



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

**DESENVOLVIMENTO DE UM ALGORITMO  
COMPUTACIONAL MoM 3D APLICADO EM  
NANOPLASMÔNICA**

NADSON WELKSON PEREIRA DE SOUZA

DM 21/2012

UFPA/ITEC/PPGEE  
Campus Universitário do Guamá  
Belém-Pará-Brasil

2012

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

NADSON WELKSON PEREIRA DE SOUZA

**DESENVOLVIMENTO DE UM ALGORITMO  
COMPUTACIONAL MoM 3D APLICADO EM  
NANOPLASMÔNICA**

Dissertação submetida à banca examinadora do Programa de Pós Graduação em Engenharia Elétrica da UFPA, como parte dos requisitos para obtenção do Título de Mestre em Engenharia Elétrica.

Área de Concentração: Telecomunicações.

**Orientador: Prof. Dr. Karlo Queiroz da Costa**

UFPA/ITEC/PPGEE  
Campus Universitário do Guamá  
Belém-Pará-Brasil

2012

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

**DESENVOLVIMENTO DE UM ALGORITMO COMPUTACIONAL MoM 3D  
APLICADO EM NANOPLASMÔNICA**

NADSON WELKSON PEREIRA DE SOUZA

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO SUBMETIDA À AVALIAÇÃO DA BANCA EXAMINADORA, APROVADA PELO COLEGIADO DO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA ELÉTRICA DA UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARÁ E JULGADA ADEQUADA PARA OBTENÇÃO DO TÍTULO DE MESTRE EM ENGENHARIA ELÉTRICA NA ÁREA DE TELECOMUNICAÇÕES.

APROVADA EM 13/12/2012

BANCA EXAMINADORA

---

**Prof. Dr. Karlo Queiroz da Costa (Orientador UFPA)**

---

**Prof. Dr. Victor Dmitriev (Membro UFPA)**

---

**Prof. Dr. Rodrigo Melo e Silva de Oliveira (Membro UFPA)**

**VISTO:**

---

**Prof. Dr. Evaldo Gonçalves Pelaes  
(COORDENADOR DO PPGEE/ITEC/UFPA)  
UFPA/ITEC/PPGEE**

Aos meus pais Natal e Antonia.

A minha querida esposa Jéssica.

Ao meu querido filho Lucas.

A minhas irmãs Meiry e Wcailânia.

## **AGRADECIMENTOS**

A Deus Pai, Filho e Espírito, pelo arrependimento, vida e salvação.

A sociedade que sustenta a possibilidade do ensino público gratuito e de qualidade.

A Universidade Federal do Pará, responsável por grande parte do desenvolvimento do Estado.

Ao Laboratório de Nanoeletrônica e Nanofotônica da UFPA.

A minha família, especialmente a meu pai Natal Varão de Souza e minha mãe Antonia Pereira de Souza e as minhas irmãs Meiry Jone de Jesus Pereira de Souza e Wcaylânia Pereira de Souza, e também a meus sobrinhos e cunhados.

A minha esposa Jéssica da Silva Ribeiro e meu filho Lucas Ribeiro de Souza.

Aos Professores Dr. Karlo Queiroz da Costa e Dr. Victor Dmitriev.

Ao Professor Rodrigo Melo e Silva de Oliveira pelo apoio.

Aos colegas de laboratório Thaís Thavares e Neto.

Ao Sr. Dick Horn, programador aposentado.

Aos familiares Gildeilson, sua esposa Patrícia e sua família.

A amiga Sra. Francisca e família.

Aos colegas de trabalho do INSS.

Meu muito obrigado.

“Se todas as coisas nos reduzem a zero, é daí do zero, que temos que partir”.

Waly Salomão

# SUMÁRIO

<b>1. INTRODUÇÃO.....</b>	<b>1</b>
1.1. Introdução.....	1
1.2. Técnicas Numéricas.....	2
1.3. Objetivos.....	3
1.4. Estrutura do Trabalho.....	3
<b>2. DESENVOLVIMENTO TEÓRICO.....</b>	<b>4</b>
2.1. Ressonância Plasmônica.....	4
2.2. Descrição do Problema.....	6
2.3. Modelo de Lorentz-Drude.....	7
2.4. Equação Integral do Campo Elétrico.....	9
2.5. Solução Numérica pelo Método dos Momentos .....	12
<b>3. RESULTADOS.....</b>	<b>15</b>
3.1. Descrição do Algoritmo.....	15
3.2. Geometria das Nanopartículas.....	17
3.3. Resultados da Nanoesfera.....	18
3.4. Resultados da Nanobarra.....	21
<b>4. CONCLUSÕES.....</b>	<b>25</b>
<b>REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....</b>	<b>26</b>
<b>APÊNDICE I.....</b>	<b>28</b>

1.1. Equação de Onda para o Campo Elétrico.....	28
<b>APÊNDICE II.....</b>	<b>30</b>
1.1. Formulação Geral da Função de Green.....	30
<b>APÊNDICE III.....</b>	<b>33</b>
1.1. O Algoritmo em Linguagem C.....	33
1.2. Caso da Nanobarra.....	33
1.3. Caso da Nanoesfera.....	42



## LISTA DE FIGURAS

Fig. 2.1	Representação esquemática de ressonância plasmônica.....	4
Fig. 2.2	(a) Características elétricas do modelo de estrutura a ser analisada. (b) problema equivalente.....	6
Fig. 2.3	Partes real e imaginária da permissividade relativa com um termo interbanda	9
Fig. 2.4	Sistema cartesiano com ponto de campo e ponto de fonte.....	11
Fig. 3.1	Diagrama funcional do Algoritmo.....	16
Fig. 3.2	Geometrias para análise do problema de espalhamento eletromagnético analisado (a) Primeiro problema: nanoesfera isolada. (b) Segundo problema: nanobarra retangular isolada.....	17
Fig.3.3	Distribuição de campo elétrico próximo normalizado para $\lambda=550\text{nm}$ ao longo do eixo $x$ para nanoesfera de ouro com raio $a=60\text{ nm}$ .....	19
Fig.3.4	Distribuição de campo próximo normalizado para $\lambda=550\text{nm}$ ao longo do eixo $y$ para nanoesfera de ouro com raio $a=60\text{ nm}$ .....	19
Fig.3.5	Distribuição de campo próximo normalizado para $\lambda=550\text{nm}$ ao longo do eixo $z$ para nanoesfera de ouro com raio $a=60\text{ nm}$ .....	20
Fig.3.6	Resposta espectral do campo elétrico normalizado (componente $x$ ) próximo a nanoesfera em diferentes pontos ao longo do eixo $x$ ( $x=a+d$ , $y=0$ , $z=0$ ), onde $a=60\text{nm}$ , $d=20, 40, 80$ , e $160\text{nm}$ .....	21
Fig. 3.7	Resposta espectral do campo elétrico próximo e normalizado (componente $x$ ) em diferentes pontos do eixo $x$ , nos pontos ( $x=L/2+d$ , $y=0$ , $z=0$ ) com $L = 60\text{nm}$ , $w = 10\text{nm}$ , $d = 5$ , e $20\text{nm}$ .....	22
Fig. 3.8	Resposta espectral do campo elétrico próximo e normalizado no meio da nanobarra nos pontos ( $x=0$ , $y=0$ , $z= w/2+d$ ) com $L = 60\text{nm}$ , $w = 10\text{nm}$ , e $d = 5\text{nm}$ .....	23
Fig. 3.9	Resposta espectral do campo elétrico próximo e normalizado no meio da nanobarra nos pontos ( $x=0$ , $y=0$ , $z= w/2+d$ ) com $L = 60\text{nm}$ , $w = 10\text{nm}$ , e $d = 10\text{nm}$ .....	23
Fig. 3.10	Resposta espectral do campo elétrico próximo e normalizado no meio da nano barra nos pontos ( $x=0$ , $y=0$ , $z= w/2+d$ ) com $L = 60\text{nm}$ , $w = 10\text{nm}$ , e $d = 20\text{nm}$ .....	24

## LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

$\bar{r}$	Vetor posição
$\bar{E}(\bar{r})$	Campo elétrico total (V/m)
$\bar{E}^i(\bar{r})$	Campo elétrico incidente (V/m)
$\bar{E}^s(\bar{r})$	Campo elétrico espalhado
$\bar{H}(\bar{r})$	Campo magnético total (A/m)
$\bar{H}^i(\bar{r})$	Campo magnético incidente
$\bar{H}^s(\bar{r})$	Campo magnético espalhado
$\bar{D}(\bar{r})$	Densidade de fluxo elétrico em (C/m <sup>2</sup> )
$\bar{B}(\bar{r})$	Densidade de fluxo magnético (Wb/m <sup>2</sup> )
$\bar{A}(\bar{r})$	Vetor potencial magnético
$\bar{J}$	Densidade de corrente elétrica de condução (A/m <sup>2</sup> )
$\bar{J}_{eq}(\bar{r})$	Densidade de corrente elétrica de polarização equivalente
$\tau(\bar{r})$	Simplificação para a densidade de corrente de polarização
$\bar{G}(\bar{r}, \bar{r}')$	Função de Green diádica do espaço livre
$\bar{I}$	Díade unitária
$\bar{\delta}(\bar{r}, \bar{r}')$	Função delta de Dirac
$k$	Vetor número de onda
$\mu$	Permeabilidade magnética do meio (H/m)
$\mu_0$	Permeabilidade magnética do vácuo (H/m)
$\mu_r$	Permeabilidade magnética relativa (H/m)
$\varepsilon$	Permissividade elétrica do meio (Farad/m)
$\varepsilon_0$	Permissividade elétrica do vácuo (Farad/m)
$\varepsilon_r$	Permissividade relativa
$\varepsilon_{Re}(\omega)$	Parte real de permissividade elétrica
$\varepsilon_{Im}(\omega)$	Parte imaginária de permissividade elétrica
$\varepsilon_\infty$	Permissividade relativa a frequência infinita
$\omega_p$	Frequência de plasma

$\omega$	Frequência angular
$\lambda$	Comprimento de onda
$\Gamma$	Frequência de colisão dos elétrons livres
$\gamma$	Frequência de colisão dos elétrons livres com características de ressonância do termo de interbanda dos elétrons ligados
$x, y, z$	Coordenadas do sistema Cartesiano
$dx, dy, dz$	Discretização espacial em $x, y, z$
$\nabla \times$	Operador rotacional
$\ell$	Operador diferencial linear
$\bar{f}$	Função conhecida no ponto de fonte
$\bar{h}$	Função desconhecida no ponto de campo
$L$	Comprimento da nanobarra
$D$	Diâmetro da nanoesfera
$a$	Raio da nanoesfera
$V_{obj}$	Volume do objeto
$k_0$	Constante de fase
$c$	Velocidade da luz no vácuo
$j$	Unidade imaginária

## **RESUMO**

Este trabalho apresenta o desenvolvimento de um algoritmo computacional para análise do espalhamento eletromagnético de nanoestruturas plasmônicas isoladas. O Método dos Momentos tridimensional (MoM-3D) foi utilizado para resolver numericamente a equação integral do campo elétrico, e o modelo de Lorentz-Drude foi usado para representar a permissividade complexa das nanoestruturas metálicas. Baseado nesta modelagem matemática, um algoritmo computacional escrito em linguagem C foi desenvolvido. Como exemplo de aplicação e validação do código, dois problemas clássicos de espalhamento eletromagnético de nanopartículas metálicas foram analisados: nanoesfera e nanobarra, onde foram calculadas a resposta espectral e a distribuição do campo próximo. Os resultados obtidos foram comparados com resultados calculados por outros modelos e observou-se uma boa concordância e convergência entre eles.

## **ABSTRACT**

This work presents the development of a computational algorithm for electromagnetic scattering analysis of isolated plasmonic nanostructures. The tridimensional Method of Moments (MoM-3D) was used to solve the electric field integral equation, and the Lorentz-Drude model was used to represent the complex permittivity of the metallic nanostructures. Based in this model, a computational algorithm written in C language was developed. As example of application and validation of the code, two classical electromagnetic scattering problems of metallic nanoparticles are analyzed: nanosphere and rectangular nanorod, where the spectral response and near-field distributions were calculated. The obtained results were compared with other models and a good agreement and convergence was observed.

# CAPÍTULO 1

## 1 - INTRODUÇÃO

### 1.1 - Introdução

A nanoplasmônica estuda a interação de campos ópticos com nanoestruturas metálicas. Em frequências ópticas, os metais apresentam oscilações elétricas conhecidas como plasmons ou ressonâncias plasmônicas [1-3]. As pesquisas realizadas nesta área têm crescido nos últimos anos devido às diferentes possibilidades de aplicações, tais como microscopia [4], nanoantennas [5-9], dispositivos ópticos com alta capacidade de armazenamento de dados [10], células fotovoltaicas mais eficientes [11], entre outros. As ressonâncias plasmônicas dependem das propriedades elétricas do metal, de suas dimensões, da geometria, e da polarização da onda eletromagnética incidente. A análise do comportamento ressonante de nanopartículas plasmônicas com diferentes geometrias tem sido apresentada na literatura, como exemplo, nanoesferas e nanobarras [12], nanoestrelas [13], nanodiscos [14], tetraédro [15], nanodisco circular [16], nanodiscos triangulares [17], entre outras. Os estudos nesta área têm sido impulsionados também devido ao aumento da capacidade de análise computacional por meios de técnicas numéricas.

Nanopartículas metálicas são também referenciadas como antenas ópticas ou nanoantenas, utilizadas para realçar, confinar, transmitir e receber campos ópticos [18]. As nanoantenas podem ser ressonantes em dimensões bem menores que o comprimento de onda da luz. Esta característica é desejável para a manipulação e controle da luz em escalas menores que seu comprimento de onda. Dentre as características importantes das nanoantenas metálicas, além de superar o limite de difração da luz, destaca-se o confinamento de campo que elas podem proporcionar em relação a um campo incidente ( $|\mathbf{E}|/|\mathbf{E}_i|$ ). Isto é devido ao efeito plasmônico associado ao metal, onde surgem modos evanescentes que contribuem significativamente para intensificar os campos na proximidade da estrutura do material.

A investigação de técnicas analíticas e numéricas para analisar nanoestruturas tem sua importância no sentido de facilitar a compreensão complexa dos cálculos relacionados a tais temas; e também de analisar a interação eletromagnética com tais partículas, possibilitando uma análise física e conceitual mais detalhada desta interação.

Os principais desafios encontrados no desenvolvimento de nanoantenas ou nanopartículas são: a modelagem matemática e as técnicas de projeto. A modelagem matemática deve considerar o efeito de dispersão dos metais em frequências ópticas, o que torna o problema mais complexo. Geralmente, a solução matemática analítica demanda alta complexidade, ou mesmo não é possível obtê-la. Desta forma, a abordagem numérica é vista como ferramenta essencial de solução para problemas complexos, capaz de proporcionar maior flexibilidade na solução de estruturas de geometrias diferenciadas.

## 1.2 - Técnicas Numéricas

Existem diferentes métodos numéricos que podem solucionar um mesmo problema específico. Podem-se utilizar métodos diferenciais como o método das Diferenças Finitas no Domínio do Tempo (FDTD), ou o método dos elementos finitos (FEM). Este último é utilizado pelo Software Profissional Comsol Multiphysics. No entanto, tais métodos necessitam da utilização de condições de contorno absorventes (ABCs) para serem truncados. Estas paredes absorventes simulam artificialmente a propagação das ondas ao infinito. O principal objetivo é o de obter a menor interferência possível nos resultados específicos da região de análise: elas finalizam o domínio de análise devido a limites computacionais. Como exemplo, o software Comsol Multiphysics utiliza um tipo especial de ABC conhecida como *perfectly matched layer* ou apenas PML.

Outros métodos muito difundidos na análise de campo próximo e distante são os métodos que envolvem equações integrais ao invés de equações diferenciais. Como exemplo, o Método dos Momentos (MoM) que tem demonstrado ser bastante consistente para análise de nanoestruturas principalmente em frequência ópticas. O MoM não necessita de paredes absorventes para a análise de campo próximo e distante. É um modelo mais comumente realizado no domínio complexo, e fornece uma solução de onda completa para os campos próximos e distantes. Basicamente o MoM transforma uma equação integral em um sistema de equações algébricas, que pode ser resolvido numericamente. O método utilizado consiste na divisão de um objeto em partes volumétricas iguais que são excitadas pelo campo elétrico incidente e que, através da interação entre todas as partes, com a devida utilização da formulação numérica da equação integral de campo elétrico em cada parte, resulta na resposta completa do sistema.

Softwares profissionais, como o Comsol e CST, possuem custos relativamente altos. Desta forma, um algoritmo funcional em linguagem C com a possibilidade de criação de diferentes estruturas para análise, com bons resultados e a custos financeiros baixos pode ser uma alternativa viável. Além disso, o desenvolvimento de um algoritmo computacional proporciona um melhor entendimento físico do problema, o qual é importante no processo de otimização da resposta de um determinado problema.

### **1.3 - Objetivos**

O principal objetivo deste trabalho consiste em desenvolver uma ferramenta computacional para análise eletromagnética de nanopartículas metálicas isoladas através do Método dos Momentos 3D.

Objetivos Específicos:

- Modelar nanopartículas pelo Método dos Momentos 3D;
- Implementar um algoritmo computacional através de linguagem de programação estruturada;
- Validar o código computacional desenvolvido;
- Analisar, de maneira isolada, uma nanoesfera e uma nanobarra de ouro no espaço livre.

### **1.4 - Estrutura do Trabalho**

Este trabalho está dividido da seguinte maneira: o Capítulo 2 apresenta o desenvolvimento teórico do espalhamento eletromagnético em um objeto tridimensional. A solução numérica da equação integral de campo elétrico é obtida e solucionada através do Método dos Momentos. São também apresentadas as propriedades elétricas das nanopartículas analisadas; No Capítulo 3, são apresentados os principais resultados obtidos; No Capítulo 4, apresentam-se as conclusões e sugestões para trabalhos futuros. E, no final, são apresentados os Apêndices.



## CAPÍTULO 2

### 2 - DESENVOLVIMENTO TEÓRICO

#### 2.1 - Ressonância Plasmônica

Metais possuem uma alta quantidade de elétrons livres em seu estado sólido, sendo estes responsáveis pelas conhecidas propriedades de alta condutividade elétrica e alta refletividade óptica dos metais [19]. Em frequências ópticas, os metais não apresentam o mesmo comportamento de um condutor perfeito. Uma onda eletromagnética em alta frequência incidindo sobre uma partícula metálica de dimensões nanométricas é capaz de induzir uma oscilação coletiva dos elétrons da banda de condução do metal. Em contraste com a teoria de antenas, em que os parâmetros da antena são relacionados diretamente com o comprimento de onda incidente, em frequência ópticas os metais possuem comportamento diferente, e suas propriedades estão também relacionadas com a excitação coletiva dos elétrons livres (plasmons) característicos de um forte acoplamento entre excitação e resposta dos elétrons livres [20]. A Fig. 2.1 mostra o deslocamento da nuvem de elétrons livres de condução em relação ao núcleo do átomo quando excitados por uma onda eletromagnética de alta frequência.

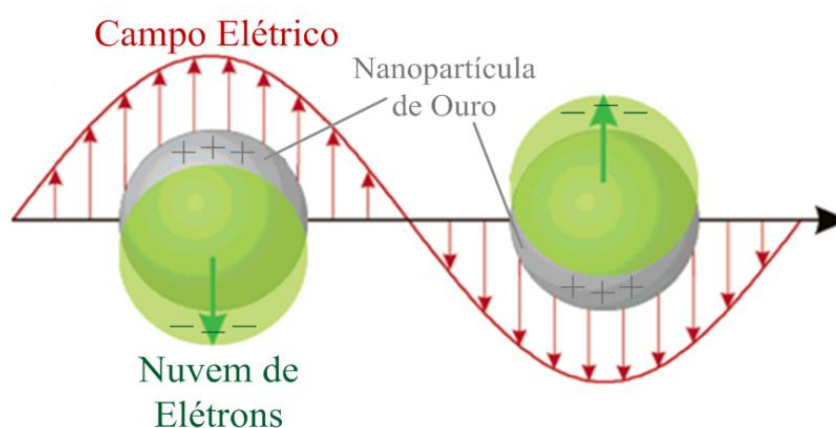


Fig. 2.1 – Representação esquemática de ressonância plasmônica

As nanopartículas metálicas suportam modos ressonantes plasmônicos, os quais são modos que se acoplam fortemente à radiação do campo externo. O campo externo induz oscilações dos elétrons no material que irradiam um campo secundário. As propriedades ópticas dos metais são governadas por estas oscilações dos elétrons livres [21], ou “nuvem de elétrons”. Como resultado desta excitação surgem ressonâncias plasmônicas na superfície do metal, que em nanopartículas isoladas ou em *clusters* de nanopartículas podem ser bem localizadas em regiões da nanopartícula.

Em altas frequências, devido à massa efetiva do elétron, surge uma reação de atraso de fase no elétron em relação à onda eletromagnética incidente [8]. Este comportamento é análogo a um sistema massa mola excitado por uma força externa. No caso dos elétrons no metal, a força de restauração dos elétrons é a força de Coulomb entre estes e os íons estacionários do metal. Em baixas frequências, os elétrons seguem a excitação com atraso de fase desprezível. O aumento da frequência de excitação exhibe um aumento da amplitude de oscilação, bem como um atraso de fase crescente. Quando o atraso de fase se aproxima de 90° [8], a amplitude da oscilação de carga passa por um máximo, e neste ponto a oscilação é limitada apenas pelas perdas do amortecimento do sistema (ôhmicas e de radiação). Em nanopartículas metálicas, esta última situação corresponde à ressonância plasmônica, a qual para determinados materiais, tais como ouro, prata, alumínio e cobre, aparecem na (ou próximo) da faixa espectral visível, e também podem ser excitadas diretamente por uma fonte luminosa. Por definição, em baixas frequências, não existe atraso de fase entre onda eletromagnética e a massa efetiva dos elétrons do metal, portanto, com base nesta definição, não existem Ressonâncias Plasmônicas em baixas frequências.

As ressonâncias plasmônicas localizadas podem produzir altas intensidades de campo próximo [22], onde a intensidade de campo relativo ao campo incidente é máxima quando o comprimento de onda é perfeitamente casado com as dimensões da nanopartícula ressonante.

Estas ressonâncias plasmônicas dependem das propriedades elétricas do metal, de suas dimensões, do formato, e da direção e polarização da onda eletromagnética incidente e podem ocorrer inclusive em estruturas metálicas com dimensões menores que o comprimento de onda da luz, trazendo consigo a possibilidade de se vencer o limite da difração de Abbe de  $\lambda/2$  [23], onde  $\lambda$  é o comprimento de onda, sendo este limite para a luz visível de 300nm, ou seja,  $\lambda=600\text{nm}$ . Este limite impossibilita uma maior miniaturização dos dispositivos fotônicos por impedirem a capacidade de maior integração dos mesmos.

## 2.2 - Descrição do Problema

Considere que um objeto com volume  $V_{obj}$  de propriedades elétricas  $\varepsilon$  e  $\mu$  esteja imerso no espaço livre com propriedades  $\varepsilon_0$  e  $\mu_0$ . A partir da incidência de uma onda eletromagnética sobre o volume deste objeto, conforme Fig.2.2a, surgem correntes de polarização em seu interior, ilustradas por uma corrente equivalente, conforme Fig.2.2b, definida pelo teorema do volume equivalente [24]. Este teorema pode ser utilizado para determinar o campo espalhado por um objeto inserido no espaço livre. A corrente de polarização equivalente deve ser calculada, pois, apesar de existir apenas no volume  $V_{obj}$ , interfere no campo total fora do objeto.

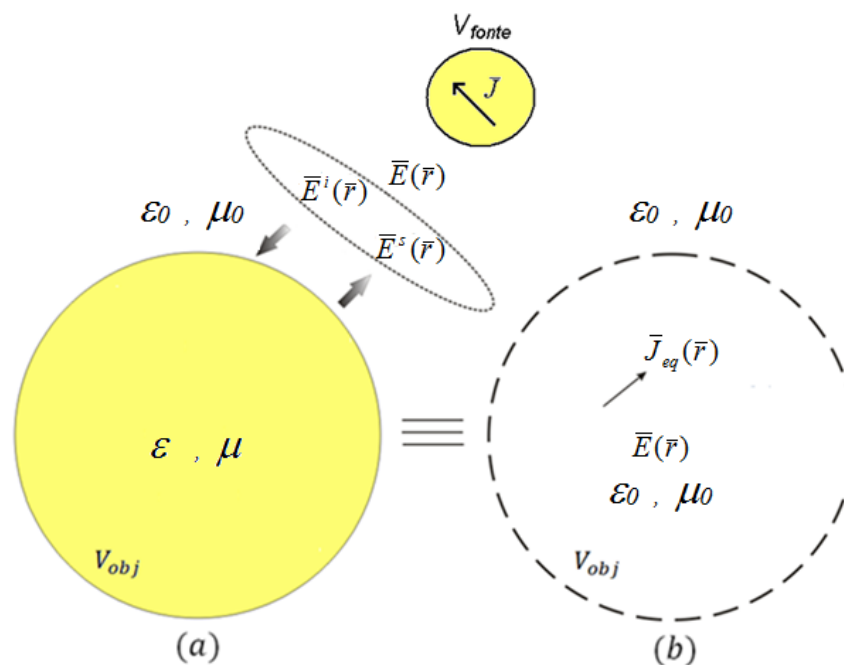


Fig. 2.2 - Fonte de campo externa eliminada. (a) Características elétricas do modelo de estrutura a ser analisada. (b) Problema equivalente.

Na Fig. 2.2,  $\bar{J}$  é densidade de corrente da fonte de excitação, a qual é previamente conhecida.

Um dos principais objetivos do problema da Fig. 2.2 é encontrar o campo total fora do objeto. Para isto, primeiramente deve-se determinar a densidade de corrente de polarização que surge no interior do objeto, pois são estas correntes equivalentes que produzem o campo espalhado. Posteriormente, encontra-se o campo total fora do objeto somando-se o campo incidente e o campo espalhado.

### 2.3 - Modelo de Lorentz - Drude

O material do objeto espalhador possui propriedades próprias e interage com o campo eletromagnético. Esta interação é representada pelas densidades de fluxo elétrico e de fluxo magnético, sendo dadas por

$$\bar{D}(\bar{r}) = \epsilon \bar{E}(\bar{r}) \quad (2.1a)$$

e

$$\bar{B}(\bar{r}) = \mu \bar{H}(\bar{r}), \quad (2.1b)$$

onde,  $\epsilon = \epsilon_r \epsilon_0$  e  $\mu = \mu_r \mu_0$  são, respectivamente, a permissividade e permeabilidade do objeto espalhador, sendo  $\epsilon_r$  e  $\mu_r$ , respectivamente, permissividade e a permeabilidade relativas do objeto espalhador,  $\epsilon_0 = 8,854 \times 10^{-12}$  F/m a permissividade para o espaço livre e  $\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7}$  H/m a permeabilidade para o espaço livre. Para meios não magnéticos, como o da análise feita neste trabalho,  $\mu_r = 1$ . Se  $\epsilon$  e  $\mu$  assumem valores complexos, o material é dito com perdas [25], podendo ele também ser dispersivo quando a permissividade elétrica  $\epsilon$  depende da frequência. A dependência da permissividade com a frequência é devida principalmente à resposta de polarização do material não ser instantânea [1].

Para uma análise das características elétricas do metal em altas frequências, é importante que se obtenha um modelo consistente do mesmo. Em frequências ópticas, os metais são altamente dependentes da frequência. Esta dependência pode ser bem expressa, simplificadamente, através de uma função dielétrica complexa que representa eletromagneticamente o objeto, dada por uma permissividade relativa  $\epsilon_r(\omega) = \epsilon_{Re}(\omega) + j\epsilon_{Im}(\omega)$  [19].

Geralmente, em frequências ópticas, se expressam observações apenas através da constante dielétrica  $\epsilon$ , a qual pode ser determinada através de estudos de refletividade e ou através do índice de refração complexo, de modo que a energia de dissipação já está associada à parte imaginária da própria constante dielétrica  $\epsilon$  do material.

A aproximação de Drude, basicamente, é um modelo que descreve a condução metálica em termos de um gás de elétrons livres através de uma rede de íons positivos relativamente fixos, chamada de rede cristalina. O mesmo foi capaz de descrever muitas propriedades dos metais, mas é limitado a uma faixa de comprimento de onda específico [26]. Já o modelo de Lorentz, resumidamente, é um modelo baseado na aproximação de

amortecimento de oscilador harmônico, descrevendo as transições de interbanda dos elétrons. É um modelo semi-quântico, o qual considera os elétrons do material confinados no núcleo atômico iônico, e oscilando em torno dele. É utilizado para modelar meios dispersivos com múltiplas frequências de ressonância.

Nos metais nobres, como o ouro, existem dois tipos de contribuição para a constante dielétrica do metal: uma relativa aos termos de Lorentz que está relacionada com os elétrons internos dos átomos que descrevem transições de interbanda, ou seja, de orbitais mais internos para a banda de condução. Outra contribuição está relacionada aos elétrons livres da banda de condução [3], ou seja, aos termos de Drude. A combinação dos dois modelos, (Lorentz - Drude) em uma única equação para a permissividade complexa do material expande a aplicação a uma faixa de frequências ópticas.

A aproximação de Lorentz-Drude, com um termo de interbanda, para o ouro, que é o material utilizado neste trabalho, tem demonstrado ser bastante aproximado dos resultados práticos aproximadamente na faixa de  $\lambda > 500\text{nm}$ , dada por [1]

$$\varepsilon_r(\omega) = \varepsilon_\infty - \frac{\omega_{p1}^2}{\omega^2 - j\Gamma\omega} + \frac{\omega_{p2}^2}{\omega_0^2 - \omega^2 + j\gamma\omega}, \quad (2.2)$$

onde  $\varepsilon_\infty = 8$  é a permissividade relativa para frequência infinita, que é uma constante introduzida para responder ao efeito integrado de transições de interbanda de alta energia,  $\omega_{p1} = 13,8 \times 10^{15} \text{s}^{-1}$  é a frequência do plasma, e  $\Gamma = 1,075 \times 10^{14} \text{s}^{-1}$  é a frequência de colisão dos elétrons livres,  $\omega_{p2} = 45 \times 10^{14} \text{s}^{-1}$  é também frequência de plasma, e  $\gamma = 9 \times 10^{14} \text{s}^{-1}$  a colisão dos elétrons livres com características de ressonância do termo de interbanda dos elétrons ligados,  $\omega_0 = 2\pi c/\lambda_0$ ,  $\lambda_0 = 450\text{nm}$ ,  $c$  é a velocidade da luz, e  $j$  é a unidade imaginária. Na Fig. 2.2, tem-se a representação gráfica do módulo da parte real e imaginária de (2.2).

Este é um modelo de permissividade complexa com boa aproximação em comprimentos de onda maiores que 500nm, ou seja, na Fig.2.2 aproximadamente até 600 THz, e caracteriza a dispersão do ouro em frequências ópticas.

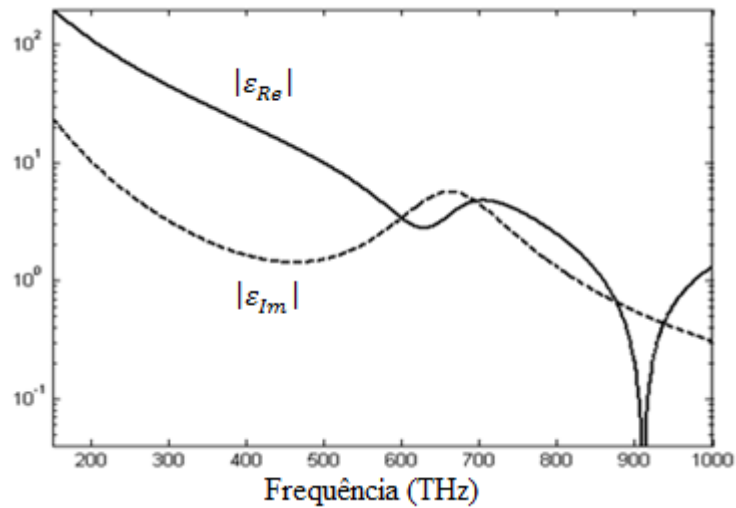


Fig. 2.3 – Partes real e imaginária da permissividade relativa com um termo de interbanda

## 2.4 - Equação Integral do Campo Elétrico

Através da linearidade das equações de Maxwell, o campo pode ser dividido em duas componentes, uma incidente e outra espalhada, de forma que os campos elétrico ou magnético totais fora do volume  $V_{obj}$  de um objeto qualquer são dados por uma composição de campos incidentes e espalhados na forma:

$$\bar{E}(\bar{r}) = \bar{E}^i(\bar{r}) + \bar{E}^s(\bar{r}) \quad (2.3a)$$

e

$$\bar{H}(\bar{r}) = \bar{H}^i(\bar{r}) + \bar{H}^s(\bar{r}). \quad (2.3b)$$

Os índices sobrescritos  $i$  e  $s$  representam incidência e espalhamento, respectivamente.  $\bar{E}$  e  $\bar{H}$  são, respectivamente, as transformadas de Fourier dos vetores intensidade de campo elétrico  $E$  e intensidade de campo magnético  $H$ . Foi considerada dependência harmônica no tempo  $e^{j\omega t}$ , e vetor posição

$$\bar{r} = x\bar{a}_x + y\bar{a}_y + z\bar{a}_z. \quad (2.4)$$

Em (2.4),  $\bar{a}_n$  são os vetores unitários correspondentes a cada direção dos eixos coordenados.

No domínio da frequência,  $\bar{E}$  e  $\bar{H}$  relacionam-se através das equações de Maxwell, dadas por

$$\nabla \times \bar{E}(\bar{r}) = -j\omega\mu\bar{H}(\bar{r}) \quad (2.5a)$$

e

$$\nabla \times \bar{H}(\bar{r}) = j\omega\epsilon\bar{E}(\bar{r}) + \bar{J}(\bar{r}), \quad (2.5b)$$

em que  $\omega$  define a frequência de operação.

A partir das equações (2.5a) e (2.5b), pode-se provar, conforme Apêndice I, que o campo elétrico em qualquer ponto do espaço satisfaz a seguinte equação

$$\nabla \times \mu^{-1}\nabla \times \bar{E}(\bar{r}) - \omega^2 \epsilon\bar{E}(\bar{r}) = -j\omega\bar{J}(\bar{r}), \quad (2.6)$$

onde  $\mu=\mu_0$  e  $\epsilon=\epsilon_0$  se  $\bar{r} \notin V_{obj}$ , ou  $\mu=\mu_{obj}$  e  $\epsilon=\epsilon_{obj}$  se  $\bar{r} \in V_{obj}$ . Subtraindo os dois lados desta equação por  $\nabla \times \mu_0^{-1}\nabla \times \bar{E}(\bar{r}) - \omega^2 \epsilon_0\bar{E}(\bar{r})$  e organizando os termos [27], obtém-se:

$$\begin{aligned} \nabla \times \mu_0^{-1}\nabla \times \bar{E}(\bar{r}) - \omega^2 \epsilon_0\bar{E}(\bar{r}) = & -j\omega\bar{J}(\bar{r}) + \omega^2(\epsilon - \epsilon_0)\bar{E}(\bar{r}) - \\ & -\nabla \times (\mu_0^{-1} - \mu^{-1})\nabla \times \bar{E}(\bar{r}). \end{aligned} \quad (2.7)$$

Considerando meios não magnéticos ( $\mu=\mu_{obj} = \mu_0$ ), tem-se:

$$\nabla \times \nabla \times \bar{E}(\bar{r}) - \omega^2 \mu_0 \epsilon_0 \bar{E}(\bar{r}) = -j\omega\mu_0 \bar{J}(\bar{r}) + \omega^2 \mu_0 (\epsilon - \epsilon_0) \bar{E}(\bar{r}). \quad (2.8)$$

A função de Green diádica de (2.8) é dada por:

$$\bar{G}(\bar{r}, \bar{r}') = -j\omega\mu_0(\bar{I} + \frac{1}{k^2}\nabla\nabla) \frac{e^{-jk|\bar{r}-\bar{r}'|}}{4\pi|\bar{r}-\bar{r}'|}, \quad (2.9)$$

onde  $k^2=\omega^2\mu_0\epsilon_0$  e  $\bar{I}$  é o operador identidade. Fisicamente, em eletromagnetismo,  $\bar{G}(\bar{r}, \bar{r}')$  representa o campo elétrico em  $\bar{r}$  devido a uma fonte pontual de corrente em  $\bar{r}'$ , conforme coordenadas na Fig. 2.4.

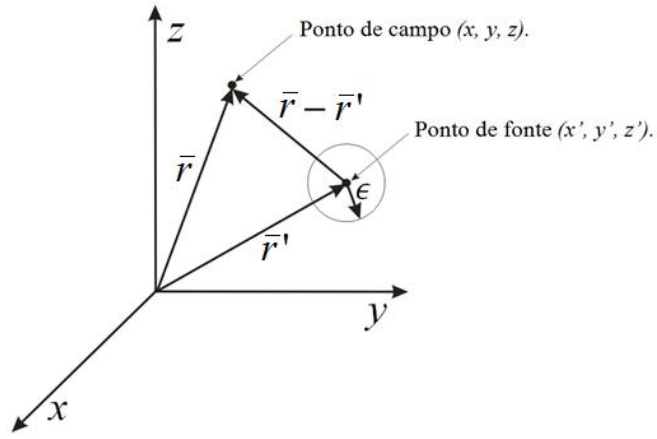


Fig. 2.4 – Sistema cartesiano com ponto de campo e ponto de fonte [1]

Dessa forma, a solução na forma de integral de (2.8) é:

$$\bar{E}(\bar{r}) = \int_{V_{fonte}} d\bar{r}' \bar{G}(\bar{r}, \bar{r}') \cdot \bar{J}(\bar{r}') + \int_{V_{obj}} d\bar{r}' \bar{G}(\bar{r}, \bar{r}') \cdot j\omega(\epsilon_{obj} - \epsilon_0). \quad (2.10)$$

Definindo a densidade de corrente de polarização através de

$$\bar{J}_{eq} = j\omega[\epsilon(\bar{r}) - \epsilon_0] \bar{E}(\bar{r}) = \tau(\bar{r}) \bar{E}(\bar{r}), \quad (2.11)$$

tem-se

$$\bar{E}(\bar{r}) = \int_{V_{fonte}} d\bar{r}' \bar{G}(\bar{r}, \bar{r}') \cdot \bar{J}(\bar{r}') + \int_{V_{obj}} d\bar{r}' \bar{G}(\bar{r}, \bar{r}') \cdot \bar{J}_{eq}(\bar{r}'). \quad (2.12)$$

A primeira integral do lado direito representa o campo elétrico incidente  $\bar{E}^i(\bar{r})$ , devido à fonte  $\bar{J}(\bar{r})$ , e a segunda representa o campo elétrico espalhado  $\bar{E}^s(\bar{r})$  ( $\bar{E}(\bar{r}) = \bar{E}^i(\bar{r}) + \bar{E}^s(\bar{r})$ ), onde

$$\bar{E}^i(\bar{r}) = \int_{V_{fonte}} d\bar{r}' \bar{G}(\bar{r}, \bar{r}') \cdot \bar{J}(\bar{r}') \quad (2.13)$$

e

$$\bar{E}^s(\bar{r}) = \int_{V_{obj}} d\bar{r}' \bar{G}(\bar{r}, \bar{r}') \cdot \bar{J}_{eq}(\bar{r}'). \quad (2.14)$$



## 2.5 - Solução Numérica pelo Método dos Momentos

Em geral, o Método dos Momentos baseia-se na solução numérica de equações integrais. Observa-se que a equação integral (2.12) possui uma singularidade em  $\bar{r} = \bar{r}'$ , o que provoca divergência neste ponto. Esta singularidade é excluída eliminando o volume que a circula, fazendo-o tender a zero. De acordo com Van Bladel [28], a exclusão da singularidade resulta em

$$\bar{E}^s(\bar{r}) = PV \int_{V_{obj}} \bar{G}(\bar{r}, \bar{r}') \cdot \bar{J}_{eq}(\bar{r}') d\bar{r}' - \frac{\bar{J}_{eq}(\bar{r}')}{j3\omega\epsilon_0}, \quad (2.15)$$

onde,  $PV$  denota o valor principal da integral e o segundo termo representa um fator de correção devido à retirada da singularidade.

Substituindo-se (2.15) em (2.12), temos

$$\bar{E}^i(\bar{r}) = \bar{E}(\bar{r}') - PV \int_{V_{obj}} \bar{G}(\bar{r}, \bar{r}') \cdot \bar{J}_{eq}(\bar{r}') d\bar{r}' + \frac{\bar{J}_{eq}(\bar{r}')}{j3\omega\epsilon_0}, \quad \bar{r} \in V_{obj} \text{ e } \bar{r}' \in V_{obj}. \quad (2.16)$$

E substituindo (2.11) em (2.16), chega-se a

$$\bar{E}^i(\bar{r}) = \bar{E}(\bar{r}') - PV \int_{V_{obj}} \tau(\bar{r}') \bar{G}(\bar{r}, \bar{r}') \cdot \bar{E}(\bar{r}') d\bar{r}' + \frac{\tau(\bar{r}') \bar{E}(\bar{r}')}{j3\omega\epsilon_0}, \quad (2.17)$$

onde,

$$\bar{G}(\bar{r}, \bar{r}') \cdot \bar{E}(\bar{r}') = \begin{bmatrix} G_{xx}(\bar{r}, \bar{r}') & G_{xy}(\bar{r}, \bar{r}') & G_{xz}(\bar{r}, \bar{r}') \\ G_{yx}(\bar{r}, \bar{r}') & G_{yy}(\bar{r}, \bar{r}') & G_{yz}(\bar{r}, \bar{r}') \\ G_{zx}(\bar{r}, \bar{r}') & G_{zy}(\bar{r}, \bar{r}') & G_{zz}(\bar{r}, \bar{r}') \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_x(\bar{r}') \\ E_y(\bar{r}') \\ E_z(\bar{r}') \end{bmatrix}. \quad (2.18)$$

Definindo  $x_1 = x$ ,  $x_2 = y$  e  $x_3 = z$ , resulta, para as componentes de campo elétrico [29]

$$E_{x_p}^i(\bar{r}) = \left[ 1 + \frac{\tau(\bar{r}')}{3j\omega\epsilon_0} \right] E_{x_p}(\bar{r}) - PV \int_{V_{obj}} \tau(\bar{r}') \sum_{q=1}^3 G_{x_p x_q}(\bar{r}, \bar{r}') E_{x_q}(\bar{r}') d\bar{r}', \quad (2.19)$$

para  $p, q=1, 2, 3$ . A transformação de (2.19) em uma equação matricial é feita através do MoM-3D.

Divide-se um objeto qualquer de análise em  $N$  subvolumes ( $N$  células), nos quais  $E_{x_p}$  e  $\tau(\bar{r}')$  sejam constantes em cada subvolume.  $V_m$  representa o  $m$ -ésimo subvolume e  $\bar{r}_m$  um ponto no centro de  $V_m$ .

Aplicando (2.17) em cada subvolume  $V_m$ , tem-se:

$$E_{x_p}^i(\bar{r}_m) = \left[ 1 + \frac{\tau(\bar{r}_m)}{3j\omega\epsilon_0} \right] E_{x_p}(\bar{r}_m) - \sum_{q=1}^3 \sum_{n=1}^N \left[ \tau(\bar{r}_n) PV \int_{V_{obj}} G_{x_p x_q}(\bar{r}_m, \bar{r}') dv' \right] E_{x_q}(\bar{r}_n) \quad (2.20)$$

para  $p, q=1, 2, 3$ .

Em representação equivalente para (2.20), teremos

$$\sum_{q=1}^3 \sum_{n=1}^N G_{x_p x_q}^{mn} E_{x_q}(\bar{r}_n) = -E_{x_p}^i(\bar{r}_m) \quad m=1, 2, \dots, N; \quad p, q=1, 2, 3. \quad (2.21)$$

Utilizando notação de matrizes, verifica-se que  $[G][E] = -[E^i]$ .  $[G]$  é uma matriz de ordem  $3N \times 3N$ , enquanto que  $[E]$  e  $[E^i]$  são vetores de dimensão  $3N$ . Pode-se escrever a seguinte representação matricial de (2.21):

$$\begin{bmatrix} [G_{xx}] & [G_{xy}] & [G_{xz}] \\ [G_{yx}] & [G_{yy}] & [G_{yz}] \\ [G_{zx}] & [G_{zy}] & [G_{zz}] \end{bmatrix} \begin{bmatrix} [E_x] \\ [E_y] \\ [E_z] \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} [E_x^i] \\ [E_y^i] \\ [E_z^i] \end{bmatrix}. \quad (2.22)$$

Os elementos de  $[G]$  em (2.22) são dados por

$$G_{x_p x_q}^{mn} = \tau(\bar{r}_n) PV \int_{V_{obj}} G_{x_p x_q}(\bar{r}_m, \bar{r}') dv' - \delta_{pq} \delta_{mn} \left[ 1 + \frac{\tau(\bar{r}_m)}{3j\omega\epsilon_0} \right], \quad (2.23)$$

em que  $\delta_{pq} = 1$  se  $p = q$  e  $\delta_{pq} = 0$  se  $p \neq q$ ;  $\delta_{mn} = 1$  se  $m = n$  e  $\delta_{mn} = 0$  se  $m \neq n$ , onde  $G_{x_p x_q}^{mn}$  é uma matriz com  $N \times N$  elementos resultantes de  $E_{x_p}^i$  vetores de dimensão  $N$ .

O campo elétrico total em cada ponto  $\bar{r}_m$  é determinado invertendo a matriz  $[G]$ . Os elementos da matriz  $[G]$  de (2.22) são calculados aproximadamente por:

$$G_{x_p x_q}^{mn} = \frac{-j\omega\mu_0 k_0 V_n \tau(\bar{r}_n) \exp(-j\alpha_{mn})}{4\pi\alpha_{mn}^3} \left[ (\alpha_{mn}^2 - 1 - j\alpha_{mn}) \delta_{pq} + \right. \\ \left. + \cos\theta_{x_p}^{mn} \cos\theta_{x_q}^{mn} (3 - \alpha_{mn}^2 + 3j\alpha_{mn}) \right] \quad m \neq n \quad (2.24)$$

onde  $\alpha_{mn} = k_0 R_{mn}$ ,  $R_{mn} = |\bar{r}_m - \bar{r}_n|$ ,  $\cos\theta_{x_p}^{mn} = \frac{x_p^m - x_p^n}{R_{mn}}$ ,  $\cos\theta_{x_q}^{mn} = \frac{x_q^m - x_q^n}{R_{mn}}$ ,  $\bar{r}_m = (x_1^m, x_2^m, x_3^m)$  e

$\bar{r}_n = (x_1^n, x_2^n, x_3^n)$ . A aproximação em (2.24) é boa quando o valor de  $N$  é alto.

Adicionalmente, tem-se

$$G_{x_p x_q}^{mn} = \delta_{pq} \left\{ \frac{-2j\omega\mu_0 \tau(\bar{r}_n)}{3k_0^2} \left[ \exp(-jk_0 a_n) (1 + jk_0 a_n) - 1 \right] - \left[ 1 + \frac{\tau(\bar{r}_n)}{3j\omega\epsilon_0} \right] \right\} \quad m=n, \quad (2.25)$$

sendo  $a_n = (3V_n / 4\pi)^{1/3}$ . Nesta aproximação os volumes  $V_n$  devem ser bem próximos de uma esfera de raio  $a_n$ . Bons resultados são obtidos quando se consideram células cúbicas.

A solução de (2.22) fornece aproximação para  $\bar{E}(\bar{r})$ , onde  $\bar{r} \in V_{obj}$ . Com o conhecimento deste campo dentro do objeto metálico, é possível calcular o campo em qualquer ponto do espaço por meio de (2.12).

# CAPÍTULO 3

## 3 – RESULTADOS

### 3.1 – Descrição do Algoritmo

Nesta seção, é apresentada a realização da implementação numérica da formulação aplicada para gerar a resposta ressonante, espectral, espacial e de campo próximo de nanoestruturas plasmônicas.

Baseando-se no modelo teórico apresentado em capítulos anteriores, foi desenvolvido um algoritmo em linguagem C, que é apresentado na íntegra no Apêndice III deste trabalho. Basicamente, inicializam-se as constantes e variáveis do algoritmo, cria-se um domínio computacional com  $N$  células de mesmas dimensões  $dx = dy = dz$  e nele inclui-se o objeto a ser analisado, podendo o objeto ser do tamanho do próprio domínio. Apenas o centro de cada célula existente do domínio é selecionado. Todas as células do interior do objeto são excitadas por uma onda plana complexa  $[E^i]$ .

Posteriormente, os elementos da função de Green  $[G]_{3N \times 3N}$  são calculados para o volume do objeto através de (2.24) e (2.25) para  $m \neq n$  e  $m = n$ , respectivamente. O campo no interior resulta em um sistema linear na forma  $[E] = -[G]^{-1} [E^i]$ . Este sistema é resolvido através de eliminação de Gauss para números complexos.

Para cálculo do campo espalhado, são selecionados todos os pontos fora do objeto do qual se deseja obter o campo espalhado: pontos inclusive fora do domínio computacional criado podem ser analisados. Os pontos em que se quer calcular o campo total (incidente mais espalhado), já excitados com a onda  $[E^i]$ , geram uma nova matriz  $[G]_n$ , calculada por (2.24) para  $m \neq n$ , onde não existem singularidades, ou seja, fora do objeto de análise. A Fig. 3.1 resume através de um diagrama de fluxo os principais passos do algoritmo realizado para o cálculo do campo no interior do objeto. O campo espalhado nos pontos de análise fora do objeto é obtido por  $[E]_p = -[G]_n^{-1} [E] + [E^i]$ .

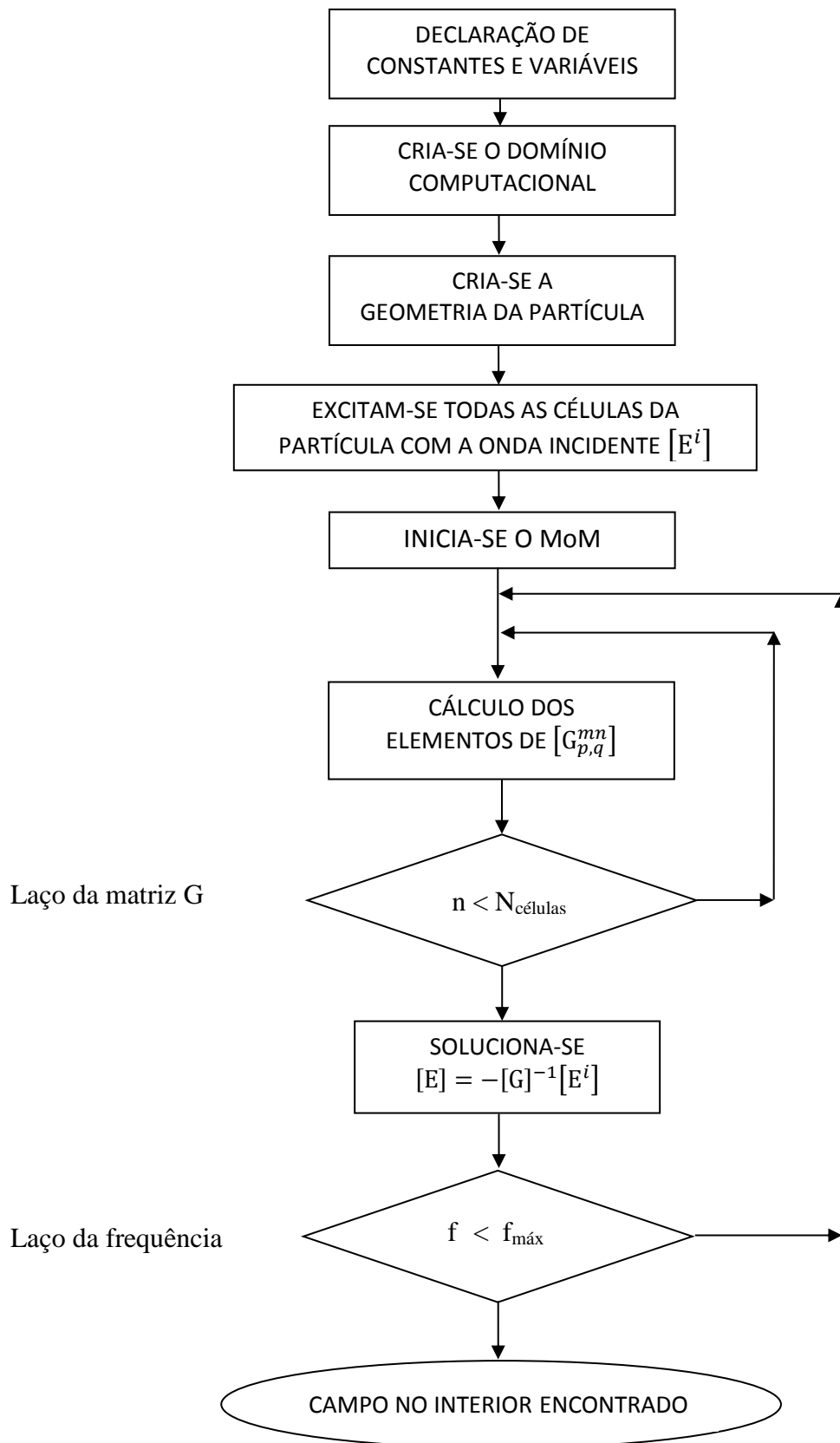


Fig. 3.1 – Diagrama de fluxo de cálculos do algoritmo desenvolvido

Os valores de  $[E]_p$  são encontrados pelo mesmo princípio da formulação apresentada no diagrama de fluxo da Fig. 3.1. Como  $[E]_p$  é complexo, retira-se seu valor absoluto e faz-se a normalização de  $[E]_p$  por  $E_{i0}$ . Este processo pode ser feito para apenas um comprimento de onda, frequência, ou para diversos comprimentos de onda, frequência, um a cada passo, gerando desta forma uma resposta espectral discreta em função da frequência ou do comprimento de onda.

### 3.2 – Geometrias das Nanopartículas

Para validar o código desenvolvido, foram analisados dois problemas específicos. O primeiro consiste em uma nanoesfera de ouro isolada, no espaço livre, e com centro na origem (Fig. 3.2(a)). O segundo, uma nanobarra de ouro isolada, também no espaço livre, com centro na origem e comprimento ao longo do eixo  $x$  (Fig. 3.2(b)).

A nanoesfera analisada possui diâmetro  $D = 120\text{nm}$  (raio  $a = 60\text{nm}$ ). A nanobarra possui comprimento  $L = 60\text{nm}$  e  $w = 10\text{nm}$ . Cada uma das nanoestruturas é analisada separadamente. Sobre cada uma delas, isoladamente, incide uma onda plana com campo elétrico  $\vec{E}^i(\vec{r}) = E_{i0} e^{-jkz} \vec{a}_x$  polarizado em  $x$  e propagando-se na direção  $+z$ , sendo  $E_{i0} = 1\text{V/m}$  a amplitude da onda incidente e  $x$ - $y$  o plano o da fonte.

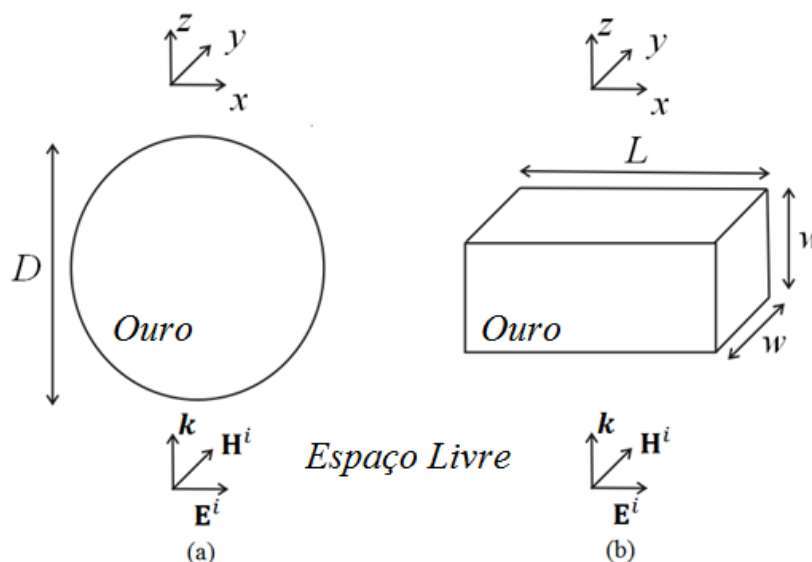


Fig. 3.2. – Geometrias para análise dos problemas de espalhamento eletromagnético analisado  
 (a) Primeiro problema: nanoesfera isolada. (b) Segundo problema: nanobarra retangular isolada.

As duas nanopartículas analisadas possuem permissividade complexa dada por  $\varepsilon = \varepsilon_r \varepsilon_0$ , onde  $\varepsilon_0$  é a permissividade do espaço livre e  $\varepsilon_r$  a relativa.  $\varepsilon_r$  é dado pelo modelo de Lorentz-Drude para o ouro com um termo de interbanda dado na equação (2.2).

Inicialmente, é comparado o caso da esfera com o clássico modelo analítico de Mie [30] e também com o software profissional Comsol Multiphysics. Posteriormente, é analisada a nanobarra, que por não possuir solução analítica conhecida é apenas comparado com o software Comsol, para, assim, confirmar a possibilidade de aplicação do algoritmo em diferentes geometrias. Todas as simulações foram realizadas em um computador core i7 com 16GB de RAM.

### 3.3 – Resultados da Nanoesfera

Para modelar a nanoesfera, primeiramente em prévia seção do algoritmo foi criado um domínio tridimensional cúbico de aresta  $4a$ , sendo  $a=60\text{nm}$  o raio da esfera. Este domínio é dividido em células cúbicas de dimensões  $dx=dy=dz=8 \times 10^{-9}\text{m}$  cada. Selecionam-se todos os pontos no centro de cada célula do domínio. A partir da inequação

$$\sqrt{(x-x_0)^2 + (y-y_0)^2 + (z-z_0)^2} < a, \quad (3.1)$$

forma-se a geometria da nanoesfera, sendo que somente os pontos menores que o raio  $a$  do domínio são selecionados, formando desta forma a nanoesfera. Utiliza-se  $x_0=0, y_0=0, z_0=0$  e, desta forma, centra-se a esfera na origem. Para a esfera, foi selecionado um total de  $N=1791$  células cúbicas com posições menores que o raio  $a$ , quantidade esta que corresponde a uma aproximação por células cúbicas para a nanoesfera.

Após a excitação de cada célula da nanoesfera com a onda incidente, aplica-se a formulação numérica da equação integral sobre cada célula, que devido ao Método dos Momentos em si, interage numericamente com as demais células. Após encontrar o campo no interior da esfera, é possível calcular a distribuição espacial do espalhamento na nanoesfera, conforme Figs. 3.3 - 3.5, que mostram a variação espacial de campo elétrico correspondente a cada eixo coordenado.

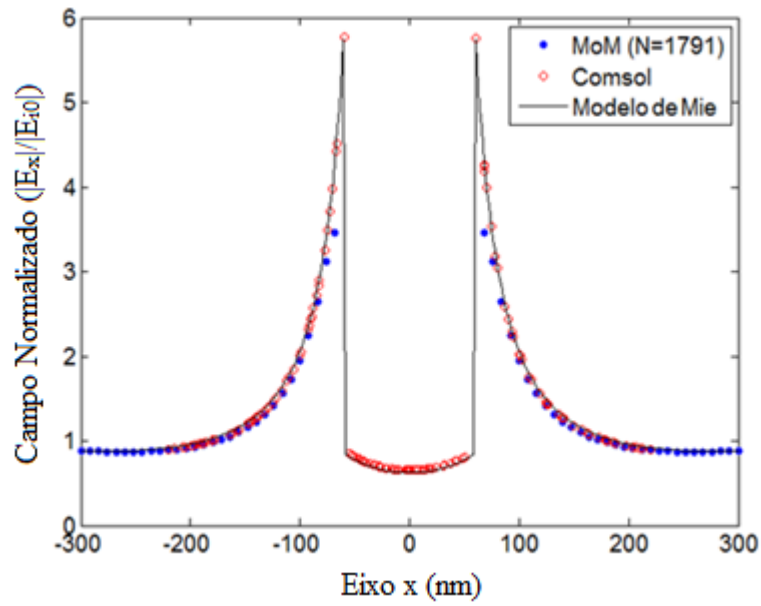


Fig. 3. 3. – Distribuição de campo elétrico próximo normalizado para  $\lambda=550$ nm ao longo do eixo  $x$  para nanoesfera de ouro com raio  $a=60$  nm.

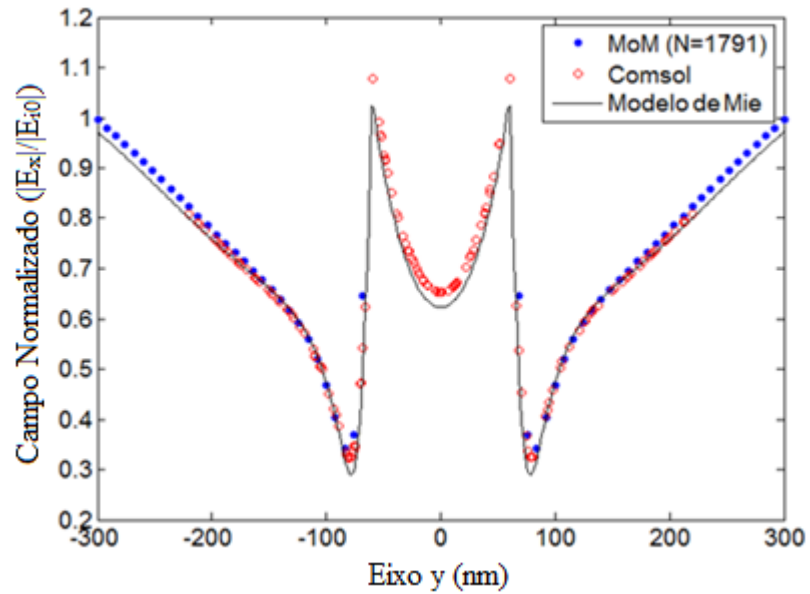


Fig. 3. 4. – Distribuição de campo próximo normalizado para  $\lambda=550$ nm ao longo do eixo  $y$  para nanoesfera de ouro com raio  $a=60$  nm.



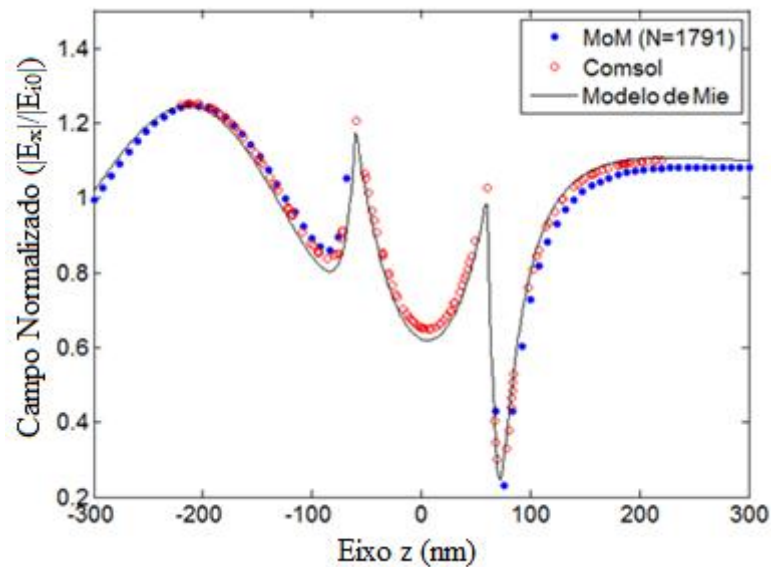


Fig.3.5. – Distribuição de campo próximo normalizado para  $\lambda=550\text{nm}$  ao longo do eixo  $z$  para nanoesfera de ouro com raio  $a=60\text{ nm}$ .

Das Figs. 3.3 - 3.5, observa-se uma boa concordância entre os resultados e as referências utilizadas. Os resultados do Comsol estão mais próximos do analítico, e o método MoM-3D segue com bons resultados para a resposta espacial do campo elétrico normalizado. As componentes de campo  $E_y$  e  $E_z$ , por possuírem níveis muito baixos, não são apresentadas.

O comprimento de onda analisado nesta simulação varia entre 500nm e 1000nm. Foi dividido o intervalo anterior em 100 passos de comprimento de onda. A resposta ressonante do campo elétrico próximo foi calculada em quatro pontos diferentes ao longo do eixo  $x$ , sendo estes pontos posicionados em  $(a+d, 0, 0)$ , onde  $a$  é o raio da esfera e  $d$  assume os valores de 20nm, 40nm, 80nm e 160nm, conforme Fig. 3.6, a qual mostra a variação da componente  $x$  do campo elétrico normalizado versus o comprimento de onda para diferentes pontos no eixo  $x$ .

Observam-se resultados concordantes com as referências utilizadas e que a principal ressonância da nanoesfera ocorre em  $\lambda=550\text{nm}$ . Entretanto, em pontos mais próximos da superfície da esfera, existe uma diferença mais acentuada nos resultados. Isto pode ser explicado pela rápida variação do campo nesta região, de modo que, quanto mais próximo da esfera, os campos vairam mais rapidamente, de modo que nestas regiões seria necessaria uma discretização mais fina para se obter resultados mais precisos.

Na simulação da esfera com o Comsol Multiphysics foi criado um domínio esférico com diâmetro  $D = 460\text{ nm}$ . Este domínio esférico é limitado por camadas perfeitamente casadas e absorventes (PML) que simulam a propagação da onda ao infinito.

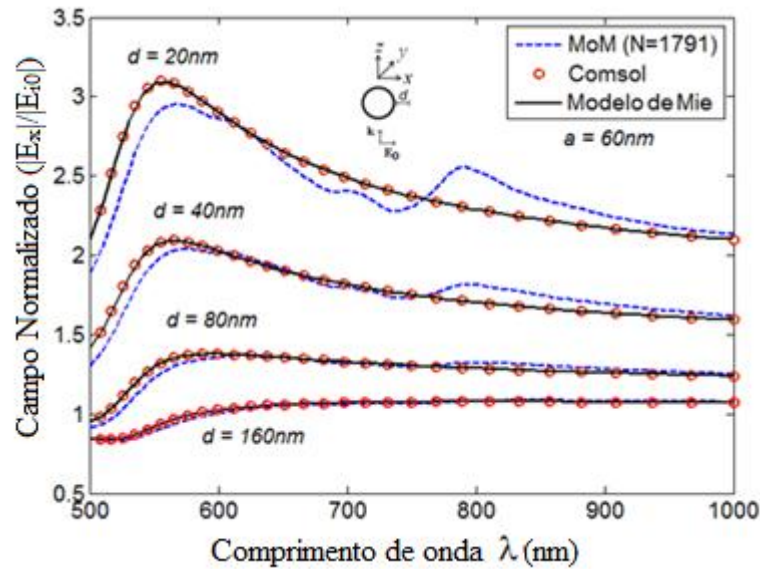


Fig. 3.6. - Resposta espectral do campo elétrico normalizado (componente  $x$ ) próximo a nanoesfera em diferentes pontos ao longo do eixo  $x$  ( $x=a+d$ ,  $y=0$ ,  $z=0$ ), onde  $a=60\text{nm}$ ,  $d=20$ ,  $40$ ,  $80$ , e  $160\text{nm}$ .

### 3.4 – Resultados da Nanobarra

A nanobarra analisada possui comprimento  $L = 60\text{nm}$  e largura  $w = 10\text{nm}$ , conforme Fig. 3.2b. Para representar a nanobarra, foram utilizadas  $N=5 \times 5 \times 30=750$  células cúbicas, sendo a maior discretização a do comprimento da nanobarra, de modo que as dimensões das células são iguais e de tamanho  $dx=dy=dz=2 \times 10^{-9}\text{m}$ .

Foi utilizado no Comsol Multiphysics o mesmo domínio esférico aplicado a nanoesfera com diâmetro  $D = 460\text{nm}$  e limitado por camadas perfeitamente casadas e absorventes (PML) que simulam a propagação da onda ao infinito.

Deste modo, observa-se que para  $N=750$  células a matriz  $[G]$  terá  $3N \times 3N = 5.062.500$  elementos, cada um do tipo *double* com 32 bits, ou seja, somente a matriz  $G$  aloca estaticamente 0.0188592821 gigabytes, para esta situação. Como esta aproximação para o MoM utiliza células cúbicas, observa-se que uma maior discretização em qualquer eixo coordenado resultará também no aumento da discretização no outro eixo para manter a célula cúbica, o que conseqüentemente eleva o número de células caso se utilize de discretizações maiores. Como exemplo, ao se duplicar a discretização em cada eixo teríamos como resultado  $N=10 \times 10 \times 30=6000$  células cúbicas com dimensões  $dx=dy=dz=1 \times 10^{-9}\text{m}$ , e observa-se que a matriz  $G$  eleva seu número de elementos de 5.062.500 para  $3N \times 3N=324.000.000$  elementos,

cada um com 32bits, ou seja, somente a matriz  $G$  ocuparia um total de 1.2069940567 gigabytes alocados estaticamente na memória. Deste modo o desenvolvimento da estrutura ficou limitado pela capacidade de armazenamento estática do compilador utilizado.

A Fig. 3.7 mostra a resposta espectral para o campo elétrico normalizado  $E_x$  na extremidade da nanobarra, nos pontos  $(x = L / 2 + d, y = 0, z = 0)$ , onde  $L=60\text{nm}$  é o comprimento da nanobarra e  $d = 5\text{nm}$ , e  $20\text{nm}$ .

Já as Figs. 3.8 - 3.10 mostram a resposta espectral do campo elétrico normalizado em pontos no eixo  $z$ , exatamente no meio da nanobarra, nos pontos  $(0, 0, w / 2 + d)$ , onde  $w = 10\text{nm}$ , e  $d = 5\text{nm}$  (Fig.3.8),  $d = 10\text{nm}$  (Fig.3.9) e  $d = 20\text{nm}$  (Fig.3.10), respectivamente. O comprimento de onda analisado nestas simulações se estende entre  $500\text{nm}$  e  $1300\text{nm}$ , sendo este intervalo dividido em 150 passos, onde ocorre a principal ressonância da nanobarra.

É possível observar que, na frequência de ressonância da nanobarra, o campo em seu final é relativamente maior que o campo no meio da barra. E que o campo elétrico normalizado é sempre aumentado várias vezes em relação à onda incidente de amplitude unitária devido ao efeito plasmônico de superfície da nanopartícula.

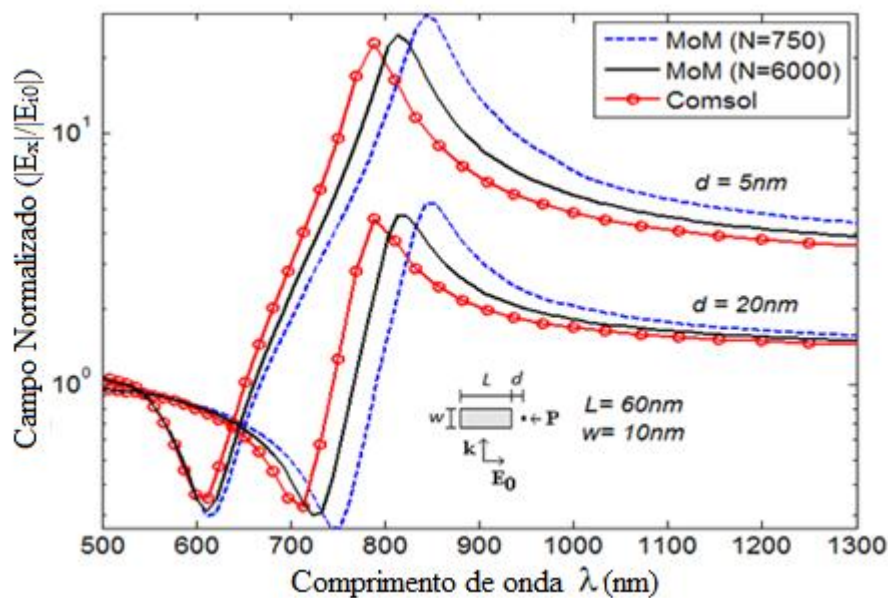


Fig. 3.7 – Resposta espectral do campo elétrico próximo e normalizado (componente  $x$ ) em diferentes pontos do eixo  $x$ , nos pontos  $(x=L/2+d, y=0, z=0)$  com  $L = 60\text{nm}$ ,  $w = 10\text{nm}$ ,  $d = 5$ , e  $20\text{nm}$ .

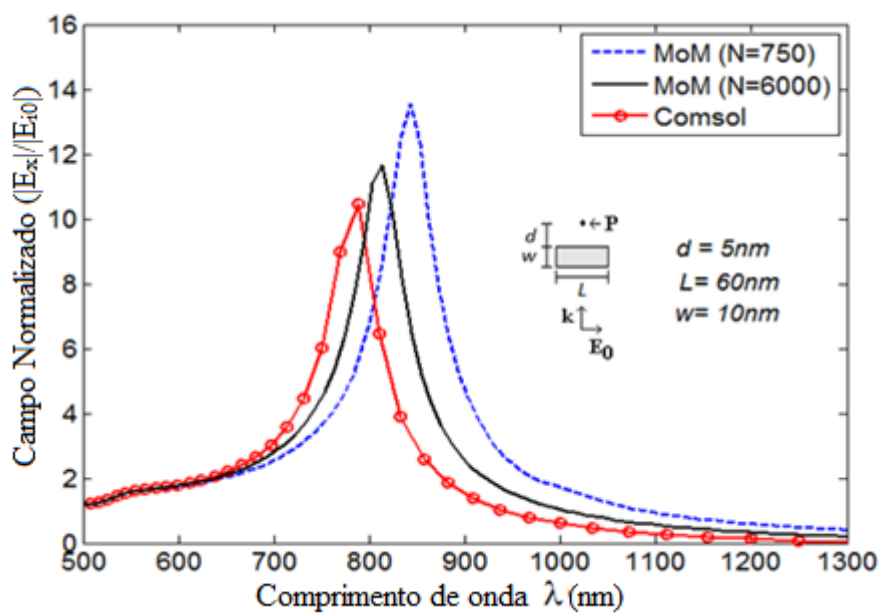


Fig. 3.8 – Resposta espectral do campo elétrico próximo e normalizado (component  $x$ ) no meio da nanobarra nos pontos ( $x=0, y=0, z= w/2+d$ ) com  $L = 60\text{nm}$ ,  $w = 10\text{nm}$ , e  $d = 5\text{nm}$ .

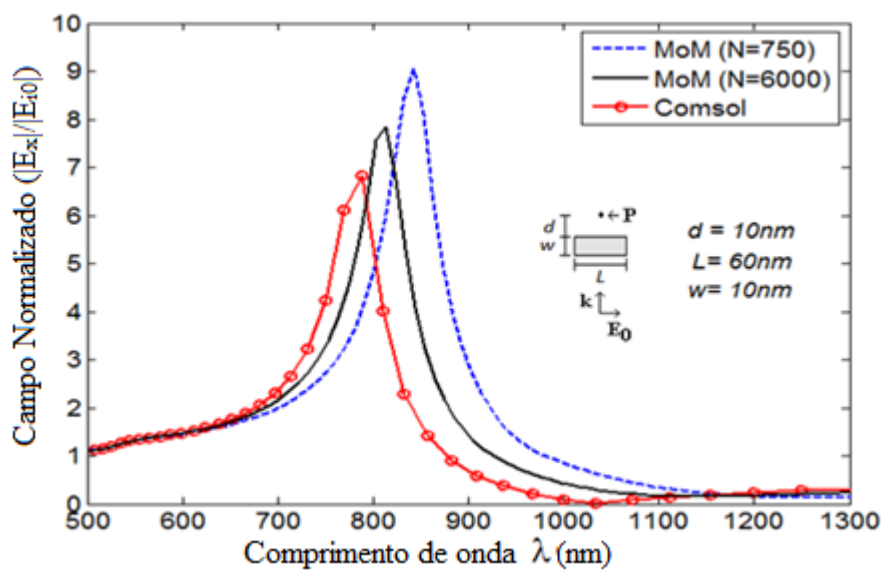


Fig. 3.9 – Resposta espectral do campo elétrico próximo e normalizado (component  $x$ ) no meio da nanobarra nos pontos ( $x=0, y=0, z= w/2+d$ ) com  $L = 60\text{nm}$ ,  $w = 10\text{nm}$ , e  $d = 10\text{nm}$ .

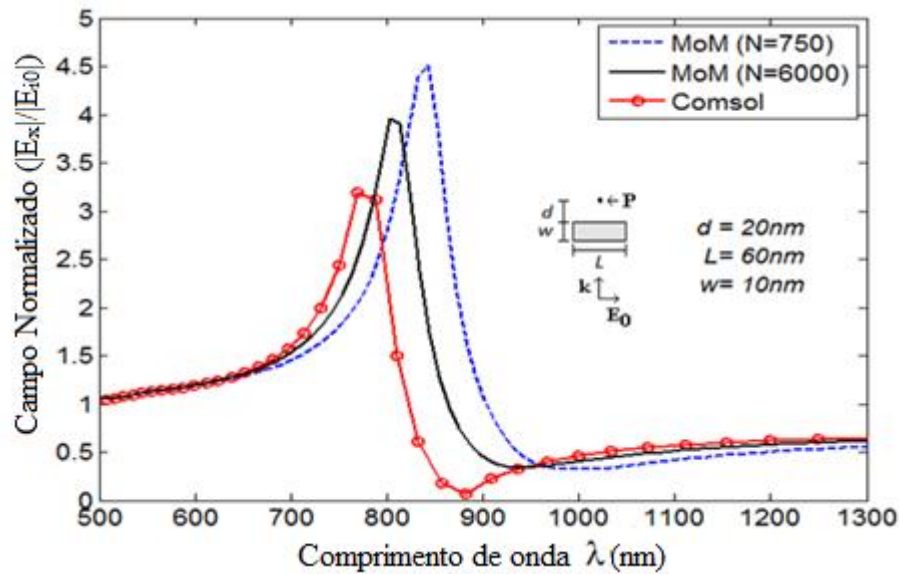


Fig. 3.10 – Resposta espectral do campo elétrico próximo e normalizado (componente  $x$ ) no meio da nanobarra nos pontos ( $x=0, y=0, z= w/2+d$ ) com  $L = 60\text{nm}$ ,  $w = 10\text{nm}$ , e  $d = 20\text{nm}$ .

A diferença entre os resultados das Figs. (4.7 - 4.9) e a referência se deve principalmente à quantidade de células utilizadas e à aproximação numérica para o método, que toma a célula como cúbica. No entanto, como visto anteriormente no Tópico 2.5, a forma cúbica da célula é apenas uma aproximação para uma esfera de raio  $a_n$ . Desta forma ter-se-ia melhores resultados de acordo com o aumento do número de células que representam o objeto, observados obviamente os limites computacionais disponíveis. Neste trabalho, o número de células é limitado pela capacidade de armazenamento de variáveis estáticas do compilador utilizado e da memória disponível no computador.

A demonstração de que o aumento do número de células da nanobarra melhora o resultado, ou seja, para  $N=6000$  com  $dx=dy=dz=1\times 10^{-9}\text{m}$ , nas Figs. (3.7 - 3-10) foi implementada em Matlab. Devido ao algoritmo implementado ter sido realizado estaticamente, ficamos limitados pela capacidade de armazenamento estático do compilador, problema não encontrado no Matlab. No entanto, a mesma formulação apresentada foi utilizada. Observa-se que o aumento do número de células faz a resposta tender a referência utilizada. Isto mostra que para altos valores de  $N$ , mesmo com aproximação por células cúbicas ao invés de esféricas, os resultados convergem para a referência.

# CÁPITULO 4

## 4 - CONCLUSÕES

Neste trabalho, foi apresentado o desenvolvimento de uma ferramenta computacional para análise do espalhamento eletromagnético de nanopartículas metálicas isoladas. O Método dos Momentos 3D foi utilizado para solução da equação integral do campo elétrico e o modelo de Lorentz-Drude foi utilizado para modelar a permissividade das nanopartículas. Baseado nesta modelagem, um algoritmo computacional em linguagem C foi desenvolvido. Para validar o algoritmo, foram analisados dois exemplos de nanopartículas de ouro: esfera e barra retangular, onde se obteve a resposta espacial e espectral do campo elétrico próximo.

Os resultados obtidos pelo algoritmo desenvolvido foram comparados com outros modelos e apresentaram boa concordância e convergência em relação aos resultados analíticos (Modelo de Mie) e aos resultados obtidos pelo software Comsol. Em relação à velocidade dos cálculos, o tempo de simulação do algoritmo proposto demorou em torno de quatorze minutos para cada frequência no caso da nanoesfera com  $N=1791$  e três minutos para cada frequência no caso da nanobarra com  $N=750$ . Observou-se um aumento considerável do tempo de simulação quando se aumentou o número de células da nanobarra para  $N=6000$ , resultando em aproximadamente vinte e três minutos por frequência. Entretanto, neste caso observamos uma melhor precisão e convergência com relação a simulação de referência do Comsol.

Propostas de trabalhos futuros que podem ser desenvolvidas com o auxílio do algoritmo apresentado aqui são: análise de nanoantenas isoladas com geometrias gerais, estudo de arranjos de nanoantenas, nanoantenas formadas por novos materiais, análise de nanoantenas não-homogêneas compostas por diferentes materiais, análise da interação entre nanoantenas com pontos quânticos ou moléculas, sendo que estes últimos podem ser modelados por dipolos infinitesimais, e nanoantenas em meios não-homogêneos (multicamadas). Outros trabalhos também podem ser desenvolvidos para melhorar o desempenho computacional do algoritmo, como por exemplo:

- Ampliar a capacidade de armazenamento matricial estático para o compilador C;
- Desenvolver o algoritmo em uma forma dinâmica, o que o tornaria mais complexo;
- Utilizar um algoritmo de inversão matricial mais eficiente.

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] L. Novotny, and B. Hecht, “Principles of Nano-Optics”. *New York: Cambridge*, 2006.
- [2] N. C. Lindquist, et. al., “Engineering metallic nanostructures for plasmonic and nanophotonics”. *Rep. Prog. Phys.*, vol. 75, p. 036501, 2012.
- [3] O. Sqalli, I. Utke, P. Hoffmann, and F. M. Weible, “Gold elliptical nanoantennas as probes for near field optical microscopy”. *J. of Appl. Physics*, vol. 92, pp. 1078-1083, July 2002.
- [4] D. W. Pohl, “Near field optics seen as an antenna problem”, “Near Field: Principles and Applications”. *The second Asia-Pacific Workshop on Near Field Optics*, Beijing, China, pp. 9-21, 1999.
- [5] K. Q. Costa, and V. Dmitriev, “Analysis of modified bowtie nanoantennas in the excitation and emission regimes”. *Prog. in Electro. Research B*, vol. 32, pp. 57-73, 2011.
- [6] P. Bharadwaj, et. al., “Optical antennas”. *Adv.in Opt. and Photon*, vol. 1, pp. 438-483, Aug. 2009.
- [7] L. Novotny, and N. V. Hulst, “Antennas for light”. *Nature Photon*, vol. 5, Feb. 2011.
- [8] P. Biagioni, J.-S. Huang, and B. Hecht, “Nanoantennas for visible and infrared radiation”. *Rep. Prog. Phys.*, vol. 75, pp. 2-32, 2012.
- [9] H. Wang, C. T. Chong, and L. Shi, “Optical antennas and their potential applications to 10 terabit/in<sup>2</sup> recording”. *Optical Data Storage Topical Meeting*, pp. 16 -18, May. 2009.
- [10] H. Wang, C. T. Chong, and L. Shi, “Optical antennas and their potential applications to 10 terabit/in<sup>2</sup> recording”. *Optical Data Storage Topical Meeting*, pp. 16-18, May. 2009.
- [11] H.A. Atwater and A. Alman “Plasmonics for Improved Photovoltaic Devices”; *Nature Materials*, p. 205, 2010.
- [12] T. A. El-Brolosy, et. al., “Shape and size dependence of the surface plasmon resonance of gold nanoparticles studied by photoacoustic technique”. *The European Physical Journal Special Topics*, vol. 153, pp.361-364, 2008.
- [13] C. Hrelescu, et. al., “Single gold nanostars enhance Raman scattering”. *Applied Physics Letters*, vol. 94, p.153113, 2009.
- [14] D. Cho, F. Wang, et. al., “Plasmon Resonances of strongly coupled nanodisks”. *Nano-Optoelectronics Workshop*, pp. 88-89, 2007.

- [15] V. Germain, et. al., “Silver nanodisks: size selection via centrifugation process and optical properties”. *The Journal of Chemical Physics*, vol. 122-124707, 2005.
- [16] W. Rechgerger, et. al., “Optical properties of two interacting gold nanoparticles”. *Optics Communications*, vol.220, pp. 137-141, 2003.
- [17] J. Neleyah, et. al., “Mapping surfaceplasmons on a single metallic nanoparticle”. *Nature Physics*, vol. 03, pp. 248-353, 2007.
- [18] D. W. Pohl, “Near field optics as an antenna problem”. *Near Field: Principles and Applications*, The second Asia-Pacific Workshop on Near Field Optics, Beijing, China October 20-23, pp. 9-21, 1999.
- [19] Andreas Hohenau, Alfred Leitner and Franz R. Aussenegg, “Near-Field and Far-Field Properties of Nanoparticle Arrays”. *Springer Series in Optical Sciences*, Chapter Two, p.12, 2007.
- [20] Palash Bharadwaj, Bradley Deutsch, and Lukas Novotny\*, “Optical Antenas”. *Optical Society of America*, p. 441, 2009.
- [21] Bert Hecht, Peter Mühlshlegela. et.al., “Prospects of Resonant Optical Antennas for Nano-Analysis”. *Chimia*, 60, no.11, pg. 765, 2006.
- [22] Ertugrul Cubukcu, Eric A. Kort, et. al., “Plasmonic laser antenna”, *Applied Physics Letters* 89, 093120, 29 Oxford St., Cambridge, Massachusetts 02138, 2006.
- [23] Francisco E. G. Guimarães, “Ótica de Campo Próximo e Super-Resolução à Luz do Critério de Rayleigh e do princípio da Incerteza de Heisenberg”, *Revista Brasileira Ensino de Física*, vol. 18, nº2, pp. 65-76, junho, 1996.
- [24] Constantine A. Balanis, “Advanced Engineering Eletromagnetics,”Jonh Wiley & Sons, pp. 327-328 e 257,1989.
- [25] Edward C. Jordan, “Ondas Eletromagnéticas e Sistemas Radiante”, 2º edição.
- [26] A. D. Rakic, A. B. Djuriscic, et. al., “Optical properties of metallic films for vertical cavity optoelectronic devices”, *Applied Optics*, vol. 37, no. 22, pp. 5271-5283,1998.
- [27] Weng Cho Chew, “Waves and Fields in Inhomogeneous Media”, pp. 481-483, 1995.
- [28] J. Van Bladel, “Some remarks on Grenns’s dyadic for infinite space” , IRE transactions on Antennas and Propagation, vol 09, n0. 06, pp.563-566, 1991.
- [29] Matthew N.O.Sadiku, Ph.D, “Numerical Techniques in Eletromagnetics, Second Edition”,CRC: pp. 350-360, 2001.
- [30] J. A. Stratton, *Electromagnetic Theory*, New York: McGraw-Hill, 1941.



# APÊNDICE I

## 1.1 – Equação de Onda para o Campo Elétrico

A análise realizada é baseada na análise de campo elétrico. Sabe-se que qualquer ponto do espaço para uma onda eletromagnética deve satisfazer as equações de Maxwell e, também, satisfazer a equação de onda. A equação de onda para o campo elétrico pode ser encontrada facilmente a partir das equações de Maxwell. Aplicando o rotacional nos dois lados da igualdade (2.5a), e substituindo (2.5b), tem-se

$$\nabla \times \nabla \times \bar{E}(\bar{r}) = -j\omega\mu[\nabla \times H(\bar{r})] = -j\omega\mu_0[j\omega\varepsilon\bar{E}(\bar{r}) + \bar{J}(\bar{r})], \quad (1)$$

onde, observa-se que

$$\nabla \times \nabla \times \bar{E}(\bar{r}) - \omega^2\mu\varepsilon\bar{E}(\bar{r}) = -j\omega\mu\bar{J}(\bar{r}). \quad (2)$$

Definindo,

$$k_0 = \omega\sqrt{\mu\varepsilon} = 2\pi/\lambda \quad (3)$$

onde  $k_0$  é a constante de fase para  $\mu = \mu_0$  e  $\varepsilon = \varepsilon_0$  e  $\lambda$  é o comprimento de onda, então

$$\nabla \times \nabla \times \bar{E}(\bar{r}) - k_0^2\bar{E}(\bar{r}) = -j\omega\mu\bar{J}(\bar{r}). \quad (4)$$

No entanto, a partir da identidade vetorial

$$\nabla \times \nabla \times \bar{E}(\bar{r}) = \nabla(\nabla \cdot \bar{E}(\bar{r})) - \nabla^2\bar{E}(\bar{r}), \quad (5)$$

obtem-se

$$\nabla[\nabla \cdot \bar{E}(\bar{r})] - \nabla^2\bar{E}(\bar{r}) - k_0^2\bar{E}(\bar{r}) = -j\omega\mu\bar{J}(\bar{r}). \quad (6)$$

Mas, o termo

$$\nabla[\nabla \cdot \bar{E}(\bar{r})] \quad (7)$$

é nulo. Então, como resultado a equação de onda para o campo elétrico é dada por

$$\nabla^2 \bar{E}(\bar{r}) + k_0^2 \bar{E}(\bar{r}) = j\omega\mu \bar{J}(\bar{r}). \quad (8)$$

A equação (8) é conhecida como a forma vetorial da equação de onda de Helmholtz.

## APÊNDICE II

### 1.1 – Formulação Geral da Função de Green

Em eletromagnetismo é comum o surgimento de equações diferenciais lineares não homogêneas do tipo

$$\ell(\bar{h}) = \bar{f}, \text{ sobre um domínio } V, \quad (1)$$

onde  $\bar{h} = \bar{h}(\bar{r})$  é uma função vetorial que é desconhecida no ponto de interesse, com um vetor posição  $\bar{r}(x, y, z)$ , e  $\bar{f} = \bar{f}(\bar{r}')$  é uma função vetorial conhecida no ponto de fonte, representado pelo vetor posição  $\bar{r}'(x', y', z')$  e  $\ell$  é um operador diferencial linear. A equação (1) é uma representação vetorial que a torna mais geral. Um operador basicamente transforma uma função em outra e é dito linear quando possui as seguintes características

$$\ell(\bar{f} + \bar{h}) = \ell\bar{f} + \ell\bar{h} \quad (2)$$

e

$$\ell(c\bar{f}) = c\ell\bar{f} \quad (3)$$

para qualquer número complexo  $c$  e para quaisquer funções  $\bar{f}$  e  $\bar{h}$ .

Através da resposta impulsiva do sistema de (1) encontra-se a função de Green específica do sistema em questão. Em termos matemáticos, têm-se

$$\ell\bar{G}(\bar{r}, \bar{r}') = \bar{\delta}(\bar{r}, \bar{r}'), \quad (4)$$

onde,  $\bar{G}(\bar{r}, \bar{r}')$  é a função de Green e  $\bar{\delta}(\bar{r}, \bar{r}')$  representa a função delta de Dirac, sendo,  $\bar{r} \neq \bar{r}'$ , pois em  $\bar{r} = \bar{r}'$  existe uma singularidade.

A função de Green  $\bar{G}(\bar{r}, \bar{r}')$  descreve a resposta do sistema físico à função delta de Dirac, que representa um impulso aplicado no ponto  $\bar{r}'$  (de magnitude unitária). Fisicamente, em eletromagnetismo,  $\bar{G}(\bar{r}, \bar{r}')$  representa o campo elétrico em  $\bar{r}$  devido a uma fonte pontual de corrente em  $\bar{r}'$ . A função de Green corresponde ao operador  $\ell$  como uma solução da equação não homogênea (1), basicamente, é a resposta do meio para uma fonte de corrente

pontual que possibilita, com as devidas equações eletromagnéticas, determinar o campo espalhado no espaço que circunda a fonte, ou seja, no espaço maior que um círculo com raio  $\epsilon$  tendendo a zero Fig. 2.4. Basicamente,  $\bar{h}$  significaria a resposta do sistema devido um fonte qualquer  $\bar{f}$ , ou seja, para se determinar a resposta do sistema regido por (4) seria bastante o conhecimento de  $\bar{G}$ , assim se determinaria a resposta  $\bar{h}$  do sistema para qualquer fonte  $\bar{f}$ .

A solução de (1) não pode ser, em geral, representada diretamente por uma função de Green escalar  $G(\bar{r}, \bar{r}')$ . Pois,

$$\bar{h}(\bar{r}) \neq \int_V \bar{f}(\bar{r}') G(\bar{r}, \bar{r}') dv'. \quad (5)$$

Ou seja, a igualdade de (5) nem sempre é verdadeira, pois, caso fosse, implicaria que uma fonte  $\bar{f}$ , paralela a um dado eixo, produzindo uma resposta paralela  $\bar{h}$ , no mesmo eixo. O que, em geral, não é verdade.

Desta forma, uma representação mais apropriada para (5), em coordenadas cartesianas, é dada para cada componente por [24]

$$h_x(\bar{r}) = \int_V \left[ f_x(\bar{r}') G_{xx}(\bar{r}, \bar{r}') + f_y(\bar{r}') G_{xy}(\bar{r}, \bar{r}') + f_z(\bar{r}') G_{xz}(\bar{r}, \bar{r}') \right] dv', \quad (6a)$$

$$h_y(\bar{r}) = \int_V \left[ f_x(\bar{r}') G_{yx}(\bar{r}, \bar{r}') + f_y(\bar{r}') G_{yy}(\bar{r}, \bar{r}') + f_z(\bar{r}') G_{yz}(\bar{r}, \bar{r}') \right] dv', \quad (6b)$$

e

$$h_z(\bar{r}) = \int_V \left[ f_x(\bar{r}') G_{zx}(\bar{r}, \bar{r}') + f_y(\bar{r}') G_{zy}(\bar{r}, \bar{r}') + f_z(\bar{r}') G_{zz}(\bar{r}, \bar{r}') \right] dv'. \quad (6c)$$

Em uma forma mais compacta (6) pode ser representado por

$$\bar{h}(\bar{r}) = \int_V \left[ f_x(\bar{r}') \bar{G}_x(\bar{r}, \bar{r}') + f_y(\bar{r}') \bar{G}_y(\bar{r}, \bar{r}') + f_z(\bar{r}') \bar{G}_z(\bar{r}, \bar{r}') \right] dv', \quad (7)$$

onde,

$$\bar{G}_x(\bar{r}, \bar{r}') = G_{xx}(\bar{r}, \bar{r}') \bar{a}_x + G_{yx}(\bar{r}, \bar{r}') \bar{a}_y + G_{zx}(\bar{r}, \bar{r}') \bar{a}_z, \quad (8a)$$

$$\bar{G}_y(\bar{r}, \bar{r}') = G_{xy}(\bar{r}, \bar{r}') \bar{a}_x + G_{yy}(\bar{r}, \bar{r}') \bar{a}_y + G_{zy}(\bar{r}, \bar{r}') \bar{a}_z, \quad (8b)$$

$$\bar{G}_z(\bar{r}, \bar{r}') = G_{xz}(\bar{r}, \bar{r}') \bar{a}_x + G_{yz}(\bar{r}, \bar{r}') \bar{a}_y + G_{zz}(\bar{r}, \bar{r}') \bar{a}_z. \quad (8c)$$

Como  $\bar{h}(\bar{r})$  é um vetor, e a fonte  $f(\bar{r}')$  também é um vetor, então a função de Green deve ser uma díade  $\bar{G}(\bar{r}, \bar{r}')$ , que opera em um vetor dando origem a outro vetor, e não apenas uma função escalar. Então, pode-se representar  $\bar{h}(\bar{r})$  através de

$$\bar{h}(\bar{r}) = \int_V f(\bar{r}') \bar{G}(\bar{r}, \bar{r}') dv', \quad (9)$$

onde,

$$\bar{G}(\bar{r}, \bar{r}') = \bar{G}_x(\bar{r}, \bar{r}') \bar{a}_x + \bar{G}_y(\bar{r}, \bar{r}') \bar{a}_y + \bar{G}_z(\bar{r}, \bar{r}') \bar{a}_z \quad (10)$$

é conhecida como função de Green na forma diádica.

## APÊNDICE III

### 1.1 – O Algoritmo em Linguagem C

A linguagem C é robusta e rápida por lidar diretamente com posições de memória além de possuir alta versatilidade. O método MoM é estritamente realizado no domínio complexo, de modo que a familiarização com a biblioteca padrão “complex.h” se faz necessária para um melhor entendimento do mesmo. Esta biblioteca é reconhecida diretamente pelo compilador padrão gcc para diversas IDEs de compilação.

Para análise feita neste trabalho foi criado o algoritmo a seguir, mostrado integralmente para o caso específico da resposta ressonante da nanobarra e nanoesfera, respectivamente. Dado em quatro passos, como explicado no Tópico 3.1. São inseridas informações sobre o algoritmo e o método no decorrer do programa para melhorar compreensão do mesmo.

### 1.2 – Caso da Nanobarra

```
/******PRIMEIRO PASSO******/
```

Inicia-se o algoritmo com a definição das bibliotecas padrões utilizadas e de uma biblioteca para eliminação por Gauss-Siedel para números complexos "cgauss\_elimination.h" :

```
#include <math.h>
#include <stdio.h>
#include <stdlib.h>
#include <complex.h>
#include "cgauss_elimination.h"
/*Após a inserção das bibliotecas é definida as constantes e variáveis do programa, sendo
elas: */
/*Variáveis globais do algoritmo*/
/*-----*/
#define Nx 30 //quantidade de pontos na direção x
#define Ny 5 //quantidade de pontos na direção y
#define Nz 5 //quantidade de pontos na direção z
```

```

#define V 750 //V = Nx*Ny*Nz;           //volume da região de análise
#define Nf 150                             //quantidade de passos de  $\lambda$ 
#define Nt 750                             //Numero de células do objeto Nt = V
#define Nm 2250                             //Três vezes Nt
#define Np 5                               //pontos de análise
/*-----*/
float P[V][3];                             //pontos i,j,k
double Vn[V],An[V];                       //variáveis para MoM
double complex E[V][3][Nf], Elinha[Nm], Exx[Np], Eyy[Np], Ezz[Np]; //para o campo elet
float complex Exp0[Nf], Exp1[Nf], Exp2[Nf],m Exp3[Nf], Exp4 [Nf]; // pontos de análise
double complex Gi[Nm],Gi_Copy[Nm],Gs[Nm],G[Nm][Nm],G_Copy[Nm][Nm];
float Pm[Np][3], float zx[Np];zy[Np],zz[Np];

/*****Início do programa*****/
main ()
{
/*Definição variáveis locais*/
int Nf1= Nf-1;                             //N-1 posições de memória de  $\lambda$ 
int nx,ny,nz;                             //tamanho real do array no eixo N-1
//Contadores
int v;
int i,j,k,f;
int p,q,n,m;
//Campo elétrico
float Ei0;                                 //amplitude da onda incidente
float pi, c;                               //constantes físicas
float m0, e0;                             //permissividade e permeabilidade
double Lambda;                            // comprimentos de onda
//Geometria Da barra
float Lx,Ly,Lz,Hz;                         //comprimento do dominio em x, y, e z
float dx,dy,dz;                           //discretização espacial
float Px, Py, Pz;                         //pontos nos eixos

```

```

//Espaça linearmente o comprimento de onda
int Ls,Li; //limite superior do comprimento de onda analisado
double L; //limite inferior do comprimento de onda analisado
double dNL; //tamanho discretização do comprimento de onda
//Modelo de Lorentz-Drude
double lambda; // constantes
double Gama;
double gama; // C é case sensitive, ou seja, diferencia maiúsculas de
minúsculas
double W0,Wp,Wp1;
complex double a,b;
complex double er1,e1;
//Método dos Momentos
int x1;
int x2;
int NCELL;
float cosp,cosq;
double W; //frequencia angular
double K; //vetor de onda (deslocamento de fase)
double complex C3,C4,C5; //facilitadores de expressões
//Variáveis do método dos momentos dependentes de Nt
int Col,Lin,Alt;
float Dist;
float Amn;
double complex tau,C,C1,C2;

//*****Cria arquivos: arquivo.dat*****//
FILE* aMatrizExp0=fopen("Exp0.dat","w");
rewind(aMatrizExp0);
FILE* aMatrizExp1=fopen("Exp1.dat","w");
rewind(aMatrizExp1);
FILE* aMatrizExp2=fopen("Exp2.dat","w");
rewind(aMatrizExp2);

```



```

FILE* aMatrizExp3=fopen("Exp3.dat","w");
rewind(aMatrizExp3);
FILE* aMatrizExp4=fopen("Exp4.dat","w");
rewind(aMatrizExp4);
/*****Função delta de Dirak*****/
int delta(int m,int n){
    if (n==m)return 1;
    else
    return 0;
} //fim da função
/*****Inicialização de constantes*****/
Ei0 = 1; //amplitude da onda incidente
pi = 3.141592653589793; //constante
m0 = 4*pi*1e-7; //permissividade no vácuo
e0 = 8.85418782e-12; //permeabilidade no vácuo
c = 1/sqrt(e0*m0); //velocidade da luz
/*-----*/
Ls = 1300; //limite superior de  $\lambda$ 
Li = 500; //limite inferior de  $\lambda$ 
L = (Ls-Li); //tamanho total
dNL = (L/Nf1); //discretização do tamanho total
/*----- */
lambda = 450e-9;
Gama = 1.075e14;
gama = 9e14;
W0 = 2*pi*c/lambda;
Wp = 13.8e15; //frequência de plasma 1
Wp1 = 45e14; //frequência de plasma 2
f = 0; //inicializa o primeiro comprimento de onda
/*****Tamanho geométrico da Barra*****/
Lx = 60e-9; //comprimento total no eixo x do objeto
Ly = 10e-9; //comprimento total no eixo y do objeto
dx = Lx/Nx; //tamanho da célula x

```

```

dy  = Ly/Ny;           //tamanho da célula y
dz  = dx;             //tamanho da célula z
float z0,z1,z2,z3,z4; //pontos de análise espectral
z0 = 5e-9;
z1 = 10e-9 + 1e-9;
z2 = 20e-9 + 2e-9;
z3 = 40e-9 + 3e-9;
z4 = 80e-9 + 4e-9;
/*Coordenadas do eixo x*/
Pm[0][0] = z0;
Pm[1][0] = z1;
Pm[2][0] = z2;
Pm[3][0] = z3;
Pm[4][0] = z4;
/*Coordenada do eixo y*/
Pm[0][1] = 0.0;
Pm[1][1] = 0.0;
Pm[2][1] = 0.0;
Pm[3][1] = 0.0;
Pm[4][1] = 0.0;
/*Coordenada do eixo z*/
Pm[0][2] = 0.0;
Pm[1][2] = 0.0;
Pm[2][2] = 0.0;
Pm[3][2] = 0.0;
Pm[4][2] = 0.0;

/*****Método dos Momentos (Campo no interior do corpo)*****/
for (f=0; f<=Nf1; f++){ //inicia loop da quantidade comprimentos de onda analisados
    Lambda =Li + f*dNL;
    Lambda = 1.0e-9*Lambda;
    printf("\n PASSO %d de %d COM LAMBDA = %g {\n",f,Nf-1,Lambda);
    fprintf(aMatrizLbda,"\n%e",Lambda);
}

```

```

W = 2*pi*c/Lambda;
K = sqrt(m0*e0)*W;
a = pow(W,2)- Gama*W*I;
b = pow(W0,2.0)- pow(W,2.0)+ gama*W*I;
er1= 1.0 - pow(Wp,2)/a+ pow(Wp1,2)/b + 6.0;
e1=e0*er1;
tau= (e1-e0)*W*I;
/*****CRIA A GEOMETRIA DO DA BARRA QUE É O PROPRIO DOMINIO*****/
q=-1;
for (k=0; k<Nz; k++){
    for (j=0; j<Ny; j++){
        for (i=0; i<Nx; i++){
            Px = (-0.5*Nx+i+0.5)*dx; //Seleciona o centro das células
            Py = (-0.5*Ny+j+0.5)*dy; //Seleciona o centro das células
            Pz = (-0.5*Nz+k+0.5)*dz; //Seleciona o centro das células
            q=q+1;
            P[q][0]=Px;
            P[q][1]=Py;
            P[q][2]=Pz;
            E[q][0][f]= Ei0*cexp(-I*P[q][2]*K); //Excitação onda plana comp. x
            E[q][1][f]=0.0; //Excitação onda plana comp. y
            E[q][2][f]=0.0; //Excitação onda plana comp. z
            Vn[q] = dx*dy*dz;
            An[q] = pow((3*Vn[q]/(4*pi)),0.333333333333);
            NCELL = q;
        } } } //i,j,k
printf("\n Geometria Ok!\n");
NCELL = NCELL + 1;
printf("\n Numero de Celulas no Interior da Antena = %d\n",NCELL);
printf("\n Iniciado Calculo de G e Gi internos ao corpo...\n");

/*****SEGUNDO PASSO*****/
C = -I*W*m0*K;

```

```

C1= -2*I*W*m0/(3*pow(K,2));
C2= 3*e0*I*W;
for(p=0; p<3; p++){
    for(q=0; q<3; q++){
        x1=p*Nt-1;
        for(m=0; m<Nt; m++){
            x1=x1+1;
            x2=q*Nt-1;
Gi[x1]= -1*creal(E[m][p][f])+I*cimag(E[m][p][f]); //Unidimensionaliza 3 componentes
        for(n=0; n<Nt; n++){ //Varre todas as células
            x2=x2+1;
            if (n==m){ //Equação (3.37)
                C3=I*K*An[n];
                C4= tau/C2;
                G[x1][x2] = delta(p,q)*(C1*tau*((1+C3)*cexp(-C3)-1)-(1+C4));
            } //if
            else{ //Equação (3.36)
Dist = sqrt(pow(P[m][0]-P[n][0],2) + pow(P[m][1]-P[n][1],2) + pow(P[m][2]-P[n][2],2));
                Amn = K*Dist;
                C3 = (C*tau*Vn[n]*cexp(-I*Amn))/(4*pi*pow(Amn,3));
                cosp =(P[m][p]-P[n][p])/Dist;
                cosq =(P[m][q]-P[n][q])/Dist;
                G[x1][x2] = C3*((pow(Amn,2)-1-I*Amn)*delta(p,q)+cosp*cosq*(3-
                    pow(Amn,2)+3*I*Amn));
            } //else
        } //n
    } //m
} //q
} // p
Printf("\n G e Gi encontrados!\n");
For (i=0; i < Nm; i++) {
    Gi_Copy[i] = Gi[i];
    for (j = 0; j < Nm; j++) G_Copy[i][j] = G[i][j];
}

```

```

}

printf("\n Iniciado Eliminacao de Gauss...\n");
cGaussian_Elimination(&G_Copy[0][0], Nm, Gi_Copy);
// Gi_Copy contém vetor campo Elétrico interno ao corpo
printf("\n E no interior da antena encontrado!\n");
/*****TERCEIRO PASSO*****/
printf("\n Iniciando Cauculo de G e Gi pontuais...\n");
/*excitação apenas dos pontos de análise fora do corpo com a onda incidente
for (p=0; p<3; p++){
    for (m=0; m<Np; m++){
        if(p==0){
            E[m][p][f]= Ei0*cexp(-I*Pm[m][2]*K);
        } else {
            E[m][p][f]= 0.0;
        }
    } //p e m
}
/*Calculo do novo G e Gi externos ao corpo
for(p=0; p<3; p++){
    for(q=0; q<3; q++){
        x1=p*Np-1;
        for(m=0; m<Np; m++){
            x1=x1+1;
            x2=q*Nt-1;
            if(p==0){
                Gi[x1] = creal(E[m][p][f])-I*cimag(E[m][p][f]); //unidimensionalização
            } else {
                E[x1][p][f]=0.0;
                Gi[x1] = 0.0;
            }
            for(n=0;n<Nt;n++){
                x2=x2+1;
                Dist = sqrt(pow(Pm[m][0]-P[n][0],2) + pow(Pm[m][1]-P[n][1],2) +

```

```

        pow(Pm[m][2]-P[n][2],2));
    Amn = K*Dist;
    C3 = (C*tau*Vn[n]*cexp(-1*I*Amn))/(4*pi*pow(Amn,3));
    cosp =(Pm[m][p]-P[n][p])/Dist;
    cosq =(Pm[m][q]-P[n][q])/Dist;
    G[x1][x2] = C3*((pow(Amn,2)-1-I*Amn)*delta(p,q)+
        cosp*cosq*(3-pow(Amn,2)+3*I*Amn)); // Equação 4.10
    }}//m , n
}} // p e q
printf("\n G e Gi pontuais encontrados!\n");

/*****QUARTO PASSO*****/

printf("\n Iniciado Calculo de E espalhado...\n");
for (i = 0; i < Nm; i++) {
    for (j = Gs[i] = 0; j < Nm; j++)
        Gs[i]= Gs[i] + G[i][j]* Gi_Copy[j];
    }
for (i = 0; i < Nm; i++) {
    Elinha[i] = Gs[i] + Gi[i];
    }

/*****ESPECTRO NOS PONTOS DETERMINADOS*****/

Exp0[f] = Elinha[0];
fprintf(aMatrizExp0,"\n%e",cabs(Exp0[f])/Ei0);
Exp1[f] = Elinha[1];
fprintf(aMatrizExp1,"\n%e",cabs(Exp1[f])/Ei0);
Exp2[f] = Elinha[2];
fprintf(aMatrizExp2,"\n%e",cabs(Exp2[f])/Ei0);
Exp3[f] = Elinha[3];
fprintf(aMatrizExp3,"\n%e",cabs(Exp3[f])/Ei0);
Exp4[f] = Elinha[4];
fprintf(aMatrizExp4,"\n%e",cabs(Exp4[f])/Ei0);
} //f final do loop de comprimento de onda (frequência)

```

```

printf("\n E espalhado encontrado!}\n\n",f);
printf("\nPROGRAMA COMPLETO\n");
close(aMatrizExp0);
close(aMatrizExp1);
close(aMatrizExp2);
close(aMatrizExp3);
close(aMatrizExp4);
system ("PAUSE");
return(0);
} //main

```

### 1.3 – Caso da Nanoesfera

```

#include <math.h>
#include <stdio.h>
#include <stdlib.h> //para inclusão do system("PAUSE");
#include <complex.h>
#include "cgauss_elimination.h"
//ESTES VALORES DEVEM SER IGUAIS AO DO PROGRAMA DIMENSÃO.C
#define Nx 15 //quantidade de pontos na direção x
#define Ny 15 //quantidade de pontos na direção y
#define Nz 15 //quantidade de pontos na direção z
#define V 3375 //V = im*jm*km; //volume total da região de análise
#define Nf 100 //100 //quantidade de espaçamento na frequência
#define Nt 1791 //numero de células do objeto
#define Nm 5373 //1791*3
#define Np 7 //número de pontos para calculo da ressonância
float P[V][3];
double Vn[V],An[V];
double complex E[V][3][Nf],Elinha[Nm],Exx[Np],Eyy[Np],Ezz[Np];
double complex Exp1[Nf],Exp2[Nf],Exp3[Nf],Exp4[Nf],Exp5[Nf],Exp6[Nf],Exp7[Nf];
double complex Gi[Nm],Gi_Copy[Nm],Gs[Nm],G[Nm][Nm],G_Copy[Nm][Nm];
float Pm[Np][3];

```

```

//float zx[Np];zy[Np],zz[Np];

main ()
{
/****DEFINIÇÃO DAS VARIÁVEIS LOCAIS*****/

int Nf1= Nf-1;           //N-1 posições de memória contando com a posição de nº 0
int nx,ny,nz;           //tamanho real do array no eixo N-1
//Contadores
int v;                  //contadores
int i,j,k,f;           //contadores
int p,q,n,m;           //contadores
//Campo elétrico
float Ei0;              //amplitude da onda incidente
float pi, c;           //constantes físicas
float m0, e0;           //permissividade e permeabilidade
double Lambda;         //vetor L (comprimentos de onda) L maiusculo
//Geometria do cilindro
float r;                //raio da esfera
float Lx,Ly,Lz,HZ;     //comprimento em metros do dominio em x,y, e z
float dx,dy,dz;        //discretização espacial
float Px, Py, Pz;
//Espaçamento Linear do Comprimento de Onda
int Ls,Li;
double L;
double dNL;
//Lorentz Drude
double lambda;
double Gama;
double gama;
double W0,Wp,Wp1;
complex double a,b;
complex double er1,e1;

```



```

//Método dos Momentos
int x1;
int x2;
int NCELL;
float cosp,cosq;
double W; //vetor de frequencias angulares
double K; //vetor de onda (deslocamento de fase)
double complex C3,C4,C5;
//Variáveis do método dos momentos dependentes de Nt
int Col,Lin,Alt;
float Dist;
float Amn;
double complex tau,C,C1,C2;
//*****CRIAR ARQUIVOS .DAT*****//
FILE* aMatrizExp1=fopen("Exp1.dat","w");
rewind(aMatrizExp1);
FILE* aMatrizExp2=fopen("Exp2.dat","w");
rewind(aMatrizExp2);
FILE* aMatrizExp3=fopen("Exp3.dat","w");
rewind(aMatrizExp3);
FILE* aMatrizExp4=fopen("Exp4.dat","w");
rewind(aMatrizExp4);
FILE* aMatrizExp5=fopen("Exp5.dat","w");
rewind(aMatrizExp5);
FILE* aMatrizExp6=fopen("Exp6.dat","w");
rewind(aMatrizExp6);
FILE* aMatrizExp7=fopen("Exp7.dat","w");
rewind(aMatrizExp7);
FILE* aMatrizLbda=fopen("Lambda.dat","w");
rewind(aMatrizLbda);
//FILE* aMatrizExx=fopen("Exx.dat","w"); // Quando se calcula variação espacial
//rewind(aMatrizExx);
//FILE* aMatrizPxx=fopen("Pxx.dat","w");

```

```

//rewind(aMatrizPxx);
//FILE* aMatrizEyy=fopen("Eyy.dat","w");
//rewind(aMatrizEyy);
//FILE* aMatrizPyy=fopen("Pyy.dat","w");
//rewind(aMatrizPyy);
//FILE* aMatrizEzz=fopen("Ezz.dat","w");
//rewind(aMatrizEzz);
//FILE* aMatrizPzz=fopen("Pzz.dat","w");
//rewind(aMatrizPzz);
/*****DELTA DE DIRAK*****/
int delta(int m,int n){
    if (n==m)return 1;
    else
    return 0;
}//função
/*****INICIALIZAÇÃO DE CONSTANTES*****/
Ei0 = 1; //amplitude da onda incidente
pi = 3.141592653589793; //constante
m0 = 4*pi*1e-7; //permissividade no vácuo
e0 = 8.85418782e-12; //permeabilidade no vácuo
c = 1/sqrt(e0*m0); //velocidade da luz
Ls = 1000; //limite superior
Li = 500; //limite inferior
L = (Ls-Li); //tamanho total
dNL = (L/Nf1); //partição do tamanho total
lambda = 450e-9;
Gama = 1.075e14;
gama = 9e14;
W0 = 2*pi*c/lambda;
Wp = 13.8e15;
Wp1 = 45e14;
f = 0;

```

```
/**VARIÁVEIS E DIMENSÕES GEOMETRIAS DE UMA CILINDRO DE RAIOS R*****/
```

```
r = 60e-9; // L/2
Lx = 2*r; //comprimento total no eixo x da esfera
Ly = 2*r; //comprimento total no eixo y da esfera
dx = Lx/Nx; //tamanho da célula x
dy = Ly/Ny; //tamanho da célula y
dz = dx; //tamanho da célula z
float H1;
H1 = dz*Nz;
```

```
/*******CALCULO EM PONTOS ESPECÍFICOS*****//
```

```
/* for (i=0;i<(Np);i++){ // utilizado para cálculos de variação espacial, em um f específico
    if(i < Np/2){
        zx[i] = -(Np/2-i)*dx+0.5*dx;
        fprintf(aMatrizPxx,"\n %g",-zx[i]);
        Pm[i][0] = zx[i];
        Pm[i][1] = 0.0;
        Pm[i][2] = 0.0;
    } else {
        zx[i] = (i-(Np-1)/2)*dx+0.5*dx;
        fprintf(aMatrizPxx,"\n %g",-zx[i]);
        Pm[i][0] = zx[i];
        Pm[i][1] = 0.0;
        Pm[i][2] = 0.0;
    }
}*/for*/
float z1,z2,z3,z4,z5,z6,z7;
z1 = r+1e-9;
z2 = r+5e-9;
z3 = r+10e-9;
z4 = r+20e-9;
z5 = r+40e-9;
z6 = r+80e-9;
```

```

z7 = r+160e-9;
Pm[0][0] = z1;
Pm[1][0] = z2;
Pm[2][0] = z3;
Pm[3][0] = z4;
Pm[4][0] = z5;
Pm[5][0] = z6;
Pm[6][0] = z7;
Pm[0][1] = 0.0;
Pm[1][1] = 0.0;
Pm[2][1] = 0.0;
Pm[3][1] = 0.0;
Pm[4][1] = 0.0;
Pm[5][1] = 0.0;
Pm[6][1] = 0.0;
Pm[0][2] = 0.0;
Pm[1][2] = 0.0;
Pm[2][2] = 0.0;
Pm[3][2] = 0.0;
Pm[4][2] = 0.0;
Pm[5][2] = 0.0;
Pm[6][2] = 0.0;
/**MÉTODO DOS MOMENTOS CAMPO INDUZIDO NO INTERIOR DO CORPO***/
for (f=0; f<=Nf1; f++){
Lambda =Li + f*dNL;
Lambda = 1.0e-9*Lambda;
printf("\n PASSO %d de %d COM LAMBDA = %g {\n",f,Nf-1,Lambda);
fprintf(aMatrizLbda,"\n%e",Lambda);
W = 2*pi*c/Lambda;
K = sqrt(m0*e0)*W;
a = pow(W,2)- Gama*W*I;
b = pow(W0,2.0)- pow(W,2.0)+ gama*W*I;
er1= 1.0 - pow(Wp,2)/a+ pow(Wp1,2)/b + 6.0;

```

```

e1=e0*er1;
tau= (e1-e0)*W*I;
q=-1;
for (k=0; k<Nz; k++){
    for (j=0; j<Ny; j++){
        for (i=0; i<Nx; i++){
            Px = (-0.5*Nx+i+0.5)*dx;          //Hz=im*dz;
            Py = (-0.5*Ny+j+0.5)*dy;
            Pz = (-0.5*Nz+k+0.5)*dz;
            if (sqrt(pow(Px,2) + pow(Py,2) + pow(Pz,2)) < r){
                q=q+1;
                P[q][0]=Px;
                P[q][1]=Py;
                P[q][2]=Pz;
                E[q][0][f]= Ei0*cexp(-I*P[q][2]*K);
                E[q][1][f]=0.0;
                E[q][2][f]=0.0;
                Vn[q]   = dx*dy*dz;
                An[q]   = pow((3*Vn[q]/(4*pi)),0.3333333333333333);
                NCELL = q;
            }//if
        } } //i,j,k

printf("\n Geometria Ok!\n");

NCELL = NCELL + 1;
printf("\n Numero de Celulas no Interior da Antena = %d\n",NCELL);

//*****CAUCULO DE G E Gi*****//

printf("\n Iniciado Calculo de G e Gi internos ao corpo...\n");

C = -I*W*m0*K;

```

```

C1= -2*I*W*m0/(3*pow(K,2));
C2= 3*e0*I*W;
for(p=0; p<3; p++){
    for(q=0; q<3; q++){
        x1=p*Nt-1;
        for(m=0; m<Nt; m++){
            x1=x1+1;
            x2=q*Nt-1;
            Gi[x1]= -1*creal(E[m][p][f])+I*cimag(E[m][p][f]);
        }
        for(n=0; n<Nt; n++){
            x2=x2+1;
            if (n==m){
                C3=I*K*An[n];
                C4= tau/C2;
                G[x1][x2] = delta(p,q)*(C1*tau*((1+C3)*cexp(-C3)-1)-(1+C4));
            } //if
            else{
                Dist = sqrt(pow(P[m][0]-P[n][0],2) + pow(P[m][1]-P[n][1],2) + pow(P[m][2]-
P[n][2],2));
                Amn = K*Dist;
                C3 = (C*tau*Vn[n]*cexp(-I*Amn))/(4*pi*pow(Amn,3));
                cosp =(P[m][p]-P[n][p])/Dist;
                cosq =(P[m][q]-P[n][q])/Dist;
                G[x1][x2] = C3*((pow(Amn,2)-1-I*Amn)*delta(p,q)+cosp*cosq*(3-
pow(Amn,2)+3*I*Amn));
            } //else
        } //n
    } //m
} //q
} // p

printf("\n G e Gi encontrados!\n");

```

```

for (i=0; i < Nm; i++) {
    Gi_Copy[i] = Gi[i];
    for (j = 0; j < Nm; j++) G_Copy[i][j] = G[i][j];
}
printf("\n Iniciado Eliminacao de Gauss...\n");
cGaussian_Elimination(&G_Copy[0][0], Nm, Gi_Copy);
printf("\n E no interior da antena encontrado!\n");

```

\*\*\*\*\*CAUCULO DE G E Gp PONTUALMENTE\*\*\*\*\*

```

printf("\n Iniciando Cauculo de G e Gi pontuais...\n");
for (p=0; p<3; p++){
    for (m=0; m<Np; m++){
        if(p==0){
            E[m][p][f]= Ei0*cexp(-I*Pm[m][2]*K);
        } else {
            E[m][p][f]= 0.0;
        }
    }
}

```

```

for(p=0; p<3; p++){
    for(q=0; q<3; q++){
        x1=p*Np-1;
        for(m=0; m<Np; m++){
            x1=x1+1;
            x2=q*Nt-1;
            if(p==0){
                Gi[x1] = creal(E[m][p][f])-I*cimag(E[m][p][f]);
            } else {
                E[x1][p][f]=0.0;
                Gi[x1] = 0.0;
            }
        }
        for(n=0;n<Nt;n++){

```

```

x2=x2+1;
Dist = sqrt(pow(Pm[m][0]-P[n][0],2) + pow(Pm[m][1]-P[n][1],2) + pow(Pm[m][2]-
P[n][2],2));
Amn = K*Dist;
C3 = (C*tau*Vn[n]*cexp(-1*I*Amn))/(4*pi*pow(Amn,3));
cosp =(Pm[m][p]-P[n][p])/Dist;
cosq =(Pm[m][q]-P[n][q])/Dist;
G[x1][x2]      =      C3*((pow(Amn,2)-1-I*Amn)*delta(p,q)+cosp*cosq*(3-
pow(Amn,2)+3*I*Amn));

    }}//m , n

}} // p e q

printf("\n G e Gi pontuais encontrados!\n");

printf("\n Iniciado Calculo de E espalhado...\n");
for (i = 0; i < Nm; i++) {
    for (j = Gs[i] = 0; j < Nm; j++)
        Gs[i]= Gs[i] + G[i][j]* Gi_Copy[j];
}

for (i = 0; i < Nm; i++) {
    Elinha[i] = Gs[i] + Gi[i];
}

/*for (i=0;i<Np;i++){
    Exx[i] = Elinha[i];
    fprintf(aMatrizExx,"\n%e",cabs(Exx[i])/Ei0);
}*/

/*for (i=0;i<Np;i++){
    Eyy[i] = Elinha[i];

```



```

    fprintf(aMatrizEyy, "\n%e", cabs(Eyy[i])/Ei0);
} //for*/

/*for (i=0; i<Np; i++){
    Ezz[i] = Elinha[i];
    fprintf(aMatrizEzz, "\n%e", cabs(Ezz[i])/Ei0);
} //for*/

Exp1[f] = Elinha[0];
fprintf(aMatrizExp1, "\n%e", cabs(Exp1[f])/Ei0);
Exp2[f] = Elinha[1];
fprintf(aMatrizExp2, "\n%e", cabs(Exp2[f])/Ei0);
Exp3[f] = Elinha[2];
fprintf(aMatrizExp3, "\n%e", cabs(Exp3[f])/Ei0);
Exp4[f] = Elinha[3];
fprintf(aMatrizExp4, "\n%e", cabs(Exp4[f])/Ei0);
Exp5[f] = Elinha[4];
fprintf(aMatrizExp5, "\n%e", cabs(Exp5[f])/Ei0);
Exp6[f] = Elinha[5];
fprintf(aMatrizExp6, "\n%e", cabs(Exp6[f])/Ei0);
Exp7[f] = Elinha[6];
fprintf(aMatrizExp7, "\n%e", cabs(Exp7[f])/Ei0);
} //f

printf("\n E espalhado encontrado!}\n\n", f);
printf("\nPROGRAMA COMPLETO\n");
close(aMatrizExp1);
close(aMatrizExp2);
close(aMatrizExp3);
close(aMatrizExp4);
close(aMatrizExp5);
close(aMatrizExp6);
close(aMatrizExp7);
//close(aMatrizLbda);

```

```
//close(aMatrizExx);  
//close(aMatrizPxx);  
//close(aMatrizEyy);  
//close(aMatrizPyy);  
//close(aMatrizEzz);  
//close(aMatrizPzz);  
system ("PAUSE");  
return(0);  
} //main // fim
```