \S21 Complex DS mod.txt';
s21d=readtable(complexs21); s21d=s21d{:, :};
S11=s11d(:,2)-i*s11d(:,3); S21=s21d(:,2)-i*s21d(:,3); %
```

Algumas constantes e testes do modelo

```
c=299792458; % m/s
k0=(2.*pi/c).*(freq*1e12);
```

Comprimento da célula

```
dum=17.5; %isso tá em um
d=dum*1e-6; % agora em m
```

Equações que governam o modelo

```
Z=sqrt(((1+S11).^2)-S21.^2)/(((1-S11).^2)-S21.^2);
ep2=(Z-1)/(Z+1);
eink0d=S21/(1-(S11.*ep2));
n=(1/(K0.*d)).*(imag(log(eink0d))-i*(real(log(eink0d))));
eff=n./Z; u=n.*Z;
```

Gráficos

```

subplot(2,2,1)

plot(freq, eff, 'b', freq, u, 'r')
title('Permitividade e permeabilidade (REAL)')
xlabel('Frequência (THz)')
ylabel('\epsilon e \mu')
grid
xlim([1 10])

subplot(2,2,2)
plot(freq, real(n), 'b', freq, imag(n), 'r')
title('Índice de Refração')
xlabel('Frequência (THz)')
ylabel('\eta')
grid
xlim([1 10])

subplot(2,2,3)
plot(freq, real(Z), 'b', freq, imag(Z), 'r')
title('Impedância')
xlabel('Frequência (THz)')
ylabel('\zeta_{eff}')
grid
xlim([1 10])

```

