

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

ANÁLISE DE SENSORES PLASMÔNICOS BASEADOS EM  
NANO ESTRUTURAS ESTRATIFICADAS UTILIZANDO O  
MÉTODO DAS IMAGENS COMPLEXAS DISCRETAS

NADSON WELKSON PEREIRA DE SOUZA

TD 08/2018

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

2018



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

NADSON WELKSON PEREIRA DE SOUZA

ANÁLISE DE SENSORES PLASMÔNICOS BASEADOS EM  
NANO ESTRUTURAS ESTRATIFICADAS UTILIZANDO O  
MÉTODO DAS IMAGENS COMPLEXAS DISCRETAS

TD 08/2018

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

2018

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

NADSON WELKSON PEREIRA DE SOUZA

ANÁLISE DE SENSORES PLASMÔNICOS BASEADOS EM  
NANO ESTRUTURAS ESTRATIFICADAS UTILIZANDO O  
MÉTODO DAS IMAGENS COMPLEXAS DISCRETAS

Tese submetida à Banca Examinadora do  
Programa de Pós-Graduação em Engenharia  
Elétrica da UFPA para a obtenção do Grau  
de Doutor em Engenharia Elétrica na área  
de Concentração em Telecomunicações.

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

2018

---

Souza, Nadson Welkson Pereira de, 1987-

Análise de sensores plasmônicos baseados em nano estruturas estratificadas utilizando o método das imagens complexas discretas. /

Nadson Welkson Pereira de Souza. - 2018.

Orientador : Karlo Queiroz da Costa.

Tese (Doutorado) - Universidade Federal do Pará, Instituto de Tecnologia, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Elétrica, Belém, 2018.

1. Dispositivos optoeletrônicos. 2. Detectores - testes. 3. Materiais nanoestruturados. 4. Ondas eletromagnéticas - propagação. I. Título.

CDD 23. ed. 621.381045

---

# **ANÁLISE DE SENSORES PLASMÔNICOS BASEADOS EM NANO ESTRUTURAS ESTRATIFICADAS UTILIZANDO O MÉTODO DAS IMAGENS COMPLEXAS DISCRETAS**

Autor: Nadson Welkson Pereira de Souza

Tese submetida à Banca Examinadora do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Elétrica da UFPA para a obtenção do Grau de Doutor em Engenharia Elétrica na área de Concentração em Telecomunicações.

Aprovada em 11/05/2018

---

**Prof. Dr. Karlo Queiroz da Costa**  
Orientador PPGEE/UFPA

---

**Prof. Dr. Victor Alexandrovich  
Dmitriev**  
PPGEE/UFPA

---

**Prof. Dr. Gervásio Protásio dos  
Santos Cavalcante**  
PPGEE/UFPA

---

**Prof. Dr. Fabricio José Brito Barros**  
PPGEE/UFPA

---

**Prof. Dr. Rodrigo Melo e Silva de  
Oliveira**  
PPGEE/UFPA

---

**Prof. Dr. Tomasso Del Rosso**  
EXTERNO - PUC RIO

---

**Prof. Dr. Daniel Chagas do  
Nascimento**  
EXTERNO - ITA

VISTO:

---

**Professora Dra. Maria Emília de Lima  
Tostes**  
Coordenadora PPGEE/ITEC/UFPA

*Aos meus pais, irmãs, minha esposa Jessica, meus filhos e a toda minha família que, com muito carinho e apoio, não mediram esforços para que eu chegasse até esta etapa de minha vida.*

# Agradecimentos

A Deus pela graça da Salvação em Cristo Jesus;

À toda Sociedade, que mantém o ensino público de qualidade e onde espero retribuir;

À Universidade Federal do Pará - UFPA;

À Universidade Federal do Sul e Sudeste do Pará - UNIFESSPA;

Ao Laboratório de Síntese e Caracterização Laser de Nanomateriais da PUC-Rio;

A meus pais Natal Varão de Souza e Antônia Pereira de Souza por toda educação, correção, amor e carinho que me dedicaram;

À minha querida esposa Jessica da Silva Ribeiro;

Aos meus amados filhos Lucas Ribeiro de Souza e ao bebê que está chegando;

Às minhas irmãs Meiry Jony e Wcaylânia e a meus sobrinhos e cunhados;

A Everaldo Ribeiro, Deusirene Ribeiro e toda sua família;

Ao professor Dr. Karlo Queiroz da Costa;

Ao professor Dr. Rodrigo Melo e Silva de Oliveira;

Ao Professor Dr. Victor A. Dmitriev;

Ao professor Tomasso del Rosso da PUC-Rio;

Aos professores do PPGEE da UFPA;

Ao professor K. A. Michalski e Mazin M. Mustafa da *Texas A&M University*;

A todos meus professores que convivi até aqui;

Aos colegas do Laboratório de Eletromagnetismo Piaga Franco e Jefferson Costa;

Aos amigos Vanut Alves, Térlys Silva, Arian, André Luiz, Josias Macedo, Rafael Oliveira e Daniela Seca;

A Gil Souza, Patrícia, Anderson, Adriely e Andeilson;

A família Lucena de Tucuruí pela amizade e apoio;

Aos amigos de trabalho e a meus alunos da UNIFESSPA;

Aos amigos do INSS: Solange Linhares, Gracimone, Aline, Elma, Calado, Telma, Iclea, Domingos, Ana Clea, Deise, Ernesto, Julieta, Mylene, Leila, Márcio, Sueli, Nelcy, Roger, Simone, Socorro, Jamil, Rafael, Anderson, Rute, Hélinho, Ana Leandro, Marta, Alexandre e Rosiely;

Aos amigos do IFPA, em especial Weldon, Ederson e Willie.

Por fim, agradeço a todos que contribuíram de alguma forma com este trabalho.

# Sumário

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO</b>	<b>19</b>
1.1	Motivação	21
1.2	Objetivos	22
1.3	Trabalhos Relacionados	22
1.4	Estrutura da Tese	26
<b>2</b>	<b>MODELAGEM DE SENSORES NA CONFIGURAÇÃO KRETSCH-</b>	
	<b>MANN</b>	<b>27</b>
2.1	Introdução	27
2.2	Modelo Eletromagnético Equivalente do Sensor KR	29
2.3	Avaliação Baseada no Modelo Eletromagnético Equivalente	32
2.4	Validação Experimental	35
2.5	Considerações Finais	41
<b>3</b>	<b>MODELAGEM DE SENSORES NA CONFIGURAÇÃO SPCE</b>	<b>42</b>
3.1	Introdução	42
3.2	Descrição do Sensor SPCE	43
3.3	Modelo Eletromagnético Equivalente do Sensor SPCE	44
3.4	A Idetidade de Sommerfeld: Mudança do Domínio Espectral Para o Domínio Espacial	46
3.5	Funções de Green no Espaço Homogêneo	49
3.6	Funções de Green em Meios Estratificados de Múltiplas Camadas	51
3.7	Generalização das Funções de Green para Aplicação do DCIM	54
3.8	Considerações Finais	56
<b>4</b>	<b>MÉTODO DAS IMAGENS COMPLEXAS DISCRETAS</b>	<b>57</b>
4.1	Introdução	57
4.2	Aproximação do Caminho de Integração em Dois Níveis	58
4.3	Detalhes da Aproximação de Segundo Nível	60
4.4	Detalhes do Algoritmo de Solução	63
4.5	Considerações Finais	64
<b>5</b>	<b>RESULTADOS E DISCUSSÕES</b>	<b>65</b>
5.1	Introdução	65
5.2	Algumas Características de um Sensor SPCE	65
5.3	Aplicação do Método DCIM ao Sensor SPCE	69

5.4	Considerações Finais . . . . .	75
6	CONSIDERAÇÕES FINAIS . . . . .	76
	Referências . . . . .	78
	APÊNDICE A – SOLUÇÃO COMPUTACIONAL VIA DCIM . . . .	85

# Lista de ilustrações

Figura 1 – a) Sensor em Configuração Kretschmann (KR). b) Sensor na configuração SPCE. . . . .	20
Figura 2 – Ilustração funcional de um sensor SPR na Configuração Kretschmann. O polarizador TM é omitido. . . . .	27
Figura 3 – Dispersão dielétrica para o ouro obtida via Modelo de Lorentz-Drude com um termo de interbanda. . . . .	29
Figura 4 – Sistema de múltiplas camadas equivalente ao sensor na configuração de Kretschmann. . . . .	30
Figura 5 – Influência do pólo SPP, localizado em $k_{SPP}$ , para o Coeficiente de Reflexão generalizado da estrutura multicamada do sensor na configuração Kretschmann. . . . .	33
Figura 6 – Influência do pólo SPP e SWP, localizados em $k_{SPP}$ e $k_{SWP}$ , respectivamente, para o Coeficiente de Reflexão generalizado da estrutura multicamada do sensor na configuração Kretschmann. . . . .	33
Figura 7 – Refletividade da estrutura prisma, ouro e ar para espessura do ouro $d=30\text{nm}$ , $d=40\text{nm}$ , $d=50\text{nm}$ , $d=60\text{nm}$ , $d=80\text{nm}$ , $d=158.25\text{nm}$ e $d=316.5.25\text{nm}$ . $\theta_c = 41.2^\circ$ . Em $d=50\text{nm}$ tem-se a menor refletividade ( $\theta_{SPP} = 43.7^\circ$ ). . . . .	34
Figura 8 – Representação da deposição de material por vaporização com feixe de elétrons em câmara a vácuo. . . . .	36
Figura 9 – Equipamento de deposição utilizado - UNIVEX 450. . . . .	37
Figura 10 – Fina camada de ouro de 50nm depositada sobre uma lâmina de vidro óptico do tipo BK7 fabricada pela vaporização por feixe de elétrons. . . . .	37
Figura 11 – Esquemático do <i>setup</i> de medição. <b>A</b> - Atenuador, <b>P1</b> - Lâmina $\lambda/4$ , <b>DF</b> - Divisor de Feixe (Beam Splitter), <b>P2</b> - Polarizador 2, <b>D1</b> - Detector 1, <b>D2</b> - Detector 2 e <b>CM</b> - Canal de Microfluídica. . . . .	38
Figura 12 – Bancada de trabalho para realização da configuração do sensor KR. . . . .	38
Figura 13 – Módulo do coeficiente de reflexão generalizado experimental (Exp.) e analítico (An.) na polarização TM. O mínimo da curva é o ângulo de melhor acoplamento SPP. . . . .	39
Figura 14 – Campo magnético $Re\{Hy\}$ para uma onda plana incidindo no máximo acoplamento SPP: a) $\theta_{SPP} = 43.7^\circ$ e b) $\theta_{SPP} = -43.7^\circ$ . . . . .	40
Figura 15 – Refletividade do sensor para laser incidindo com valores de $\theta$ negativos e positivos. Os mínimos de refletividade ocorrem em $\theta_{SPP} = -43.7^\circ$ e $\theta_{SPP} = 43.7^\circ$ , respectivamente. . . . .	40
Figura 16 – Configuração SPCE, com ângulo de emissão acoplado $\theta$ . . . . .	45

Figura 17 – Dipolo a uma altura $z'$ da primeira interface. As características elétricas de permissividade das três camadas e a espessura da camada de ouro permanecem as mesmas do modelo KR. . . . .	45
Figura 18 – Caminho de integração de Sommerfeld (SIP) mostrando pontos de ramificação e cortes de ramificação para a identidade de Sommerfeld. . . . .	47
Figura 19 – Representação de $k_z = \sqrt{k^2 - k_\rho^2}$ no plano $k_\rho$ . Considera-se $k = 1 - j0.1$ com perdas apenas para melhor visualização dos ramos. . . . .	48
Figura 20 – Localização aproximada dos pólos, cortes de ramificação e pontos de ramificação da Eq.(3.20) . . . . .	53
Figura 21 – Influência do pólo SWP e SPP, localizados em $k_{SWP}$ e $k_{SPP}$ , respectivamente, para o Coeficiente de Reflexão generalizado da estrutura multicamada do sensor na configuração SPCE. . . . .	53
Figura 22 – Plano complexo $k_\rho$ que mostra o caminho de integração completo que resulta em uma aproximação de segundo nível. Nesta figura, todos os pólos do integrando e cortes de ramificação da raiz quadrada e o relacionado a função de Hankel são mostrados. . . . .	59
Figura 23 – a) Caminho de integração $C_1$ e $C_2$ no plano complexo $k_\rho$ e b) Caminho de integração $C_1$ e $C_2$ no plano complexo $k_z$ . . . . .	59
Figura 24 – Malha criada no COMSOL par avaliação do sensor SPCE. . . . .	66
Figura 25 – Máximo acoplamento SPP para o sensor KR: a) $Re\{Hy\}$ , c) Fase $Re\{Hy\}$ . Acoplamento de campo no sensor SPCE b) $Re\{Ez\}$ d) Fase de $\{Hy\}$ . . . . .	67
Figura 26 – Diagrama de radiação bidimensional obtido no COMSOL, avaliação da intensidade do campo distante em diferentes alturas do dipolo: $z' = 20, 50, 100, 150$ e $200nm$ . Mantém-se o mesmo comprimento de onda de radiação $\lambda = 633nm$ e $d = 50nm$ . . . . .	68
Figura 27 – Diagrama tridimensional de campo distante obtido no COMSOL. . . . .	69
Figura 28 – Caminho de Integração Utilizado no DCIM para a primeira camada do sensor SPCE. . . . .	70
Figura 29 – Componente $z$ do campo elétrico $Re\{E_z\}$ obtido via DCIM: a) Nas três Camadas, b) Sobre a superfície de Ouro. . . . .	70
Figura 30 – Componente $z$ do campo elétrico $Re\{E_z\}$ em dB obtido via: a) DCIM b) Método Numérico. . . . .	71
Figura 31 – Fase da componente $z$ do campo elétrico ( $E_z$ ) em radianos obtido via: a) DCIM b) Método Numérico. . . . .	72
Figura 32 – Componente $z$ do campo elétrico $Re\{E_z\}$ em dB obtido via: a) DCIM b) COMSOL. . . . .	72

Figura 33 – Diagrama de radiação de campo distante bidimensional do sensor SPCE com altura $z' = 20\text{nm}$ , $d = 50\text{nm}$ e $\phi = 0^\circ$ . Note que o campo elétrico possui ângulo de emissão acoplado $\theta_{SPCE} = 43.7^\circ$ . . . . .	74
Figura 34 – Refletividade do Sensor KR e Campo Elétrico normalizado acoplado no sensor SPCE obtido via DCIM em $z = -2050\text{nm}$ . . . . .	74

# Resumo

Nesta tese, apresenta-se a análise teórica de um sensor de ressonância plasmônica de superfície (SPR) acoplado a nanopartículas metálicas. O sensor é considerado na configuração de Emissão Acoplada de Plasmon de Superfície (SPCE), onde as nanopartículas metálicas (ou analitos) são modeladas por dipolos equivalentes localizados acima do sensor. Um conjunto completo de funções diádicas de Green para o campo elétrico é derivado para meios planares, multicamadas e uniaxiais em uma forma computacionalmente eficiente e conveniente para aplicações que utilizem-se do Método das Imagens Complexas Discreta (DCIM) com a utilização do *Generalized Pencil of Function Method* (GPOF). O princípio da deformação do caminho complexo em um contorno de dois níveis é empregado para expressar uma integral original como uma soma de imagens complexas. Apresenta-se resultados de ressonância plasmônica de superfície, reflexão, campo próximo e distante de sensores planares e descreve-se como estas nanopartículas influenciam na capacidade de aumentar a intensidade de campo próximo e alterar a resposta de sensibilidade destes sensores ópticos. Além disso, para comparação, alguns resultados são calculados por métodos numéricos e experimentais. Os resultados mostram uma boa concordância, o que prova que o DCIM é um método teórico eficiente e poderoso para analisar sensores SPR na configuração SPCE.

**Palavras-chaves:** Sensores plasmônicos, meios multicamadas, funções diádicas de Green, método das imagens complexas discretas.

# Abstract

In this thesis, the theoretical analysis of a surface plasmon resonance (SPR) sensor coupled to metallic nanoparticles is presented. The sensor is considered in the Surface Plasmon Coupled Emission (SPCE) configuration, where the metallic nanoparticles (or analytes) are modeled by equivalent dipoles located above the sensor. A complete set of Green's dyadic functions for the electric field is estimated for planar, multilayer, and uniaxial media in a computationally efficient and convenient manner for applications using the Discrete Complex Imaging Method (DCIM) via the Generalized Pencil of Function Method (GPOF). The principle of complex path deformation in a two-level contour is employed to express an original integral as a sum of complex images. The results related to the surface plasmon resonance, reflection, near and far field of planar sensors are presented and it is described how these nanoparticles influence the ability to increase the near field strength and alter the sensitivity response of these optical sensors. In addition, for comparison purposes, some results are calculated by numerical and experimental methods. The results show suitable agreement, which proves that DCIM is an efficient and powerful theoretical method for analyzing SPR sensors in the SPCE configuration.

**Key-words:** Plasmonic sensors, multilayer media, Dyadic Green functions, Discrete Complex Image Method.

# Lista de abreviaturas e siglas

L	Laser óptico;
D	Detector óptico;
<i>KR</i>	Kretschmann;
SPCE	Emissão Acoplada de Plasma de Superfície ( <i>Surface Plasmon Coupled Emission</i> );
SPP	Plasmon Polariton de Superfície ( <i>Surface Plasmon Polariton</i> );
SPR	Ressonância Plasmônica de Superfície ( <i>Surface Plasmon Resonance</i> );
DCIM	Método das Imagens Complexas Discretas ( <i>Discrete Complex Images Method</i> );
SWP	Pólo de Onda de Superfície ( <i>Surface Wave Pole</i> );
GPOF	<i>Generalized Pencil of Function Method.</i>

# Lista de símbolos

$\theta$	Ângulo de incidência em relação à normal (Graus ou Radianos);
$\theta_c$	Ângulo crítico;
$\theta_{SPP}$	Ângulo de ocorrência do modo plasmônico;
$n$	Índice de refração do meio;
$n_p$	Índice de refração do prisma;
$n_{mext}$	Índice de refração do meio dielétrico externo;
$n_m$	Índice de refração do metal;
$n_d$	Índice de refração do dielétrico;
$\eta$	Impedância Intrínseca do meio;
$C$	Caminho de integração;
$T_1$	Parâmetro do DCIM que captura largos valores de $k_\rho$ ;
$T_2$	Parâmetro do DCIM que representa a truncagem limite de $k_\rho$ ;
$\bar{E}^i(\bar{r})$	Campo elétrico incidente;
$\bar{E}^r(\bar{r})$	Campo elétrico refletido;
$\bar{E}(\bar{r})$	Campo elétrico total (V/m);
$\bar{H}^i(\bar{r})$	Campo magnético incidente;
$\bar{H}^r(\bar{r})$	Campo magnético refletido;
$\bar{H}(\bar{r})$	Campo magnético total (A/m);
$\bar{D}(\bar{r})$	Densidade de fluxo elétrico em (C/m <sup>2</sup> );
$\bar{B}(\bar{r})$	Densidade de fluxo magnético (Wb/m <sup>2</sup> );
$\bar{J}$	Densidade de corrente elétrica de condução (A/m <sup>2</sup> );
$\bar{J}_p$	Densidade de corrente elétrica de polarização equivalente;
$\hat{I}$	Díade unitária;

$\hat{G}^e$	Função diádica de Green do campo elétrico;
$\hat{G}^m$	Função diádica de Green do campo magnético;
$\tilde{G}(k_\rho, z)$	Função espectral de $k_\rho$ ;
$G(\rho)$	Função espacial;
$\delta(\vec{r}, \vec{r}')$	Função delta de Dirac;
$\tilde{f}_n$	Função a ser aproximada na $n$ -ésima camada;
$l$	Comprimento do dipolo;
$k$	Constante de onda;
$k_0$	Constante de onda do espaço livre;
$k_n$	Constante de onda da $n$ -ésima camada;
$k_\rho$	Constante de onda na direção $\rho$ ;
$k_z$	Constante de onda na direção $z$ ;
$k_{nz}$	Constante de onda na direção $z$ da $n$ -ésima camada;
$k_{SPP}$	Constante de onda associada a ressonância plasmônica;
$k_{x_{lim}}$	Valor máximo de $k$ físico associado a $\theta = 90^\circ$ ;
$\mu$	Permeabilidade magnética do meio (H/m);
$\mu_0$	Permeabilidade magnética do vácuo (H/m);
$\mu_r$	Permeabilidade magnética relativa;
$\mu_m$	Permeabilidade magnética relativa do metal;
$\mu_d$	Permeabilidade magnética relativa do dielétrico;
$\varepsilon$	Permissividade elétrica do meio (Farad/m);
$\varepsilon_0$	Permissividade elétrica do vácuo (Farad/m);
$\varepsilon_r$	Permissividade relativa;
$\varepsilon_{me.xt}$	Permissividade relativa do meio externo;
$\varepsilon_p$	Permissividade relativa do prisma;
$\varepsilon_m$	Permissividade relativa do metal;

$\varepsilon_d$	Permissividade relativa do dielétrico;
$\varepsilon'$	Parte real de permissividade elétrica;
$\varepsilon''$	Parte imaginária de permissividade elétrica;
$\varepsilon_\infty$	Permissividade relativa a frequência infinita;
$\lambda$	Comprimento de onda;
$\omega$	Frequência angular da onda;
$c$	Velocidade da luz no vácuo;
$R_{i,i+1}^{TE}$	Coefficiente de reflexão de Fresnel entre a camada $i$ e $i+1$ no modo TE;
$R_{i,i+1}^{TM}$	Coefficiente de reflexão de Fresnel entre a camada $i$ e $i+1$ no modo TM;
$\tilde{R}$	Coefficiente de reflexão generalizado;
$T_{i,i+1}^{TE}$	Coefficiente de transmissão entre a camada $i$ e $i+1$ no modo TE;
$T_{i,i+1}^{TM}$	Coefficiente de transmissão entre a camada $i$ e $i+1$ no modo TE;
$A_i$	Amplitude em uma camada $i$ qualquer;
$H_0^2$	Função de Hankel de segundo tipo e ordem zero;
$J_0$	Função de Bessel de ordem zero;
$z'$	Posição do dipolo;
$d$	Espessura;
$d_n$	Posição da enésima interface.

# 1 Introdução

Ondas plasmônicas de superfície, também conhecidas como Plasmons Polaritons de Superfície (*Surface Plasmon Polariton* - SPP) [1][2], surgem como efeito da radiação eletromagnética em altas frequências sobre metais, que eletricamente nestas condições apresentam permissividades complexas. Apesar das primeiras observações das ondas plasmônicas de superfície terem sido referenciadas entre início e meio do século passado [3][4][5][6], somente na década de 1980 dispositivos baseados em ressonância plasmônica começaram a ser aplicados em sensores ópticos, inicialmente em detecção de gases e biosensores [7][8]. Sensores ópticos baseados em ondas SPP são conhecidos como sensores de ressonância plasmônica superficial (*Surface Plasmon Resonance* - SPR)[9][10]. Estes dispositivos fotônicos detectam variações do índice efetivo de refração de uma estrutura multicamada por meio da interação da onda plasmônica excitada na interface metal-dielétrico com as amostras do material a ser analisado na superfície do sensor [11]. Para que haja a excitação do modo de ressonância SPR, condições de acoplamento ou casamento devem ser atendidas, de modo que alterações nessas condições sejam percebidas e correlacionadas com o fenômeno que deseja-se monitorar.

Os recentes avanços na fabricação de dispositivos em escala nanométrica contribuíram para o avanço de aplicações plasmônicas. Assim, o uso de sensores SPR tem sido relatado para diversas aplicações, tais como: detecção de compostos químicos e biológicos [12], caracterização e quantificação de interações biomoleculares [13][14], diagnósticos médicos e monitoramento viral [15], detecção de nanopoluentes metálicos produzidos por resíduos de processos de nanofabricação[16], entre outros. Estas diferentes aplicabilidades têm atraído a atenção de muitos pesquisadores para o estudo destes dispositivos.

Um sensor SPR utilizando acoplamento de prisma na configuração Kretschmann (KR) [2][17] com excitação por um feixe de luz monocromática L, Fig. 1a), tem sua estrutura composta por um sistema de múltiplas camadas formadas por um prisma (dielétrico), uma fina camada de metal, como ouro, prata, alumínio ou cobre, e o meio externo, que pode ser em fase líquida ou gasosa. Este sensor pode ser usado para monitorar mudanças no meio próximo da interface metal/meio externo. Por exemplo, a posição do mínimo da curva de reflexão é modificada quando a amostra de um determinado analito interage com a superfície externa do sensor [18]. Os analitos podem ser nanopartículas (NPs) ou moléculas que se aderem ao filme fino metálico através de um espaçador químico que funcione como ponte molecular entre o filme fino metálico e os analitos. Outra possibilidade, seria a utilização de um filme dielétrico sobre a fina camada metálica, onde, o espaçador químico estaria sobre o filme dielétrico e a ponte molecular seria entre o filme dielétrico e os analitos. Neste trabalho, considera-se os analitos como NPs metálicas, que podem, por exemplo,

serem associadas ao problema de detecção de nanopoluentes metálicos [19]. O SPP é excitado na interface metal/meio-externo (meio dielétrico externo onde encontram-se as NPs) apenas para  $\theta$  maior que o ângulo de reflexão interna total. Em um ângulo de acoplamento máximo  $\theta = \theta_{SPP}$  é observado um ponto mínimo na curva de reflectividade  $R(\theta)$ . Neste caso, a detecção das NPs é monitorada pela mudança angular  $\Delta\theta$  no mínimo da curva de reflectividade, que ocorre após a interação das NPs com a superfície metálica do sensor.

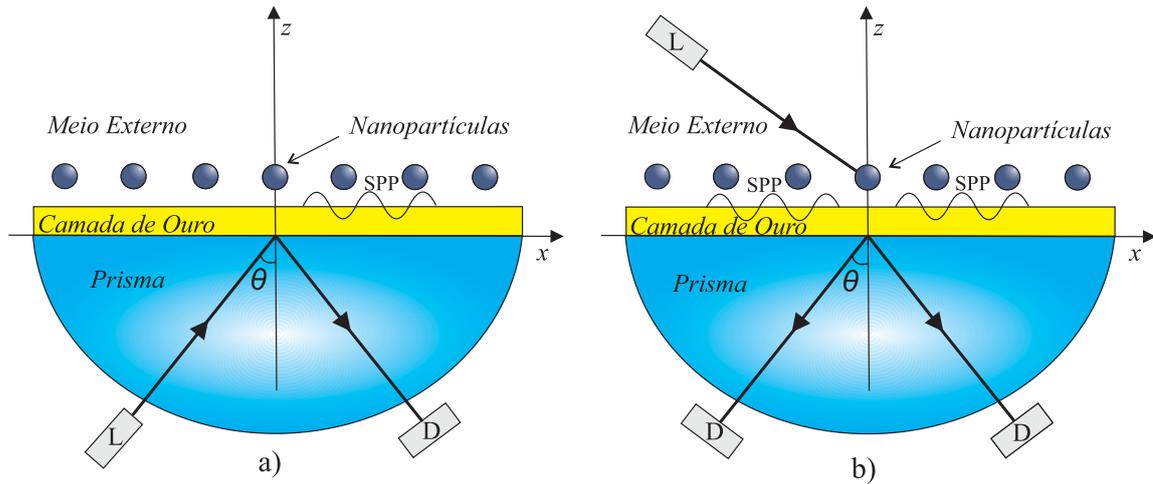


Figura 1 – a) Sensor em Configuração Kretschmann (KR). b) Sensor na configuração SPCE.

Um sensor SPR na configuração *Surface Plasmon Coupled Emission* (SPCE), Fig. 1b), foi proposto em 2003 por Joseph R. Lakowicz [20][21]. As NPs são excitadas por um feixe de luz  $L$ , não necessariamente monocromática, de modo a comportarem-se como radiadores ópticos em um comprimento de onda de ressonância específico associado a suas características físicas ou geométricas [22][23][24]. Sensores baseados nesta configuração envolvem geralmente as interações de espalhamento de campo próximo em ressonância das NPs sobre um filme fino de metal depositado sobre um substrato transparente (prisma). Essas interações resultam na geração de SPP sobre o metal, que irradiam para o prisma. A interação superficial das NPs alteram as características espectrais de emissão de acoplamento do SPP no prisma, de forma que diferentes NPs, espalhando em específicos comprimentos de onda ressonantes resultam em diferentes ângulos de acoplamento que são detectados como resposta do sensor. Estes ângulos de acoplamento são definidos como ângulos SPCE e podem ser associados a multianálitos em uma amostra ou a apenas uma NP singular [25][26]. A emissão SPCE de natureza altamente direcional na direção do detector  $D$  também aumenta a eficiência da detecção da emissão acoplada. Na Fig. 1b), as amostras são tratadas como NPs que se comportam como radiadores ópticos. Note que o sensor SPCE assemelha-se ao KR. No entanto, diferentemente do KR, os plasmons de superfície são criados por interações das NPs situados acima da camada metálica. No

sensor SPCE, considera-se que as NPs sobre o substrato possuam dimensões menores que o comprimento de onda de excitação. Por isso, elas são aqui representadas por dipolos infinitesimais com momentos de dipolo equivalentes ou por correntes elementares [2].

Neste trabalho, é aplicada uma modelagem matemática semianalítica para o sensor SPCE. A ideia é de a partir de uma solução analítica, como a apresentada no Capítulo 3, sobre um meio de múltiplas camadas, obter uma aproximação numérica que é resolvida pelo método DCIM apresentado no Capítulo 4 [27]. O formalismo matemático é apresentado nos capítulos posteriores. O sensor KR é considerado apenas para análise espectral da estrutura, onde é utilizada uma solução generalista para meios de múltiplas interfaces submetido a ondas planas utilizando os coeficientes de reflexão generalizados baseados em [28][29]; O sensor SPCE é matematicamente modelado e analisado pela primeira vez através do Método das Imagens Complexas Discretas (DCIM)[30][31] com a utilização do *Generalized Pencil of Function Method* (GPOF)[32][33]. Diferentemente de outras abordagens do DCIM, elaboram-se técnicas recentemente desenvolvidas aplicadas a materiais plasmônicos. A aplicação destes métodos demanda um custo computacional menor que técnicas puramente numéricas de análise eletromagnética, além de prover uma significativa interpretação física e matemática do sensor.

## 1.1 Motivação

Observa-se que, desde a década de 1980, diversos dispositivos de sensoriamento baseados em SPR têm sido estudados e desenvolvidos. No entanto, a aplicação aqui tratada que envolve a detecção de NPs a partir de um sensor na configuração SPCE é atual, assim como a análise eletromagnética de campo próximo destes sensores através do DCIM proposta neste trabalho.

A capacidade de detecção de analitos singulares ou de diferentes analitos proporciona avanço significativo no campo da detecção, pois, pode subsidiar a avaliação mais rápida de agentes patológicos ou até mesmo NPs prejudiciais à saúde humana que estejam presentes em determinado ambiente. Sendo assim, a principal motivação por trás deste trabalho é contribuir para a análise destes sensores através de simulações utilizando métodos analíticos e semianalíticos de modo a otimizar análises práticas, visando obter respostas rápidas e precisas para o desenvolvimento prático de tais sensores.

A avaliação de sensores com aplicações em frequências ópticas figuram como principais desafios no desenvolvimento destes sensores, e a formulação envolvida figura como desafio de se obter soluções generalistas para múltiplas configurações de meios planares, de forma que este desafio também tornou-se um item de motivação do trabalho. Efeitos como dispersão em frequências ópticas, equações integrais complexas com singularidades (pólos, pontos de ramificação e ramos), criação de códigos computacionais robustos e eficientes

que minimizem o tempo exigido para solução dos problemas propostos tornam o problema ainda mais complexo, porém mais atraente do ponto de vista da pesquisa em plasmônica.

A realização prática de sensores SPR que envolvam dimensões nanométricas demanda de laboratórios de alta complexidade e ambientes livres de quaisquer impurezas que possam comprometer a fabricação e a resposta destes sensores. Desta forma, uma avaliação analítica e semianalítica pode contribuir para o processo de fabricação destes sensores, pois pode prever efeitos e possíveis soluções antes da avaliação prática do sensor. Isto implica na otimização de recursos humanos e financeiros. Uma avaliação rápida, analítica e computacional pode dar as bases para mudança de parâmetros físicos em projetos de novos sensores plasmônicos.

## 1.2 Objetivos

O principal objetivo desta tese é modelar sensores plasmônicos para detecção de NPs na configuração KR e SPCE através de métodos analíticos e semianalíticos, respectivamente, utilizando análise espectral. De maneira inovadora aplicar o DCIM nesta modelagem diretamente sobre as equações integrais de campo elétrico a fim de obter soluções de campos próximos em meios estratificados.

Esta tese de doutorado teve como objetivos específicos:

- Modelar sensores SPR do tipo KR e SPCE baseados em multicamadas para detecção de NPs.
- A partir das funções diádicas de Green, obtidas para os sensores na configuração SPCE baseados em meios multicamadas, obter uma formulação para aplicação do DCIM;
- Aplicar o GPOF juntamente com o DCIM;
- Avaliar possíveis configurações de sensores SPR na configuração KR e SPCE para detecção de NPs;
- Desenvolver algoritmos computacionais em Matlab<sup>®</sup> e implementar computacionalmente o DCIM.

## 1.3 Trabalhos Relacionados

Este tópico pretende destacar o desenvolvimento dos principais trabalhos que embasaram a tese desenvolvida. Serão apresentados trabalhos de grande relevância para a temática aqui apresentada. Não se pretende com isso ser exaustivo em relação a apresentação de todos os trabalhos desenvolvidos para o desenvolvimento da temática, pois

a solução do problema proposto envolve princípios de diferentes temáticas. Portanto, a finalidade é mostrar o desenvolvimento dos principais trabalhos que foram relevantes para esta tese.

**E. Kretschmann and H. Raether. Radiative decay of non-radiative surface plasmons excited by light. *Z. Physik*, 23, 1968.**

Este artigo [6] destaca as condições necessárias para a existência do modo plasmônico de superfície, assim como as relações de dispersão para dois meios diferentes, a saber prata/ar e ar/quartz. Destaca o conceito de modos radiativos e não radiativos, que se acoplam ou não com os ftons, respectivamente.

**J. A. Kong. Electromagnetic field due to dipole antennas over stratified anisotropic media. *Geophysics*, 37(6):985–996, 1972.**

Neste artigo [28], equações de campo elétrico da radiação eletromagnética de um dipolo elétrico em um meio estratificado são apresentadas através de matrizes de propagação e amplitude de onda capazes de determinar o campo elétrico e magnético em todas as regiões do meio estratificado, são apresentados coeficientes de reflexão e amplitude em uma forma fechada, estes são capazes de representar eletricamente a geometria do meio estratificado planar.

**I. Lundstrom, B. Liedberg and C. Nylander. Surface plasmons resonance for gas detection and biosensing. *Sensors and Actuators*, 4:299–304, 1983**

Este artigo [8], introduziu a aplicação de um conceito físico, isto é, a excitação óptica dos plasmons de superfície numa interface metal/dielétrico para a análise quantitativa de reações de afinidade acontecendo nesta interface entre uma superfície e um analito que se aproxima. Este trabalho iniciou atividades de pesquisa no campo das reações de bio-afinidade, também, foi o início para o desenvolvimento e implementação comercial de instrumentos baseados nos princípios da excitação de plasmon de superfície.

**D. F. Fang, Y. L. Chow, J. J. Yang and G. E. Howard. A closed-forma spatial green's function for the thick microstrip substrate. *IEEE Trans. Microwave Theory*, 39:588–592, 1991.**

Este trabalho [27], introduziu o conceito de Imagens Complexas Discretas. As funções espaciais de Green para uma estrutura de microfita aberta são representadas através das Integrais de Sommerfeld. Uma função de Green espectral equivalente em forma fechada é obtida e solucionada utilizando uma integração evoluída ao longo de um caminho deformado denominado caminho de primeiro nível, o método extrai analiticamente utilizando teoria de resíduos complexos os termos quase dinâmicos, pólos de superfície e imagens complexas das integrais e depois transforma a função espectral para o domínio espacial através da Identidade de Sommerfeld com exponenciais complexas utilizando-se do método de Prony. Estas exponenciais são interpretadas como imagens complexas.

**Weng Cho Chew. *Waves and Fields in Inhomogeneous Media*. IEEE PRESS Series on Electromagnetic Waves, 1995.**

Neste livro [29], equações de campo elétrico para ondas planas em um meio estratificado são apresentadas em um método elegante de equações que se baseiam em coeficientes de reflexão generalizados que descrevem as propriedades elétricas envolvidas em um meio estratificado. Também, equações da radiação eletromagnética de um dipolo elétrico em um meio estratificado são apresentadas para a componente  $z$  do campo elétrico sobre um meio estratificado, soluções baseadas em aproximações para campo distante são discutidas e apresentadas no livro.

**M. I. Aksum. A robust approach for the derivation of closed-form Green's functions. *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques*, 44(5), 1996.**

Neste trabalho [30], é introduzido a aproximação de segundo nível para funções espectrais de Green em geometrias planares, mais especificamente estruturas de microfita. O autor utiliza as funções espectrais de Green em uma forma fechada onde faz uma aproximação para o domínio espectral utilizando um caminho de integração baseado em dois níveis, no trabalho o autor compara o seu método para mostrar a precisão da aproximação de segundo nível que evolui no sentido de não ter a necessidade da avaliação da localização dos pólos no plano espectral. Também, aproxima as funções espectrais para o domínio espacial através da Identidade de Sommerfeld e de exponenciais complexas obtidas com a utilização do método de GPOF.

**Ignacy Gryczynski, Joseph R. Lakowicz, Joanna Malicka and Zygmunt G.. Directional surface plasmon-coupled emission: a new method for high sensitivity detection. *Biochemical and Biophysical Research Communications*, 307:435–439, 2003.**

Neste trabalho [20], os autores destacam que a detecção por fluorescência é a base de inúmeras medições nas ciências biológicas, biotecnologia, e diagnósticos médicos. Também que a detecção de moléculas através da sua fluorescência é difícil devido os sistemas da época possuírem uma precisão na detecção da emissão total das moléculas entre 1% e 5%. Os autores introduzem um método chamado de *Surface Plasmon Coupled Emission* o qual eleva a detecção de moléculas para cerca de 50% da emissão total da molécula, para isso, a abordagem insere uma sonda de detecção após o prisma do sensor SPCE na direção do acoplamento da onda em um ângulo bem definido, de tal forma que pode-se obter um acoplamento óptico com a sonda até mesmo superior a 90%.

**M. Irsadi Aksun and Gulbin Dural M. Emre Yavuz. Critical study of the problems in discrete complex image method. *Electromagnetic Compatibility*, 2003.**

Neste artigo [31], os autores avaliam o método das Imagens Complexas Discretas,

realizam uma análise da contribuição dos branch cuts, branch points e pólos de onda de superfície para a aproximação via Imagens Complexas Discretas, também, avalia-se a localização em que estes ramos e pólos se apresentam em relação ao caminho complexo de segundo nível. Os resultados utilizam materiais com permissividades reais, dipolo horizontal e avalia a magnitude da função de Green escalar.

**Joseph R. Lakowicz. Radiative decay engineering: Surface plasmon-coupled directional emission. *Anal Biochemical*, pages 153–169, 2004.**

Neste artigo [21], exemplos mostram o potencial de como algumas configurações ópticas simples podem ser usadas em aplicações de diagnóstico, detecção ou biotecnologia utilizando-se do SPCE. É apresentado possíveis soluções práticas de como acoplar a luz do prisma de modo a recebe-la em um detector óptico. É destacado que as interações entre fluoróforos e metais prometem ter inúmeras aplicações na biociência.

**Mohammad Mahdi Tajdini and Hossein Mosallaei. Characterization of large array of plasmonic nanoparticles on layered substrate: dipole mode analysis integrated with complex image method. *Applied EM and Optics Laboratory Northeastern University*, 2011.**

Neste trabalho [34], os autores avaliam a irradiação de um largo array de NPs plasmônicas do tipo core-shell sobre uma estrutura de múltiplas camadas, aplicado a células solares, é apresentado um método denominado de *Dipole Mode Complex Image* ou DCMI (equivalente ao DCIM). O trabalho faz uso da aproximação das Funções de Green do domínio espectral para o domínio espacial através da identidade de Sommerfeld e do método de Prony. É avaliado a irradiação de nano partículas apenas sobre a camada de substrato. As precisões da aproximação utilizada são comparadas com o método FDTD.

**K. A. Michalski. Application of the Complex Image Method to Electromagnetic Field Computation in Planar Uniaxial Multilayers. *Integral Techniques for Electromagnetics*, 2015.**

Neste trabalho [35], o DCIM é aplicado a um *set* de funções potenciais de Green do campo elétrico para um meio planar de múltiplas camadas. É feita uma revisão do DCIM e utiliza-se o método em equações obtidas a partir de um sistema de múltiplas camadas equivalentemente derivadas da teoria de linhas de transmissão.

**K. A. Michalski and J. R. Mosig. The sommerfeld half-space problem revisited: from radio frequencies and zenneck waves to visible light and fano modes. *Journal of Electromagnetic Waves and Applications*, 30:1–42, 2016.**

Neste trabalho [36], os autores citam o crescente avanço das pesquisas em meios estratificados no que tange o interesse em aplicações em THz. São elucidadas as ondas de Zenneck (ZW) e ondas de superfície (SPP), onde as primeiras tornam-se a segunda em caso de metais nobres. Uma solução inicial (*ab initio*) baseada em análise de linhas de

transmissão para meios estratificados é apresentada. Exemplos numéricos comprovam a teoria de que ZW se tornam SPP em interfaces metálicas.

**Krzysztof A. Michalski e Donald R. Wilton. On the computation of plane-wave impressed fields and far-zone fields of arbitrary current sources in planar multilayer dielectric and plasmonic media. *Journal of Electromagnetic Waves and Applications*, 2017**

Neste trabalho [37], os autores apresentam uma nova formulação baseada em linhas de transmissão para avaliação de meios plasmônicos e ressaltam nos agradecimentos a importância deste trabalho em ter trazido a atenção guias de ondas plasmônicos.

## 1.4 Estrutura da Tese

O trabalho é estruturado da seguinte forma:

Este capítulo apresenta a introdução;

O Capítulo 2 apresenta a modelagem espectral dos sensores plasmônicos na configuração Kretschman. São analisados os pólos de ressonância plasmônica de superfície SPPs e suas contribuições são discutidas na análise do sensor apresentado, a formulação e resultados relativos aos pólos presentes nos coeficientes de reflexão generalizados em meios de múltiplas camadas são analisados;

No Capítulo 3 é descrita a modelagem matemática equivalente ao sensor na configuração SPCE, e é apresentada uma nova metodologia generalista para solução do campo elétrico em meios estratificados otimizada para aplicação direta via DCIM. São apresentadas as funções de Green Diádicas para meios estratificados;

No Capítulo 4 apresenta-se o Método das Imagens Complexas Discretas (DCIM);

No Capítulo 5 é aplicado o método DCIM nas equações de campo elétrico e os principais resultados são comentados. Também, são obtidos resultados com softwares comerciais.

No capítulo 6 são apresentadas as considerações finais, conclusões e recomendações para trabalhos futuros. E, por fim, são apresentadas as principais referências bibliográficas e Apêndices.

## 2 Modelagem de Sensores na Configuração Kretschmann

### 2.1 Introdução

Em um sensor na configuração KR, Fig. 2, uma luz com polarização TM emitida por uma fonte laser L incide na interface prisma-metal com um ângulo de incidência teta ( $\theta$ ) e a onda refletida para um detector óptico é analisada. Quando  $\theta$  é maior que o ângulo crítico ( $\theta_c = \text{sen}^{-1} \sqrt{\varepsilon_{\text{meio}}/\varepsilon_p}$ ) e igual a um ângulo ( $\theta_{SPP}$ ), um campo evanescente dentro do metal e no meio externo (Canal de Microfluídica) do sensor irá existir e ocorrerá um mínimo da curva de refletividade  $R$  observada no detector. O campo que se estende na interface metal/dielétrico (meio-externo), é definido por modo plasmônico ou SPP. A configuração KR é usual, principalmente na aplicação de sensores SPR, devido à simplicidade de sua implementação, baseada na prévia deposição de um filme fino de metal sobre um substrato de vidro dielétrico com as mesmas propriedades ópticas do prisma, para posterior acoplamento com o prisma.

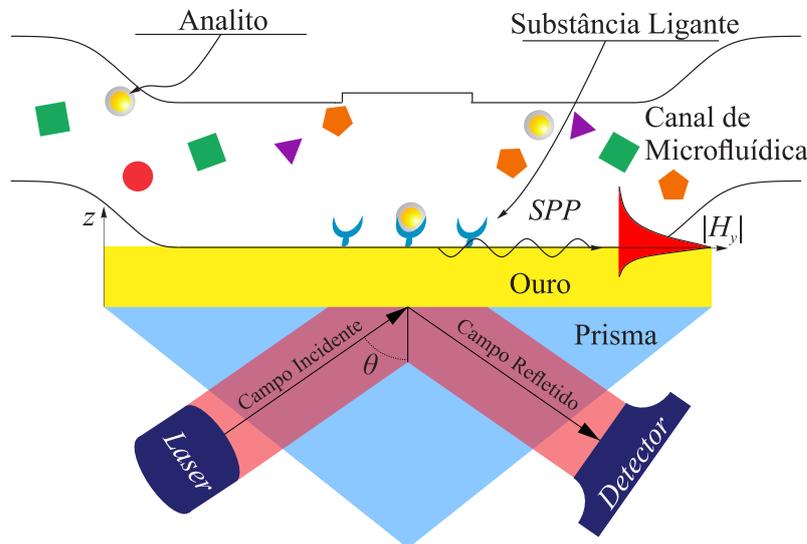


Figura 2 – Ilustração funcional de um sensor SPR na Configuração Kretschmann. O polarizador TM é omitido.

Em sensores SPR direciona-se a detecção para NPs ou moléculas (Analitos) dispersas ou solubilizadas no meio externo líquido, para isso, utiliza-se uma substância ligante capaz de reconhecer e interagir com o analito, de forma que o mesmo seja capturado sobre a superfície do sensor. O aumento da densidade superficial do analito sobre o sensor altera o índice de refração na superfície do sensor, resultando em uma sensível alteração no mínimo

da refletividade de um ângulo de ressonância de plasmon  $\theta_{SPP_1}$  para outro ângulo  $\theta_{SPP_2}$ , esta alteração pode então ser relacionada ao Analito. Para avaliação do sensor, define-se como referência inicial a resposta do sensor para qual o meio externo é o ar.

Pode-se relacionar o ângulo crítico, também conhecido como ângulo de reflexão interna total, com os índices de refração do prisma (primeiro meio)  $n_p$  e do último meio  $n_{next}$  através de

$$n_p \sin \theta_c = n_{next}. \quad (2.1)$$

O ângulo de ressonância de plasmon  $\theta_{SPP}$  está relacionado com a constante de onda do plasmon de superfície  $k_{SPP}$  por

$$k_0 n_p \sin \theta_{SPP} = \text{Re}\{k_{SPP}\} \quad (2.2)$$

onde  $k_0 = \omega/c$  é a constante de onda ou relação de dispersão do espaço livre.

A constante de onda  $k_{SPP}$  define as condições necessárias para que uma onda plasmônica de superfície possa ser excitada em uma interface metal-dielétrico. Considerando apenas dois meios, compostos por metal e dielétrico, a constante de onda  $k_{SPP}$  possui a seguinte relação de dispersão[38]:

$$k_{SPP} = \pm \frac{2\pi}{\lambda} \frac{n_m n_d}{\sqrt{n_m^2 + n_d^2}} = \pm \frac{2\pi}{\lambda} \sqrt{\frac{\varepsilon_m \varepsilon_d}{\varepsilon_m + \varepsilon_d}} = \pm k_0 \sqrt{\frac{\varepsilon_m \varepsilon_d}{\varepsilon_m + \varepsilon_d}} \quad (2.3)$$

onde  $n_m = \sqrt{\mu_m \varepsilon_m}$  e  $n_d = \sqrt{\mu_d \varepsilon_d}$  são os índices de refração do metal (ouro) e dielétrico (ar). Em meios não magnéticos a permeabilidade relativa é unitária ( $\mu_m = \mu_d = 1$ ) e, desta forma,  $k_{SPP}$  é função apenas das permissividades complexas do metal e dielétrico:  $\varepsilon_m(\omega) = \varepsilon'_m(\omega) - j\varepsilon''_m(\omega)$  e  $\varepsilon_d(\omega) = \varepsilon'_d(\omega) - j\varepsilon''_d(\omega)$ , respectivamente.

A condição de ressonância de plasmon é obtida caso [39]:

- A parte real da constante dielétrica do metal seja negativa:  $\text{Re}[\varepsilon_m] < 0$ ;
- A parte real da constante dielétrica do dielétrico obedeça  $\text{Re}[\varepsilon_d] < -\text{Re}[\varepsilon_m]$ ;
- E que a onda de excitação seja transversal magnética (TM), ou seja, somente um feixe polarizado em TM pode excitar o modo SPP.

As condições descritas anteriormente se cumprem para diversos metais, entre os quais estão o ouro e a prata. Para obter a permissividade relativa do ouro no filme metálico, foi utilizando o modelo de permissividade complexa de Lorentz-Drude com um termo de interbanda [2], A Fig. 3, exibe a dispersão dielétrica do ouro em diferentes comprimento de onda  $\lambda$  em (nm), identificando as partes Real e Imaginária da permissividade complexa deste material. Observe que a parte real de  $\varepsilon_m(\omega)$  para o ouro é negativa e que a parte imaginária é não nula, ou seja, já considera as perdas do material.

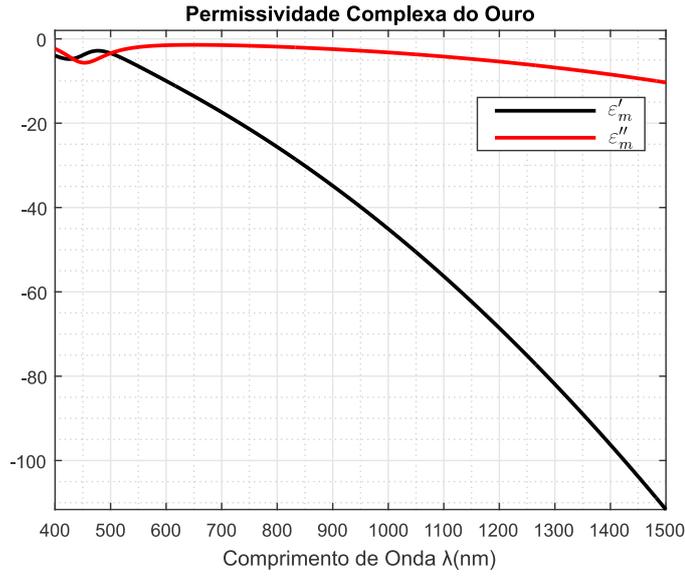


Figura 3 – Dispersão dielétrica para o ouro obtida via Modelo de Lorentz-Drude com um termo de interbanda.

## 2.2 Modelo Eletromagnético Equivalente do Sensor KR

Para o sensor KR, usamos a configuração apresentada na Fig. 2. A estrutura do sensor resultante é formada por três camadas planares: prisma, fina película de ouro e ar. Esta configuração pode ser analisada aproximadamente por um sistema equivalente de  $N$  (múltiplas) camadas, Fig. 4, com  $N=3$ . O sensor opera com comprimento de onda típico de um laser de Hélio-neônio ( $\lambda = 633nm$ ). Todas as camadas são não magnéticas ( $\mu_r = 1$ ). Observa-se que cada região é caracterizada eletricamente através de sua permissividade elétrica  $\varepsilon$ . As permissividades relativas complexas do prisma (BK7), ouro e ar são  $\varepsilon_{r1} = 2.3$ ,  $\varepsilon_{r2} = -11.53 - j1.2$  e  $\varepsilon_{r3} = 1$ , respectivamente [2]. Utiliza-se dependência temporal  $exp(j\omega t)$  que impõe condições de radiação  $Im(k_z) < 0$ . As interfaces são localizadas em  $z = -d_n$ , onde o sub-índice  $n$  representa o número da interface. A espessura da camada de ouro é de 50nm ( $d_1 = 0$  e  $d_2 = 50nm$ ), escolhida de modo a maximizar a ressonância de plasma, conforme será descrito mais adiante.

Parte da onda incidente é refletida na primeira interface ao meio de origem e parte da onda é transmitida aos meios seguintes. A onda que incide forma um ângulo incidente igual ao refletido ( $\theta_i = \theta_r = \theta$ ) em relação ao eixo  $z$ . O campo total na Região 1 pode ser dividido em duas componentes, uma incidente e outra refletida, de forma que o campo elétrico ou magnético nesta região será dado pela composição de campos incidentes e refletidos na forma [29]:

$$\vec{E}(\vec{r}) = \vec{E}^i(\vec{r}) + \vec{E}^r(\vec{r}) \quad (2.4)$$

$$e \quad \vec{H}(\vec{r}) = \vec{H}^i(\vec{r}) + \vec{H}^r(\vec{r}), \quad (2.5)$$

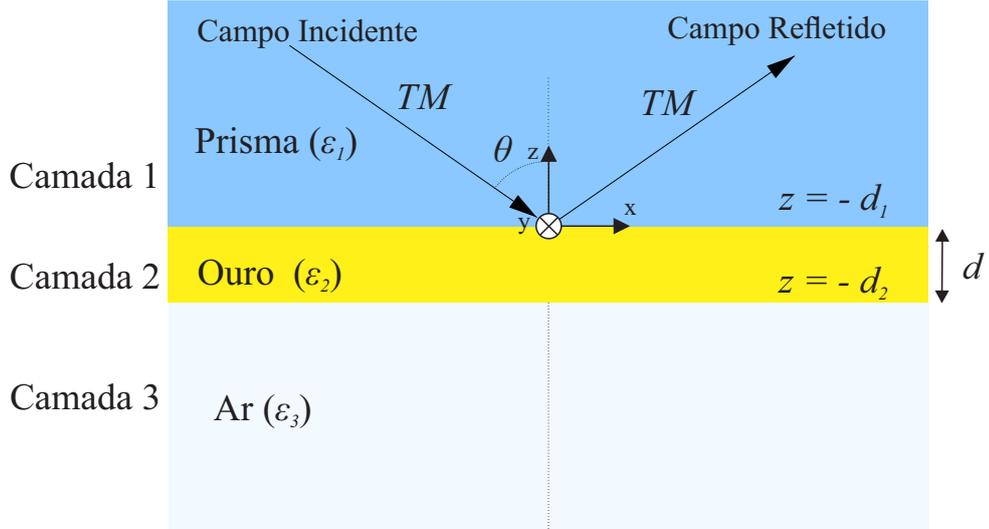


Figura 4 – Sistema de múltiplas camadas equivalente ao sensor na configuração de Kretschmann.

onde os índices  $i$  e  $r$  representam incidência e reflexão, respectivamente.

Partindo das equações de onda para meios sem fonte, têm-se

$$\nabla \times \mu^{-1} \nabla \times \bar{E}(\bar{r}) - \omega^2 \epsilon \bar{E}(\bar{r}) = 0 \quad (2.6)$$

$$e \quad \nabla \times \epsilon^{-1} \nabla \times \bar{H}(\bar{r}) - \omega^2 \epsilon \bar{H}(\bar{r}) = 0, \quad (2.7)$$

onde  $\bar{E}(\bar{r}) = \bar{E}(x, y, z)$  e  $\bar{H}(\bar{r}) = \bar{H}(x, y, z)$ . Para o problema têm-se a componente tangencial  $\bar{E}_t(\bar{r}) = E_y \bar{a}_y$  para o modo TE e  $\bar{H}_t(\bar{r}) = H_y \bar{a}_y$  para o modo TM.

Em um meio sem cargas, tem-se que [29]

$$\nabla \cdot \epsilon E_y \bar{a}_y = \frac{\partial}{\partial y} \epsilon E_y = 0. \quad (2.8)$$

Desta forma, como  $\epsilon$  é função de  $z$ , então o termo  $\partial/\partial y E_y$  deve ser nulo. Neste caso, pode ser provado que a equação de onda escalar para o modo TE resulta em

$$\left[ \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \mu(z) \frac{\partial}{\partial z} \mu^{-1}(z) \frac{\partial}{\partial z} + \omega^2 \mu \epsilon \right] E_y(x, z) = 0. \quad (2.9)$$

De maneira semelhante, para o modo TM tem-se

$$\left[ \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \epsilon(z) \frac{\partial}{\partial z} \epsilon^{-1}(z) \frac{\partial}{\partial z} + \omega^2 \mu \epsilon \right] H_y(x, z) = 0. \quad (2.10)$$

As Equações (2.9) e (2.10) podem admitir soluções na forma

$$\begin{bmatrix} E_y(x, z) \\ H_y(x, z) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} e_y(z) \\ h_y(z) \end{bmatrix} e^{\pm j k_x x} \quad (2.11)$$

para todo  $z$ . Note que a Eq.(2.11) possui condição de fase constante para todo  $z$ . Partindo deste pressuposto, estas equações podem ser reduzidas a um problema unidimensional, representado por equações diferenciais ordinárias na forma

$$\left[ \mu(z) \frac{d}{dz} \mu^{-1}(z) \frac{d}{dz} + k_z \right] e_y(z) = 0 \quad (2.12)$$

$$e \quad \left[ \varepsilon(z) \frac{d}{dz} \varepsilon^{-1}(z) \frac{d}{dz} + k_z \right] h_y(z) = 0, \quad (2.13)$$

onde  $k_z = \sqrt{(k^2 - k_x^2)}$ ,  $k^2 = \omega^2 \varepsilon \mu$ ,  $e_y(z)$  e  $h_y(z)$  representam as soluções fasoriais das equações (2.12) e (2.13). Exemplificando, quando  $\varepsilon$  e  $\mu$  são constantes por camada, as soluções de (2.12) e (2.13) baseiam-se apenas na superposição linear de  $e^{\pm jk_z z}$ .

Usando as condições de contorno para uma onda eletromagnética polarizada no modo TE, através das equações (2.12) e (2.13) encontra-se o campo elétrico para todas as  $n$  camadas como sendo [29]

$$E_{ny}^{TE}(x, z) = A_n^{TE} [e^{jk_{nz}z} + \tilde{R}_{n,n+1}^{TE} e^{-jk_{nz}(z+2d_n)}] e^{-jk_x x}, A_1^{TE} = 1(\text{V/m}) \quad (2.14)$$

onde

$$\tilde{R}_{n,n+1}^{TE} = \frac{R_{n,n+1}^{TE} + \tilde{R}_{n+1,n+2}^{TE} e^{-j2k_{n+1,z}(d_{n+1}-d_n)}}{1 + R_{n,n+1}^{TE} \tilde{R}_{n+1,n+2}^{TE} e^{-j2k_{n+1,z}(d_{n+1}-d_n)}}, \quad (2.15)$$

$$A_n^{TE} = \frac{T_{n-1,n}^{TE} A_{n-1}^{TE} e^{-j(k_{n-1,z} - k_{n,z})d_{n-1}}}{1 + R_{n+1,n}^{TE} \tilde{R}_{n,n+1}^{TE} e^{-j2k_{nz}(d_n - d_{n-1})}}, \quad (2.16)$$

$$R_{n,n+1}^{TE} = \frac{\mu_{n+1} k_{nz} - \mu_n k_{n+1z}}{\mu_{n+1} k_{nz} + \mu_n k_{n+1z}} \quad (2.17)$$

$$e \quad T_{n,n+1}^{TE} = \frac{2\mu_{n+1} k_{nz}}{\mu_{n+1} k_{nz} + \mu_n k_{n+1z}}. \quad (2.18)$$

Utilizando uma onda eletromagnética polarizada no modo TM, semelhantemente ao modo TE, encontra-se o campo magnético para todas as  $n$  camadas como

$$H_{ny}^{TM}(x, z) = A_n^{TM} [e^{jk_{nz}z} + \tilde{R}_{n,n+1}^{TM} e^{-jk_{nz}(z+2d_n)}] e^{-jk_x x}, A_1^{TM} = 1(\text{A/m}) \quad (2.19)$$

$$\tilde{R}_{n,n+1}^{TM} = \frac{R_{n,n+1}^{TM} + \tilde{R}_{n+1,n+2}^{TM} e^{-j2k_{n+1,z}(d_{n+1}-d_n)}}{1 + R_{n,n+1}^{TM} \tilde{R}_{n+1,n+2}^{TM} e^{-j2k_{n+1,z}(d_{n+1}-d_n)}}, \quad (2.20)$$

$$A_n^{TM} = \frac{T_{n-1,n}^{TM} A_{n-1}^{TM} e^{-j(k_{n-1,z} - k_{n,z})d_{n-1}}}{1 + R_{n+1,n}^{TM} \tilde{R}_{n,n+1}^{TM} e^{-j2k_{nz}(d_n - d_{n-1})}}, \quad (2.21)$$

$$R_{n,n+1}^{TM} = \frac{\varepsilon_{n+1} k_{nz} - \varepsilon_n k_{n+1z}}{\varepsilon_{n+1} k_{nz} + \varepsilon_n k_{n+1z}} \quad (2.22)$$

$$e \quad T_{n,n+1}^{TM} = \frac{2\varepsilon_{n+1} k_{nz}}{\varepsilon_{n+1} k_{nz} + \varepsilon_n k_{n+1z}}. \quad (2.23)$$

Para ambos os modos,  $k_{nz} = \sqrt{(k_n^2 - k_x^2)}$ ,  $n = 1, \dots, N = 3$ ,  $k_n^2 = \omega^2 \varepsilon_n \mu_n$ ,  $\omega = 2\pi c/\lambda$ ,  $c$  é a velocidade da luz no espaço livre,  $k_x = k_1 \sin(\theta)$ ,  $A_n^{TE/TM}$  são as amplitudes no modo TE ou TM em cada camada  $n$ ,  $\tilde{R}_{n,n+1}^{TE/TM}$  são os coeficientes de reflexão generalizados relativos ao modo TE ou TM em cada camada  $n$ ,  $R_{n,n+1}^{TE/TM}$  e  $T_{n,n+1}^{TE/TM}$  são os coeficientes de reflexão e transmissão de Fresnel no modo TE ou TM. Define-se  $\tilde{R}_{N,N+1}^{TE/TM} = 0$  e  $R = |\tilde{R}_{1,2}^{TM/TE}|^2$  como refletividade.

## 2.3 Avaliação Baseada no Modelo Eletromagnético Equivalente

A refletividade da estrutura do sensor KR é a principal variável de análise do sensor nesta configuração. A posição do mínimo da curva de reflexão é modificada quando a amostra de um determinado analito interage com a superfície externa do sensor. Neste tópico, realiza-se avaliações espectrais e espaciais (em relação  $\theta$ ) baseadas no formalismo apresentado nas equações de Eq.(2.19) a Eq.(2.23) do modelo eletromagnético equivalente do tópico anterior. Para avaliação destas equações foi desenvolvido um programa em Matlab, os resultados analíticos obtidos são apresentados e discutidos no decorrer deste tópico.

Observe que o valor de  $\theta$  físico máximo  $\theta_{m\acute{a}x} = \pm\pi/2$  resulta em um valor limite para a constante de onda na direção  $x$ ,  $k_{x_{lim}} = k_1 \sin(\theta_{m\acute{a}x}) = 1.5171k_0$ . Esta região física  $[0, k_{x_{lim}}]$  é definida como região visível de operação do sensor. O surgimento do modo plasmônico de superfície na interface metal/meio-externo pode ser entendido como o resultado de um pólo em  $R_{2,3}^{TM}$ . A localização deste pólo é dada aproximadamente anulando-se o denominador de (2.22) ( $\varepsilon_3 k_{2z} + \varepsilon_2 k_{3z} = 0$ ), tal que [40]

$$k_x = \pm \sqrt{\frac{\varepsilon_3^2 k_2^2 - \varepsilon_2^2 k_3^2}{(\varepsilon_3^2 - \varepsilon_2^2)}} = \pm k_{SPP}, \quad (2.24)$$

que é igual ao valor da Eq.(2.3). Sendo este pólo calculado em  $k_{SPP} = \pm(1.0458 - j0.0051)k_0$  quando o ar é considerado o meio-externo.

A Fig. 5 mostra o efeito do pólo SPP no coeficiente de reflexão  $\tilde{R}_{2,3}^{TM} = R_{2,3}^{TM}$  da camada 2 para 3, que é para o formalismo apresentado exatamente o mesmo coeficiente de reflexão de fresnel entre estas camadas. Este pólo é associado a condição de ressonância plasmônica que dá origem à onda de superfície no sensor KR analisado. Observa-se na Eq.(2.24) que o pólo está relacionado com a última interface, justamente, onde encontra-se o principal modo de ressonância de superfície plasmônica, ou seja, a onda plasmônica de superfície que se propaga na interface ouro-ar.

Existe também, para o sensor KR, uma região do espectro onde  $k_x > k_{x_{lim}}$ . Esta região é aqui definida como sendo uma região invisível, complexa ou não física do sensor. Nesta região, encontram-se um ou mais pólos. Conforme observado na Fig. 6, para a geometria apresentada, um único pólo é encontrado nesta região, no entanto, para estruturas

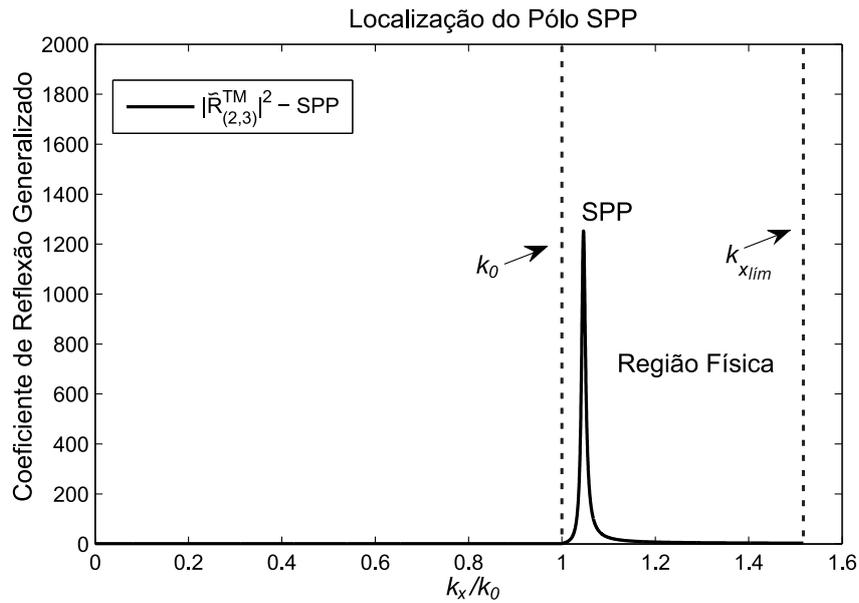


Figura 5 – Influência do pólo SPP, localizado em  $k_{SPP}$ , para o Coeficiente de Reflexão generalizado da estrutura multicamada do sensor na configuração Kretschmann.

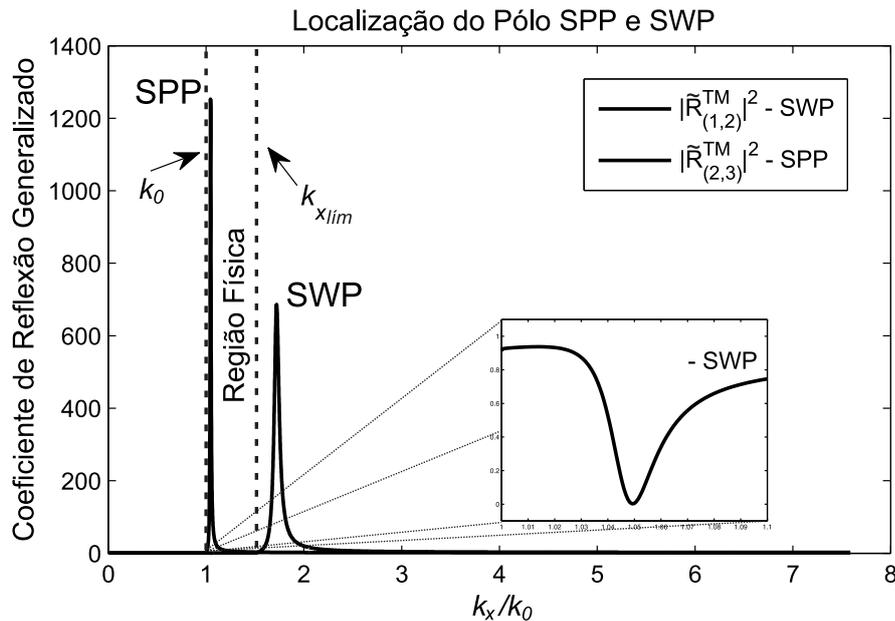


Figura 6 – Influência do pólo SPP e SWP, localizados em  $k_{SPP}$  e  $k_{SWP}$ , respectivamente, para o Coeficiente de Reflexão generalizado da estrutura multicamada do sensor na configuração Kretschmann.

com dimensões ou quantidade de camadas diferentes, poderiam surgir outros pólos, cada um dos quais associados com um modo de propagação diferente. Estes pólos são conhecidos como pólos de onda de superfície ou SWP, ou também por modos de guia de onda. Neste caso, está relacionado com a primeira interface, 2ª camada, e representa um modo de

propagação de superfície que não é excitado na interface entre as Camadas de 1 para 2 na configuração aqui apresentada [36]. Estes pólos podem ser obtidos anulando-se o denominador de (2.20) e podem ser evidenciados na Fig. 6. A região  $k_x > k_{x_{lim}}$  não interfere na formulação apresentada para o sensor KR pois, a formulação trabalha apenas na região física do sensor e o pólo SWP não está nesta região, conseqüentemente, não é excitado para esta geometria. Porém, como será visto mais adiante, a configuração SPCE excita estes modos. Portanto, o formalismo matemático anteriormente apresentado representa completamente o sensor KR e, desta forma, a contribuição dos pólos SWP para o sensor na configuração Kretschmann com os parâmetros aqui determinados é totalmente irrelevante para a formulação. Na Fig. 6 também é mostrada a ampliação (*zoom*) no mínimo de  $|\tilde{R}_{(1,2)}^{TM}|^2$  (SWP), que representa a refletividade R da estrutura. Observa-se que o polo SPP avaliado através de  $|\tilde{R}_{(2,3)}^{TM}|^2$  coincide com o mínimo de refletividade R da estrutura. Dessa forma, os pólos SPP e SWP surgem como consequência das interfaces mais superficiais da estrutura, na Fig. 6 identificados através dos coeficientes de reflexão generalizado das camadas 2 para 3 e 1 para 2, respectivamente.

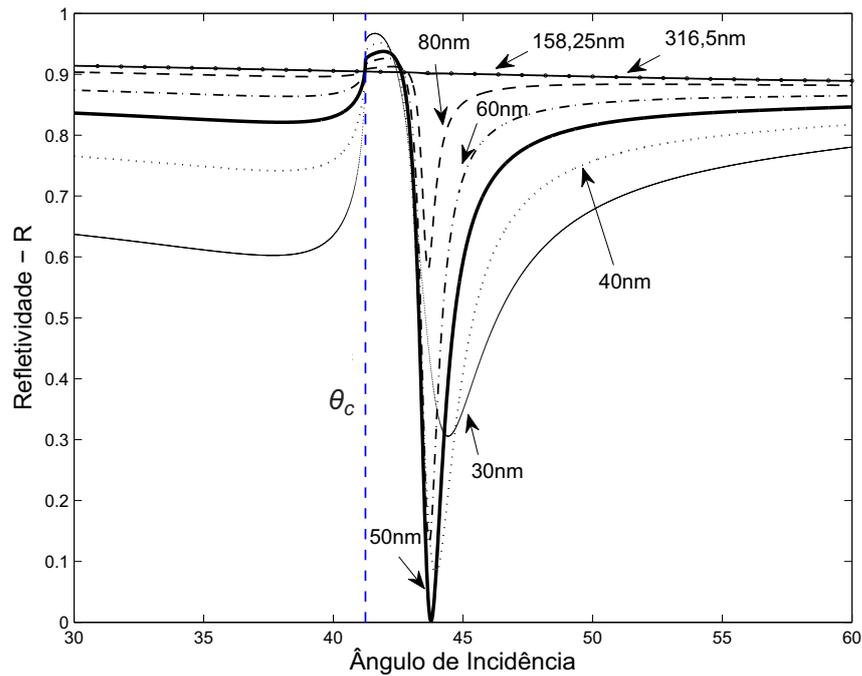


Figura 7 – Refletividade da estrutura prisma, ouro e ar para espessura do ouro  $d=30\text{nm}$ ,  $d=40\text{nm}$ ,  $d=50\text{nm}$ ,  $d=60\text{nm}$ ,  $d=80\text{nm}$ ,  $d=158,25\text{nm}$  e  $d=316,5\text{nm}$ .  $\theta_c = 41,2^\circ$ . Em  $d=50\text{nm}$  tem-se a menor refletividade ( $\theta_{SPP} = 43,7^\circ$ ).

Como mencionado anteriormente, a escolha da espessura da camada foi determinada de modo a obter a melhor ressonância plasmônica do sensor no comprimento de onda de operação  $\lambda=633\text{nm}$ . A Fig. 7, obtida em programa realizado no Matlab, exhibe o comportamento da refletividade R para a polarização perpendicular (TM) em função do

ângulo de incidência  $\theta$  da onda plana. As seis curvas mostradas são obtidas variando-se a espessura da camada  $d = |(d_2 - d_1)|$ . Nota-se que a espessura da camada de ouro de 50nm é a que maximiza o modo de ressonância de plasma, pois nesta espessura a reflexão está mais próxima da condição de reflexão totalmente atenuada, ou seja, em ressonância de plasma. À medida em que se aumenta a espessura da camada, atinge-se uma espessura  $d$  limite em que não há mais qualquer ressonância plasmônica de superfície. Esta espessura é aproximadamente  $d \approx \lambda/4 = 158,25nm$ , sendo que a partir desta espessura o metal passa a se comportar como uma superfície condutora.

## 2.4 Validação Experimental

Em parceria com o Laboratório de Síntese e Caracterização Laser de Nanomateriais da Pontifca Universidade Católica do Rio de Janeiro (PUC-Rio) foram caracterizados sensores plasmônicos com filmes finos de ouro na configuração Kretschmann. Apesar da simples configuração que apresenta o sensor KR, a fabricação deste sensor demanda de equipamentos e procedimentos complexos que serão resumidamente descritos neste tópico. Os materiais utilizados para validação desta configuração consistem em um prisma óptico (BK7), uma lâmina de vidro óptico com as mesmas propriedades elétricas do prisma e ouro com elevada pureza.

Inicialmente, é adotado um severo procedimento de limpeza do prisma e das lâminas de BK7, pois, fragmentos microscópios de materiais diversos, resíduos de gordura por contato das mãos, entre outros tipos de resíduos podem prejudicar o acoplamento óptico da estrutura ou acarretar uma deposição de má qualidade do filme de ouro sobre a lâmina, o que pode inviabilizar a realização dos experimentos desejados. A limpeza da vidraçaria pode levar horas devido diferentes passos necessários, resumidamente, são realizados diferentes processos: limpeza com solventes químicos (detergente, etanol, água ionizada) e mecânicos (ultra-som), além de secagem por gás nitrogênio e estufa de secagem. Cuidados no manuseio da vidraçaria são tomados como manuseio com o uso de luvas cirúrgicas, utilização de cubas de teflon, que é um material hidrofóbico de fácil limpeza após seu uso, utilização de papel óptico, visto que este não libera fragmentos de fibra durante a limpeza e manuseio, também não induz eletricidade estática no material, o que pode atrair resíduos para o material. Após o procedimento de limpeza as lâminas de BK7 podem ser funcionalizadas (procedimento que será descrito a seguir) ou guardadas diretamente em uma câmara de vácuo em uma sala com ambiente de acesso controlado para prevenir a deposição de partículas suspensas no ar sobre as amostras de vidro a fim de uma futura utilização.

O processo de funcionalização das lâminas de vidro é posterior a sua limpeza, este processo é descrito como um tratamento químico com Mercaptopropyltrimethoxysilane

(MPTS), substância que cria afinidade química entre a superfície da lâmina de vidro e o ouro com o intuito de estabilizar o filme de ouro depositado sobre o vidro, aumentando assim a vida útil da amostra. As amostras de vidro funcionalizadas podem ser conservadas em vácuo por longos períodos de tempo, no entanto, fora do vácuo, se deterioram em questão de horas.

Sobre uma lâmina de vidro óptico já funcionalizada é depositado um filme fino de 50nm de ouro através de deposição em vácuo assistida por feixe de elétrons. Como representado na Fig.8 [41][42], direciona-se um feixe de elétrons, gerado por um filamento, por meio de uma campo magnético  $\vec{B}$  sobre uma pastilha de ouro puro. Quando atingido pelo feixe de elétrons, o ouro vaporiza (sublima) e os vapores são depositados sobre um substrato (lâmina de vidro) até atingir a espessura desejada. A taxa de evaporação ou deposição do material é controlada através do feixe de elétrons que incide sobre o ouro. Já a espessura do material depositado sobre as lâminas é estimada de forma indireta por meio da variação da frequência de oscilação de um cristal do equipamento de deposição.

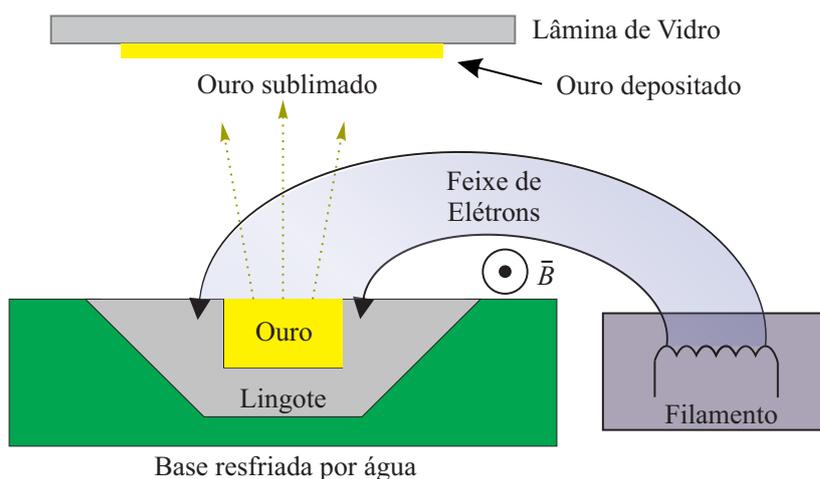


Figura 8 – Representação da deposição de material por vaporização com feixe de elétrons em câmara a vácuo.

O equipamento utilizado, o UNIVEX 450, é mostrado na Fig.9 e representado na Fig.8. Este é formado basicamente por uma câmara de vácuo, onde ocorre o processo de deposição, e um sistema de controle, o qual gerencia o processo de deposição, refrigeração a água e bombeamento de ar da câmara de vácuo.

Como resultado do processo, um filme fino de ouro de 50nm é depositado sobre uma lâmina de BK7, Conforme Fig. 10. Esta lâmina é então acoplada ao prisma através de um líquido óptico. Especial cuidado deve ser dado a esta etapa, pois o prisma, a lâmina e o líquido óptico de acoplamento devem possuir o mesmo índice de refração para o comprimento de onda de operação  $\lambda = 633nm$ , o que permite continuidade das propriedades ópticas do acoplamento. Neste caso foi utilizada glicerina como líquido de



Figura 9 – Equipamento de deposição utilizado - UNIVEX 450.

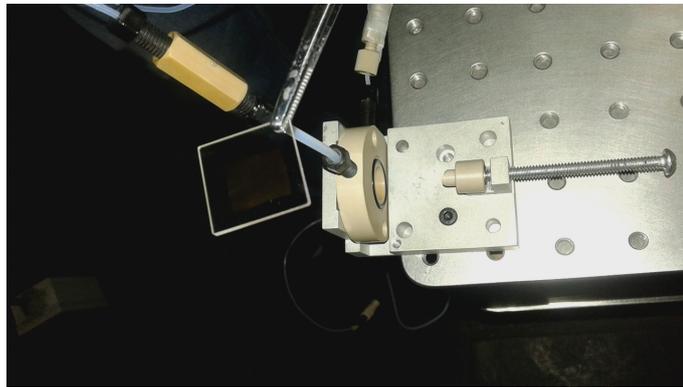


Figura 10 – Fina camada de ouro de 50nm depositada sobre uma lâmina de vidro óptico do tipo BK7 fabricada pela vaporização por feixe de elétrons.

acoplamento.

Para caracterizar a curva de refletividade característica do sensor KR, foi utilizado o espectrometro SPR (*Surface Plasmon Resonance*) esquematizado na a Fig. 11 [43], onde um feixe Laser de He-Ne está incidindo sobre um atenuador **A** utilizado para diminuir a potência inicial do feixe laser a fim se trabalhar abaixo da saturação dos dois detectores ópticos **D1** e **D2**. O polarizador linear **P2** é utilizado para polarizar linearmente o feixe de entrada TM ou TE, e **P1** é uma lâmina  $\lambda/4$ . O divisor de feixe **DF** ou *Beam Splitter* divide igualmente a potência do feixe laser, de modo que **D1** recebe a potência incidente de referência e **D2** recebe a potência refletida no sensor. **CM** é um canal de microfluídica, para injeção do líquido desejado. Uma placa de aquisição de dados é então utilizada e no computador calcula-se as relações de potência interna e externa ao prisma, assim, gerando-se a curva de refletividade já com as devidas correções de proporcionalidade. O sensor é montado sobre uma plataforma giratória que possui um motor de passo como

atuador para controle do ângulo de incidência do feixe de excitação, este motor de passo promove giros em passos de até  $0.0025^\circ$  graus. A Fig. 12 mostra a bancada de trabalho completa para avaliação do sensor KR. O sensor e a base giratória encontram-se em uma câmara escura a esquerda da figura a fim de minimizar a incidência externa de luz sobre o experimento.

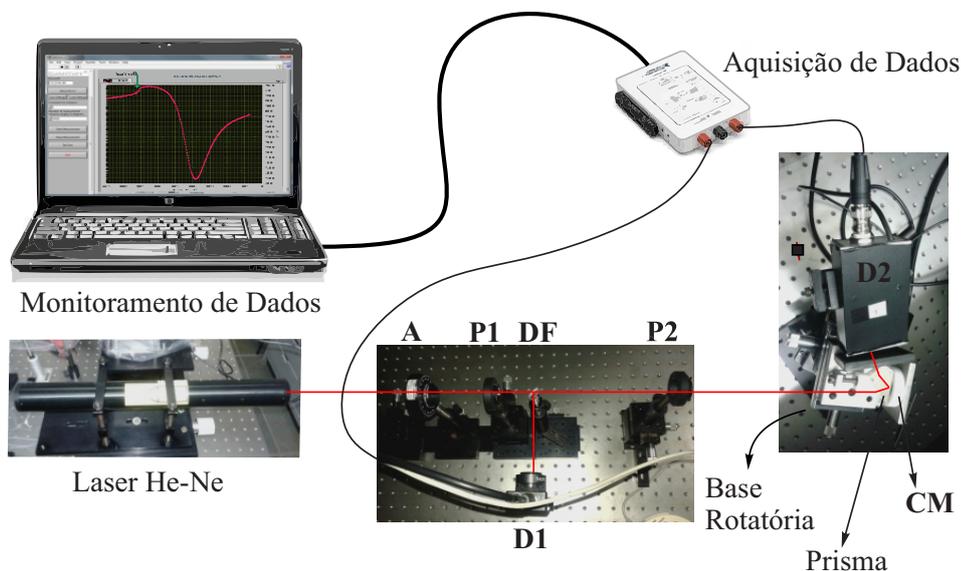


Figura 11 – Esquemático do *setup* de medição. **A** - Atenuador, **P1** - Lâmina  $\lambda/4$ , **DF** - Divisor de Feixe (Beam Splitter), **P2** - Polarizador 2, **D1** - Detector 1, **D2** - Detector 2 e **CM** - Canal de Microfluídica.

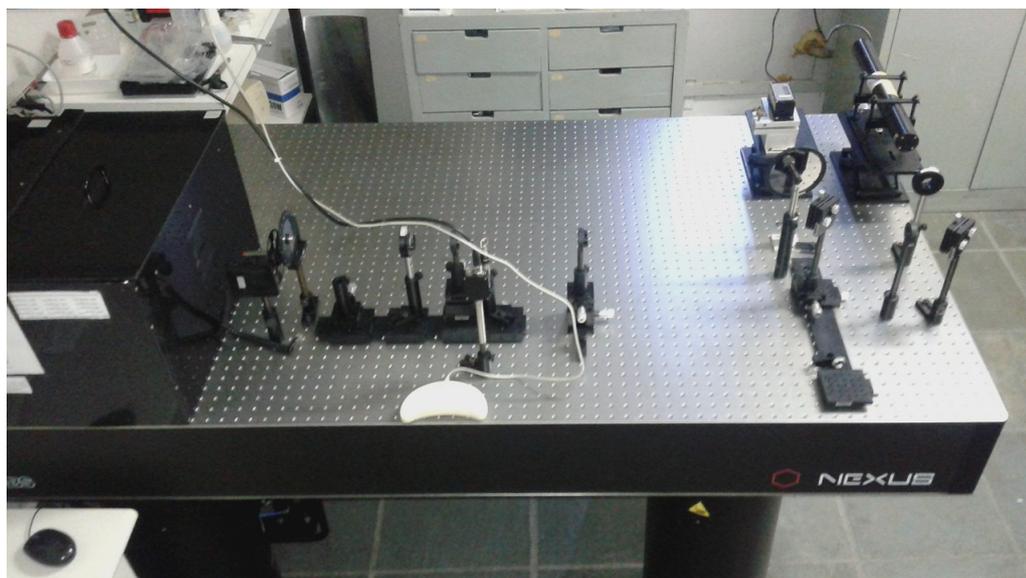


Figura 12 – Bancada de trabalho para realização da configuração do sensor KR.

Para validação do algoritmo desenvolvido em Matlab, a fim de solucionar o formalismo apresentado nas equações de Eq.(2.19) a Eq.(2.23), conforme resultados apresentados

no tópico 2.3, utilizou-se nos experimentos práticos: laser de *He-Ne* operando a 632.8nm, uma camada de ouro de aproximadamente 50nm de espessura sobre o substrato de vidro (ouro com permissividade relativa  $\varepsilon_{Au} = -12.06 - j1.4$ ), prisma de alto índice de refração (BK7) com permissividade relativa  $\varepsilon_p = 2.3$ . Pequenas variações entre valores experimentais da permissividade relativa do ouro são esperados devido diferenças físicas naturais das amostras de ouro utilizadas em cada experimento.

A Fig. 13 mostra a comparação entre as curvas de refletividade obtidas de modo analítico (An.) e experimental (Exp.). A primeira curva foi obtida via o modelo teórico apresentado na Seção 2.2, enquanto a segunda curva foi obtida durante um ensaio de caracterização através do espectrômetro SPR apresentado na Fig. 12, respectivamente. O ponto em que ocorre o mínimo da refletividade representa o ângulo em que ocorre o melhor acoplamento do modo plasmônico de superfície (SPP). O mínimo de  $R(\theta)$  destaque na Fig. 13 representa o modo ressonante de ordem zero (TM0) ou modo plasmônico SPP.

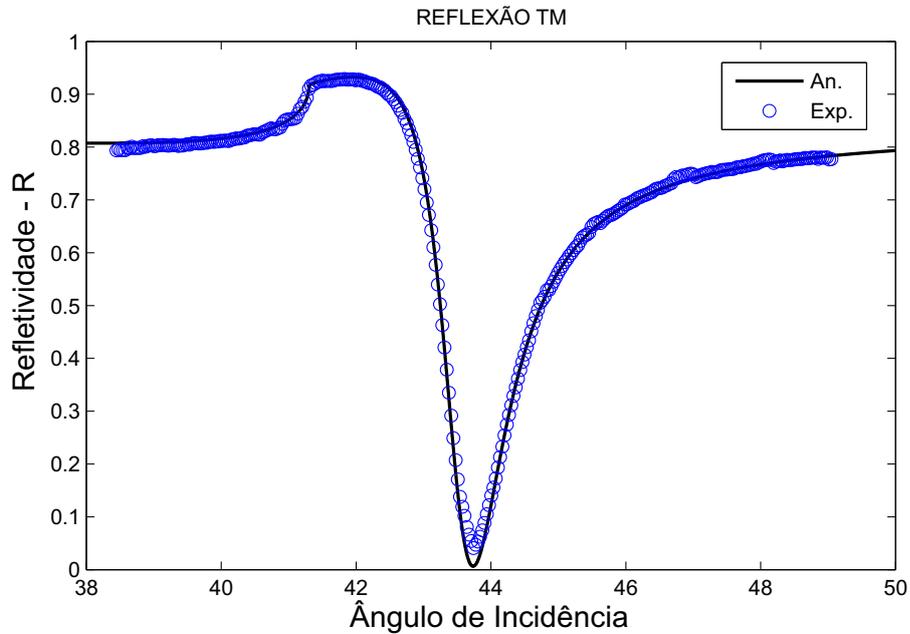


Figura 13 – Módulo do coeficiente de reflexão generalizado experimental (Exp.) e analítico (An.) na polarização TM. O mínimo da curva é o ângulo de melhor acoplamento SPP.

A partir do programa em Matlab, realizado com base no modelo eletromagnético equivalente apresentado no tópico 2.2, para uma onda plana incidindo no conjunto Prisma-Ouro-Ar, obtém-se a Fig. 14, que indica a incidência nos ângulos de acoplamento SPP para: a)  $\theta_{SPP} = 43.7^\circ$  e b)  $\theta_{SPP} = -43.7^\circ$ , respectivamente. A Fig. 14 mostra a parte real do campo Magnético  $H_y$ , que representa o campo magnético  $H_y$  no domínio do tempo (uma amostra do campo no domínio do tempo em  $t = 0s$  pode ser dada por  $Re\{H_y e^{j\omega t}\} = Re\{H_y\}$ ). Observa-se que uma onda de superfície surge na interface entre o ouro e ar e que nesta interface surgem amplitudes elevadas em relação à amplitude incidente

(representadas pela intensidade máxima de vermelho e mínima de azul), também que a onda decai exponencialmente nos dois lados a partir da interface ouro e ar, penetrando uma curta distância no Ar. Isto indica que a região ativa do sensor, onde pode haver interação com analitos, deve ocorrer apenas nas proximidades da interface metálica.

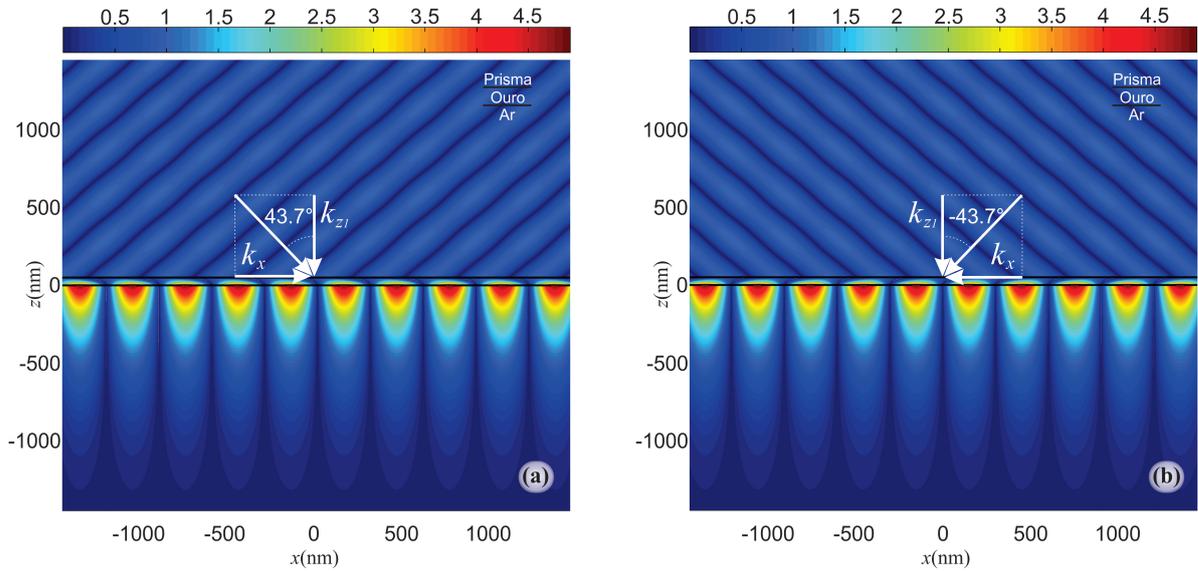


Figura 14 – Campo magnético  $Re\{Hy\}$  para uma onda plana incidindo no máximo acoplamento SPP: a)  $\theta_{SPP} = 43.7^\circ$  e b)  $\theta_{SPP} = -43.7^\circ$ .

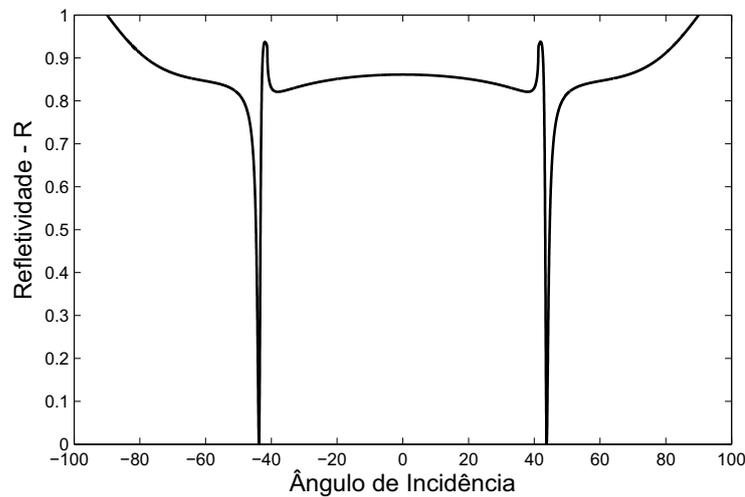


Figura 15 – Refletividade do sensor para laser incidindo com valores de  $\theta$  negativos e positivos. Os mínimos de refletividade ocorrem em  $\theta_{SPP} = -43.7^\circ$  e  $\theta_{SPP} = 43.7^\circ$ , respectivamente.

No ângulo de ressonância, existem ondas de superfície propagando-se apenas em uma direção ao longo do eixo  $x$ . A direção da propagação depende do quadrante de

incidência do laser  $\theta = [90^\circ, 0^\circ]$  ou  $\theta = [0^\circ, -90^\circ]$ . Desta forma, o ângulo incidente possui um intervalo total de  $180^\circ$ , onde estão presentes os dois ângulos de ressonância de plasma possíveis da região física do sensor, localizados em  $\theta_{SPP} = \pm 43.7^\circ$ , conforme Fig. 15.

## 2.5 Considerações Finais

Com a fundamentação teórica aqui apresentada foi possível desenvolver um programa em Matlab baseado na formulação do tópico 2.2. Este avalia a incidência oblíqua ou normal de uma onda plana em um meio estratificado para qualquer número de camadas e qualquer material, sendo possível inclusive a inserção de metamateriais representados pela permissividade, que no entanto não correspondem à essência de análise deste trabalho. A influência dos pólos SPP e SWP, localizados em  $k_{SPP}$  e  $k_{SWP}$ , respectivamente, são consideradas para a avaliação da formulação obtida. O Coeficiente de Reflexão generalizado da estrutura multicamada do sensor na configuração Kretschmann é analisado. Visualizações de campo magnético são possíveis de modo a abranger melhor análise destes sensores. O Sensor KR é essencial para início da formulação do sensor na configuração SPCE, que será abordado nos capítulos posteriores.

# 3 Modelagem de Sensores na Configuração SPCE

## 3.1 Introdução

Para melhorar a sensibilidade dos sensores SPR para a detecção de baixa concentração de analitos, o uso de nanopartículas de ouro tem sido relatado em vários estudos [44][45]. Nesta configuração, as nanopartículas são geralmente ligadas à superfície do sensor e funcionalizadas por biomoléculas específicas com afinidade apenas aos analitos de interesse [17]. A alta sensibilidade destes sensores está associada ao incremento do campo próximo a estas nanopartículas devido o efeito plasmônico associado a elas [46].

Um sensor SPR emergente com base em partículas é o sensor na configuração SPCE que consiste no acoplamento de nanopartículas, biomoléculas, fluoróforos ou pontos quânticos (QD's) sobre um filme metálico fino e um prisma [47]. Onde, o processo de biosensoreamento é baseado no monitoramento da variação nas propriedades da luminescência óptica de luminóforos ou nas interações com os analitos de interesse [48]. Para esta configuração, avanços recentes foram relatados demonstrando elevada sensibilidade em comparação com a fluorescência isotrópica espontânea [43].

Neste trabalho, para a análise teórica da configuração SPCE, os radiadores (luminóforos ou nanopartículas metálicas) são representados por dipolos equivalentes sobre multicamadas e o formalismo é obtido usando as funções de Green e as integrais de Sommerfeld [34][29]. Uma função espacial em forma fechada é obtida para ser solucionada usando o Método das imagens complexas discreta (DCIM)[30][31], onde, usamos um esquema sofisticado, em que o integrando é aproximado por uma superposição de exponenciais complexas.

Um dos métodos mais eficientes e versáteis para a caracterização de campos em meios estratificados envolve as funções diádicas de Green [49], com as quais se pode derivar um conjunto de equações espectrais capazes de determinar o campo elétrico em cada camada de um meio estratificado. As funções de Green para o campo elétrico em múltiplas camadas não existem em uma forma fechada no domínio espacial. No entanto, as componentes espectrais derivadas a partir da transformada de Fourier e das diádicas de Green são possíveis de serem encontradas em uma forma fechada [50].

Este capítulo apresenta uma formulação generalista para tratamento do problema da radiação eletromagnética de fontes do tipo dipolo sobre estruturas multicamadas em geometrias planares. Utilizam-se as funções diádicas de Green e a identidade de Sommerfeld para relacionar o comportamento clássico de ondas planas incidindo sobre

uma superfície multicamada com as características de ondas esféricas, radiadas por fontes pontuais [51]. Um estudo detalhado do sensor SPCE composto por múltiplas camadas planares é apresentado e um modelo matemático equivalente é obtido de forma que se possa considerar o efeito das múltiplas reflexões e transmissões ocorridas nas diferentes camadas.

O campo elétrico em meios de múltiplas camadas planares é obtido a partir das funções diádicas de Green em uma formulação que visa a caracterização da radiação eletromagnética de fontes representadas por densidades de corrente sobre estes meios [29]. O desenvolvimento das funções diádicas de Green é realizado para o caso de uma fonte de dimensões pequenas o suficiente para ser desprezada, tendo em vista o comprimento de onda utilizado. Nesta situação, as fontes podem ser modeladas por dipolos infinitesimais [2][52].

Será apresentado o desenvolvimento das funções diádicas de Green para o sensor SPCE a partir da caracterização da radiação de um dipolo sobre um meio de múltiplas camadas. O desenvolvimento parte da Identidade de Sommerfield [53] e de ferramentas específicas para problemas de radiação como as transformadas de Hankel [54], sendo possível relacionar por meio da Identidade de Sommerfield, ondas planas com ondas esféricas através da transformada integral de Hankel. Isto permite caracterizar os efeitos da incidência de uma onda plana em um meio multicamada com ondas esféricas incidentes sobre a estrutura de múltiplas camadas.

## 3.2 Descrição do Sensor SPCE

O funcionamento de um sensor SPR na configuração SPCE (Fig. 16) baseia-se na interação do campo irradiado pelos analitos imobilizados com a estrutura do sensor, composto por uma fina película metálica de ouro depositado sobre o prisma [47]. Essas interações geram a onda SPP na superfície meio-externo/ouro e os modos de irradiação no prisma, que possuem uma emissão altamente direcionada ao detector em um ângulo SPCE específico que depende da re-irradiação dos analitos imobilizadas. A natureza altamente direcional da emissão SPCE também aumenta a eficiência da detecção de emissão acoplada. Semelhante ao sensor na configuração de Kretschmann, aqui a configuração SPCE é excitada por um raio laser que opera no comprimento de onda de 633nm. Neste trabalho, para efeitos de simplificação, considera-se que as nanopartículas se comportem como radiadores ópticos re-irradiando no mesmo comprimento de onda da excitação do laser. Também, ao invés de nanopartículas, poderia-se tratar de luminóforos que radiassem neste mesmo comprimento de onda.

Na Fig. 16 o sensor na configuração SPCE é ilustrado. Primeiro, uma solução com os analitos suspensos flui no canal microfluídico enquanto as nanopartículas alvo são

imobilizadas na superfície do sensor por uma substância ligante específica. Os analitos podem ser mantidos ou pela substância ligante a uma posição (altura)  $z'$  entre 20 e 200nm da interface metálica ou por um espaçador dielétrico de espessura igual a  $z'$ . Entre estas distâncias a re-irradiação óptica do analito emissor se acopla na superfície do ouro como uma onda plasmônica [20], parte desta onda de plasma se estende por entre o ouro até o prisma e neste se acopla em uma onda transversal magnética que surge em função da onda de plasma (SPP).

A maioria das fontes de luz são não polarizadas, os radiadores ópticos (analitos) avaliados irradiam luz não polarizada, o que significa dizer que a luz contém todos os elementos de polarização [55]. Apesar do analito re-irradiar ondas não polarizadas, a luz que incide no detector óptico é altamente polarizada no modo TM e chega ao detector óptico com um ângulo bem característico  $\theta$ . Este ângulo muda de acordo com o comprimento de onda de re-emissão do analito que se está analisando na superfície do metal. Sabe-se que o modo SPP é característico do modo TM, pois o campo elétrico oscila na direção normal à superfície da interface metal/dielétrico (Canal de Microfluídica). Desta forma, a onda TM é explicada devido parte da emissão óptica do emissor naturalmente ser composta por ondas neste modo. Assim, excita-se uma onda SPP na superfície meio-externo/Ouro. Em seguida, após a onda evanescente ultrapassar a fina camada metálica, ela irradiará no prisma em forma de um cone circular como uma onda propagante polarizada no modo TM. Portanto, o sensor no modo SPCE também pode ser entendido como o procedimento reverso do sensor na configuração KR. Em um sensor prático, considera-se que o ouro seja depositado sobre uma lâmina de vidro óptico com as mesmas propriedades elétricas do prisma, então esta lâmina é acoplada opticamente ao prisma.

### 3.3 Modelo Eletromagnético Equivalente do Sensor SPCE

Nesta tese, para modelagem do sensor SPCE (Fig. 16), as nanopartículas são equivalentemente modeladas por um dipolo elétrico equivalente [34][56], representado por uma fonte de corrente  $\bar{J}$  a uma posição  $z=z'$  ( $x'=y'=0$ ) do meio estratificado. Conforme a Fig. 17, considera-se que a excitação tenha induzido um dipolo vertical equivalente com  $\lambda = 633nm$  [57].

Para determinar os momentos de dipolo induzido de um arranjo de  $P$  dipolos sobre um substrato multicamada, deve-se resolver o seguinte sistema de equações lineares para  $p, q \in \{1, 2, \dots, P\}$  [34]

$$\bar{J} = \xi_p \left[ \bar{E}^{ext}(\bar{r}_p) + \bar{E}_{ref}^{ext}(\bar{r}_p) + \sum_{q=1, q \neq p}^P \bar{E}_{dip}^q(\bar{r}_p) + \sum_{q=1}^P \bar{E}_{ref}^q(\bar{r}_p) \right] \delta(\bar{r}, \bar{r}_p) \quad (3.1)$$

$$\bar{J} = \bar{J}_{0p} \delta(\bar{r}, \bar{r}_p) = (\xi_p \bar{E}_p^{total}) \delta(\bar{r}, \bar{r}_p)$$

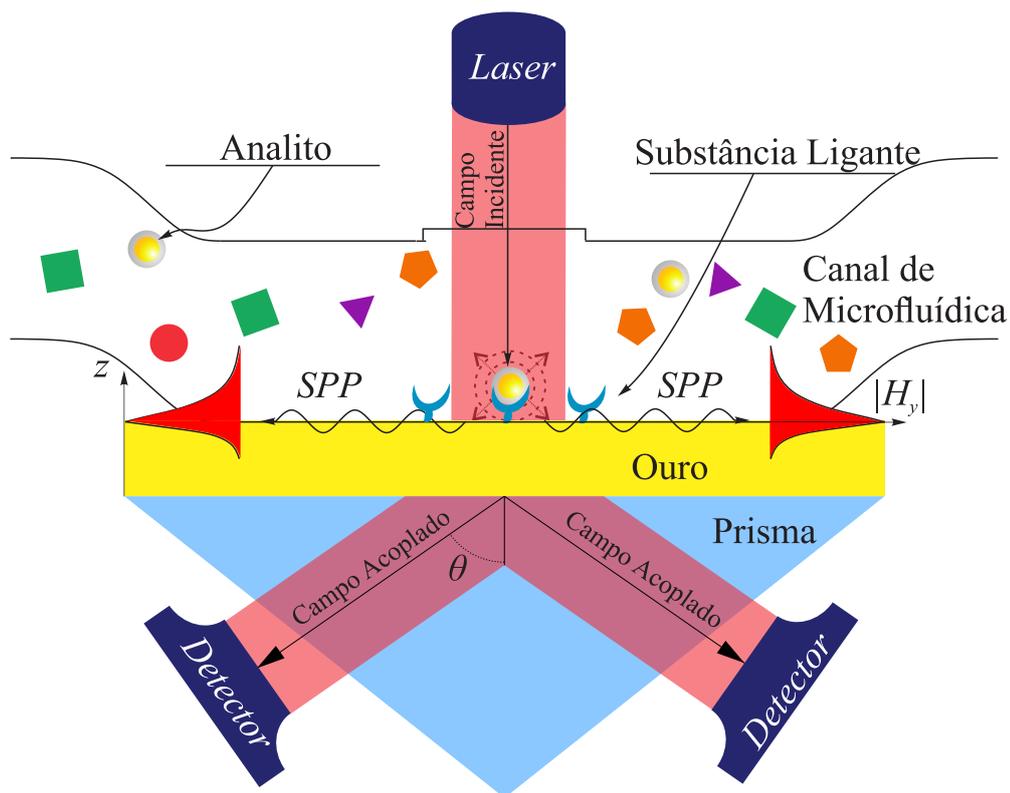


Figura 16 – Configuração SPCE, com ângulo de emissão acoplado  $\theta$ .

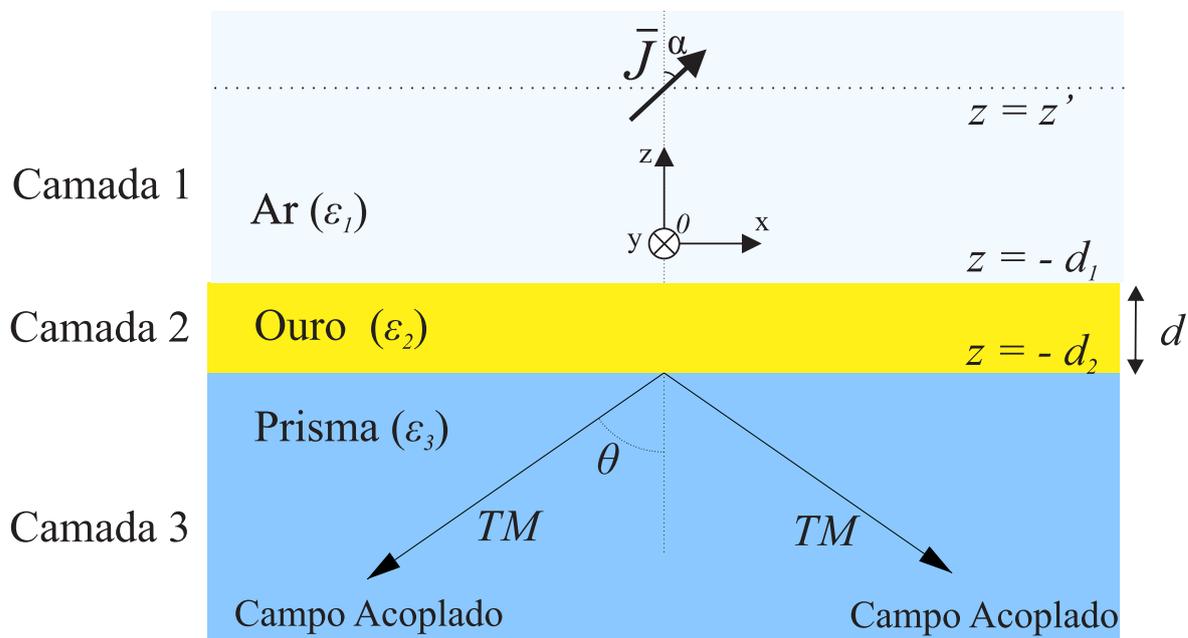


Figura 17 – Dipolo a uma altura  $z'$  da primeira interface. As características elétricas de permissividade das três camadas e a espessura da camada de ouro permanecem as mesmas do modelo KR.

onde  $\bar{r}_p$  são as posições dos  $P$  dipolos,  $\bar{E}_p^{total}$  é o campo total de excitação do dipolo equivalente, ou seja a soma de todos os campos que chegam no dipolo  $p$  e  $\xi_p$  é a constante de polarização que depende do tipo de elemento considerado (biomoléculas, QDs ou nanopartículas de ouro). Note que considera-se uma relação dipolar linear com o campo de excitação total  $\bar{E}_p^{total}$ . O campo elétrico total em (3.1) apresenta quatro termos. O primeiro representa a excitação externa (por exemplo o laser), o segundo é relativo a reflexão total que ocorre na estrutura do sensor (Ouro/Prisma) devido a excitação externa, o terceiro representa a interação individual de campo elétrico relativo a cada partícula (analito), ou seja, representa o campo elétrico re-irradiado por cada partícula que é somado através do princípio da superposição indicado pelo somatório e o quarto termo representa a reflexão total na estrutura do sensor (Ouro/Prisma) devido o campo elétrico re-irradiado por cada nanopartícula. Observa-se que o campo total produzido por um único dipolo  $q$  qualquer é  $\bar{E}^q = \bar{E}_{dip}^q + \bar{E}_{ref}^q$ , sendo que este campo pode ser calculado em todas as camadas.

### 3.4 A Idetidade de Sommerfeld: Mudança do Domínio Espectral Para o Domínio Espacial

É possível relacionar ondas esféricas com ondas planas a partir de uma identidade integral conhecida como identidade de Sommerfeld. Esta identidade pode ser obtida a partir da solução da equação escalar de onda, obtida primeiramente em coordenadas esféricas, e, posteriormente em coordenadas retangulares utilizando a transformada tridimensional de Fourier [29]. Desta forma, uma onda esférica irradiada por uma fonte pontual na origem pode ser expandida como uma integral de ondas cônicas ou cilíndricas na direção  $\rho$  vezes uma onda plana na direção  $z$  sobre todos os números de onda  $k_\rho$  através da identidade de Sommerfeld [58]

$$\frac{e^{-jk|\bar{r}-\bar{r}'|}}{|\bar{r}-\bar{r}'|} = \int_{-\infty}^{+\infty} dk_\rho k_\rho H_0^2(k_\rho \rho) \frac{e^{-jk_z|z-z'|}}{j2k_z} \quad (3.2)$$

onde,  $H_0^2$  é a função de Hankel do segundo tipo e ordem zero,  $r = \sqrt{\rho^2 + z^2}$  é a variável radial de um sistema em coordenadas esféricas,  $\rho = \sqrt{x^2 + y^2}$  no sistema de coordenadas cilíndricas é a variável que indica a distância da fonte  $z'$  até um ponto qualquer localizado no mesmo plano de  $z'$ ,  $k_\rho$  é uma variável de integração e a componente espectral de propagação na direção da variável  $\rho$  e assume valores reais de  $-\infty$  a  $+\infty$  e  $k_z = \pm\sqrt{k^2 - k_\rho^2}$  é também uma variável espectral de propagação de onda na direção  $z$ , isto é, a componente  $z$  de todo o espectro de constantes de ondas planas  $k$  que irão compor uma onda esférica em  $k_z$ .

As rápidas oscilações das funções de Hankel no eixo real da Eq.(3.2) tornam ineficientes ou inviáveis métodos de integração direta sobre este eixo. Conforme ilustrado na Fig. 18, em meios sem perdas, ou seja,  $Im\{k\} = 0$ , surgem pontos de descontinuidade sobre o eixo real localizados em  $k_\rho = \pm k$  ou  $k_\rho = \pm k_0$  se no espaço livre e linhas

de descontinuidade (representadas por linhas pontilhadas), estes pontos e linhas são conhecidos como pontos de ramificação e cortes de ramificação (*branch points* ou *branch cuts*), respectivamente. Também, para  $k_\rho = 0$  a função de Hankel não é definida neste ponto. Desta forma, para contornar este problema, caminhos complexos deformados no plano  $k_\rho$  têm demonstrado serem mais eficientes, um dos primeiros caminhos de integração modificados ficou conhecido como Caminho de Integração de Sommerfeld (SIP)[29] o qual é apresentado na Fig. 18.

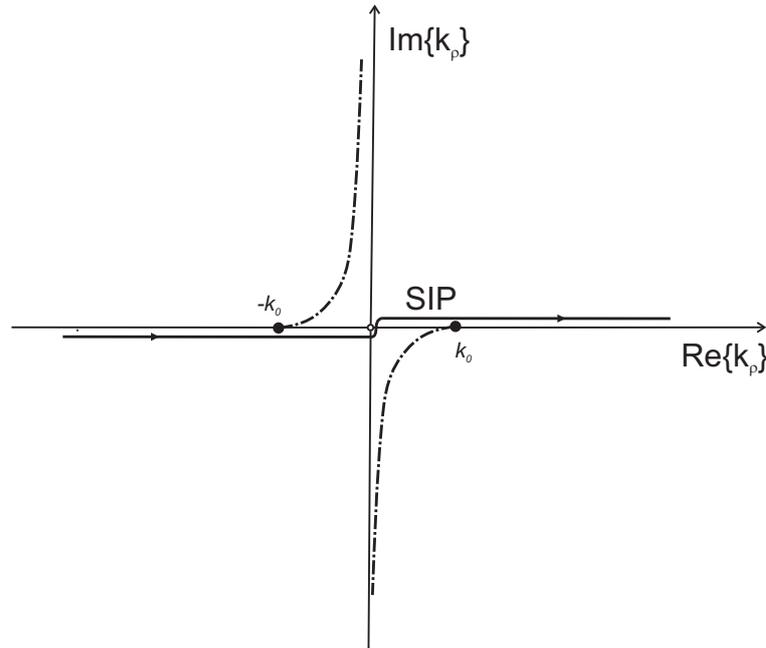


Figura 18 – Caminho de integração de Sommerfeld (SIP) mostrando pontos de ramificação e cortes de ramificação para a identidade de Sommerfeld.

Como ilustração, avalia-se a raiz quadrada de  $k_z = \pm\sqrt{k^2 - k_\rho^2}$ , contida na Eq.(3.2), observe que esta raiz quadrada pode definir dois valores possíveis, ou seja, é uma função de duplo valor, note também que a identidade de Sommerfeld define um plano complexo em  $k_\rho = \pm\sqrt{k^2 - k_z^2}$ , onde, qualquer ponto em um plano complexo  $k_\rho$  define dois pontos em um plano complexo  $k_z$ , e vice-versa. Desta forma, a integral da Eq.(3.2) é indefinida a não ser que se estipule qual dos dois valores é utilizado.

Funções de duplo valor são avaliadas em um plano complexo com o auxílio das lâminas ou folhas de Riemann, caso se tenha uma função com apenas dois valores possíveis (positivo ou negativo) se atribui a ela duas folhas de Riemann em um único plano complexo, onde, para cada folha  $k_z$  assume-se um único valor apenas de sinal contrário ao valor da outra folha de Riemann. A Fig. 19, mostra a avaliação de  $k_z$  no plano  $k_\rho$ , onde, cortes de ramificação, ou *branch cuts* são identificados pela transição nas cores do gráfico (fase em radianos), note que nos cortes de ramificação existe a mudança de transição das folhas de Riemann, onde a parte mais clara está em  $-\pi/2$  e a mais escura em  $\pi/2$ . Estes cortes de

ramificação, são cortes verticais, horizontais ou logarítmicos que sempre iniciam a partir dos pontos de ramificação ou pólos em um plano complexo e apresentam-se como uma curva no plano complexo através do qual uma função de vários valores é descontínua. Os ramos iniciam-se nos pontos de ramificação ( $\pm k$ ) e se estendem até  $\pm j\infty$ , destaca-se que a parte imaginária de  $k_z$  é nula sobre eles  $Im\{k_z\} = 0$ . Os contornos circulares na Fig. 19 representam linhas de magnitude constante. Note que, para satisfazer as condições de radiação, campo nulo no infinito, deve-se escolher apenas uma única folha de Riemann. Para dependência temporal  $e^{j\omega t}$  escolhe-se a folha positiva  $k_{nz} = \sqrt{k_n^2 - k_\rho^2}$  cujos valores da parte imaginária devem atender  $Im\{k_{zn}\} \leq 0$  e  $Re\{k_{zn}\} > 0$  [59].

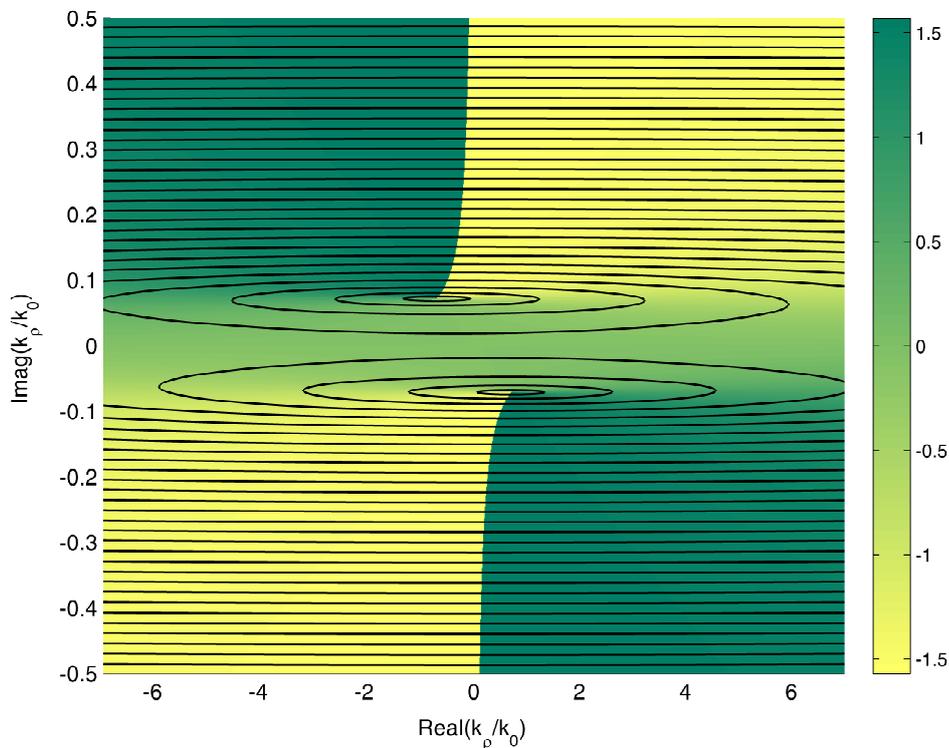


Figura 19 – Representação de  $k_z = \sqrt{k^2 - k_\rho^2}$  no plano  $k_\rho$ . Considera-se  $k = 1 - j0.1$  com perdas apenas para melhor visualização dos ramos.

O lado esquerdo da Eq.(3.2) representa uma onda esférica no domínio espacial se propagando em um meio ilimitado caracterizado pela constante de propagação de onda  $k$ , enquanto o lado direito é uma função espectral onde o integrando é a composição de dois tipos de onda: uma onda cilíndrica, caracterizada pela função de Hankel  $H_0^2$  e outra onda plana, caracterizada pelo fator  $e^{-jk_z|z-z'|}$ . Então daí diz-se que a identidade de Sommerfeld permite representar uma onda esférica através da composição de ondas cilíndricas com ondas planas.

Como mencionado, a função de Hankel  $H_0^2$  na Eq.(3.2) não é definida em  $k_\rho = 0$ , entretanto, pode ser reescrita em termos da função de Bessel de ordem  $n$  ( $J_n$ ) através da

identidade [60]

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dk_{\rho} k_{\rho} H_n^2(k_{\rho} \rho) \frac{e^{-jk_z |z-z'|}}{j2k_z} = \int_0^{+\infty} dk_{\rho} k_{\rho} J_n(k_{\rho} \rho) \frac{e^{-jk_z |z-z'|}}{jk_z}. \quad (3.3)$$

Note que o caminho de integração agora se estende apenas entre 0 e  $\infty$ . Desta forma, para representação matemática pode-se utilizar a Eq.(3.2) ou Eq.(3.3) sem qualquer perda de generalidade, no entanto, em avaliações numéricas a equação em termos da função de Bessel é geralmente utilizada por ser bem definida em  $k_{\rho} = 0$ .

Através de um par transformada de Hankel [61]

$$G(\rho, z, z') = \frac{1}{4\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk_{\rho} k_{\rho} H_0^2(k_{\rho} \rho) \tilde{G}(k_{\rho}, z, z') \quad (3.4)$$

$$e \quad \tilde{G}(k_{\rho}, z, z') = 4\pi \int_{-\infty}^{+\infty} \rho d\rho H_0^2(k_{\rho} \rho) G(\rho, z, z'), \quad (3.5)$$

devido a simetria rotacional com respeito a  $z$  na Eq.(3.2) é possível simplificar a função  $G(\bar{r}, \bar{r}')$  equivalentemente como  $G(\rho, z, z')$ , onde  $\rho$  é a projeção de  $\bar{r}$  em um plano  $xoy$  em um valor  $z$  constante. Note que,  $G(\rho, z, z')$  é uma função no domínio espacial, enquanto,  $\tilde{G}(k_{\rho}, z, z')$  é uma função no domínio espectral. Para o caso da Eq. (3.2) temos

$$\tilde{G}(k_{\rho}, z, z') = \frac{\tilde{f}(k_z, z, z')}{j2k_z} = \frac{e^{-jk_z |z-z'|}}{j2k_z}. \quad (3.6)$$

A Eq.(3.6) é de fundamental importância para entendimento do Método das Imagens Complexas Discretas (DCIM), que será explanada com mais detalhes nos capítulos seguintes.

### 3.5 Funções de Green no Espaço Homogêneo

Parte-se do caso mais simples, onde um dipolo está presente em uma região homogênea. O campo elétrico deste dipolo em uma direção arbitrária em um meio homogêneo pode ser derivado a partir das funções diádicas de Green como em [29]

$$\hat{G}^e(\bar{r}, \bar{r}') = -j\omega\mu(\hat{I} + \frac{1}{k^2} \nabla \nabla) \bar{J} \bar{G}(\bar{r}, \bar{r}') \quad (3.7)$$

onde

$$\bar{G}(\bar{r}, \bar{r}') = \frac{e^{-jk|\bar{r}-\bar{r}'|}}{4\pi |\bar{r} - \bar{r}'|} \quad (3.8)$$

é a função de Green escalar,  $\hat{I}$  é uma díade unitária,  $\bar{r} = (x', y', z')$  é o ponto de fonte,  $\bar{r} = (x, y, z)$  o ponto de observação,  $\bar{J} = \bar{\alpha} I l \delta(\bar{r}, \bar{r}')$  *A.m* é uma fonte de corrente de um dipolo com  $\bar{\alpha}$  indicando a orientação do dipolo,  $I$  é a corrente no dipolo,  $l$  é o comprimento do dipolo e  $\delta$  é a função delta de Dirac. A equação Eq.3.7 pode representar até três funções

vetoriais em apenas uma função singular consistindo de nove elementos, para o campo elétrico, as componentes são:

$$\bar{E} = -\frac{j}{4\pi\omega\epsilon} \begin{bmatrix} k^2 + \frac{\partial^2}{\partial x^2} & \frac{\partial}{\partial x\partial y} & \frac{\partial}{\partial x\partial z} \\ \frac{\partial}{\partial y\partial x} & k^2 + \frac{\partial^2}{\partial y^2} & \frac{\partial}{\partial y\partial z} \\ \frac{\partial}{\partial z\partial x} & \frac{\partial}{\partial z\partial y} & k^2 + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} J_x \\ J_y \\ J_z \end{bmatrix} \frac{e^{-jk|\bar{r}-\bar{r}'|}}{|\bar{r}-\bar{r}'|}. \quad (3.9)$$

A partir da identidade de Sommerfeld Eq.(3.2) e da transformada de Hankel Eq.(3.4) aplicadas em (3.9), obtém-se a expressão:

$$\bar{E} = -\frac{j}{4\pi\omega\epsilon} \begin{bmatrix} k^2 + \frac{\partial^2}{\partial x^2} & \frac{\partial}{\partial x\partial y} & \frac{\partial}{\partial x\partial z} \\ \frac{\partial}{\partial y\partial x} & k^2 + \frac{\partial^2}{\partial y^2} & \frac{\partial}{\partial y\partial z} \\ \frac{\partial}{\partial z\partial x} & \frac{\partial}{\partial z\partial y} & k^2 + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} J_x \\ J_y \\ J_z \end{bmatrix} \int_{-\infty}^{\infty} dk_{\rho} \frac{k_{\rho}}{j2k_z} H_0^2(k_{\rho}\rho) e^{-jk_z|z-z'|}. \quad (3.10)$$

O modo TE é predominante nos dipolos horizontais. O modo TM é predominante nos dipolos verticais. Como será descrito adiante, o surgimento de ondas plasmônicas de superfície sobre a camada de ouro na configuração SPCE exige a existência do modo TM[1], desta forma, apenas a componente vertical em  $z$  é analisada. Ressalta-se que, para o sensor na configuração SPCE, ondas SPP acoplam-se na superfície metálica do sensor (meio externo) através do modo TM, ou seja, o campo elétrico forma círculos (*loops*) que se estendem verticalmente para fora da superfície ouro/meio-externo e o campo magnético é paralelo a superfície ouro/meio-externo. Desta forma, apenas a componente vertical é avaliada, tanto para o caso homogêneo quanto para o caso do sensor SPCE. Assim, para um meio homogêneo o campo elétrico vertical é

$$E_z = -\frac{j}{4\pi\omega\epsilon_n} \left\{ J_x \frac{\partial^2}{\partial z\partial x} + J_y \frac{\partial^2}{\partial z\partial y} + J_z \left( k^2 + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \right\} \int_{-\infty}^{+\infty} dk_{\rho} \frac{k_{\rho}}{j2k_z} H_0^2(k_{\rho}\rho) e^{jk_{1z}|z-z'|} \quad (3.11)$$

com as seguintes componentes:

$$E_{zx}^n = \frac{j(x-x')}{8\pi\omega\epsilon_n\rho} \int_{-\infty}^{+\infty} dk_{\rho} k_{\rho}^2 H_1^2(k_{\rho}\rho) e^{jk_{1z}|z-z'|}, \quad (3.12)$$

$$E_{zy}^n = \frac{j(y-y')}{8\pi\omega\epsilon_n\rho} \int_{-\infty}^{+\infty} dk_{\rho} k_{\rho}^2 H_1^2(k_{\rho}\rho) e^{jk_{1z}|z-z'|} \quad (3.13)$$

$$e \quad E_{zz}^n = -\frac{j}{4\pi\omega\epsilon_n} \int_{-\infty}^{+\infty} dk_{\rho} \frac{k_{\rho}^3}{j2k_{1z}} H_0^2(k_{\rho}\rho) e^{jk_{1z}|z-z'|}. \quad (3.14)$$

Similarmente, uma análise em relação ao campo magnético, resultaria em uma função de Green diádica para o campo magnético na forma

$$\hat{G}^m(\bar{r}, \bar{r}') = \nabla \times \bar{J} \frac{e^{-jk|\bar{r}-\bar{r}'|}}{4\pi|\bar{r}-\bar{r}'|} \hat{I} \quad (3.15)$$

assim, para o campo magnético resulta-se

$$\vec{H} = -\frac{1}{4\pi} \begin{bmatrix} 0 & -\frac{\partial}{\partial z} & \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} & 0 & -\frac{\partial}{\partial x} \\ -\frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial x} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} J_x \\ J_y \\ J_z \end{bmatrix} \bar{J} \frac{e^{-jk|\bar{r}-\bar{r}'|}}{|\bar{r}-\bar{r}'|}. \quad (3.16)$$

Considerando-se  $r'$  na origem, pode-se utilizar as seguintes relações

$$\frac{\partial}{\partial x} \frac{e^{-jkr}}{r} = -x \frac{e^{-jkr}}{r^2} \left( jk + \frac{1}{r} \right), \quad (3.17)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \frac{e^{-jkr}}{r} = \frac{e^{-jkr}}{r^2} \left\{ kr + \frac{1}{r} + \frac{x^2}{r} \left( k^2 - j \frac{3k}{r} - \frac{3}{r^2} \right) \right\} \quad (3.18)$$

$$e \quad \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} \frac{e^{-jkr}}{r} = \frac{\partial^2}{\partial y \partial x} \frac{e^{-jkr}}{r^2} = -xy \frac{e^{-jkr}}{r^2} \left( k^2 - j \frac{3k}{r} - \frac{3}{r^2} \right). \quad (3.19)$$

Onde todas as componentes eletromagnéticas poderiam ser derivadas no meio homogêneo.

### 3.6 Funções de Green em Meios Estratificados de Múltiplas Camadas

No caso em questão, o interesse está voltado para relacionar o comportamento de ondas planas incidentes sobre uma estrutura multicamada, apresentado no Capítulo 2, com o comportamento de fontes do tipo dipolo que irradiam ondas esféricas, da configuração SPCE. A importância da Eq.(3.10) consiste no fato de que com esta representação pode-se facilmente estender a Eq.(3.11), descrita em um meio homogêneo, para um meio de múltiplas camadas submetido a ondas geradas por um dipolo. A definição de coeficientes de reflexão e transmissão em uma interface entre dois meios somente possui sentido para ondas planas, no entanto, devido à expansão em termos de ondas planas é possível generalizar a formulação do campo elétrico para diferentes camadas. Esta representação facilita a identificação das componentes de campo e também identifica cada Região através de um índice  $n$ , onde, assim, se obtêm equações elegantes e capazes de representar a componente  $z$  do campo elétrico em todas as regiões através de [34]:

$$E_z = -\frac{j}{4\pi\omega\epsilon_n} \left\{ J_x \frac{\partial^2}{\partial z \partial x} + J_y \frac{\partial^2}{\partial z \partial y} + J_z \left( k^2 + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \right\} \int_{-\infty}^{+\infty} dk_\rho \frac{k_\rho}{j2k_{nz}} H_0^2(k_\rho \rho) A_n^{TM} \left[ e^{jk_{nz}z} + \tilde{R}_{n,n+1}^{TM} e^{-jk_{nz}(z+2d_n)} \right] e^{-jk_{1z}z'} \quad (3.20)$$

onde, deriva-se da Eq.(3.20) as seguintes componentes

$$E_{zx}^n = \frac{j(x-x')}{8\pi\omega\epsilon_n\rho} \int_{-\infty}^{+\infty} dk_\rho k_\rho^2 H_1^2(k_\rho \rho) A_n^{TM} \left[ e^{jk_{nz}z} + \tilde{R}_{n,n+1}^{TM} e^{-jk_{nz}(z+2d_n)} \right] e^{-jk_{1z}z'}, \quad (3.21)$$

$$E_{zy}^n = \frac{j(y-y')}{8\pi\omega\epsilon_n\rho} \int_{-\infty}^{+\infty} dk_\rho k_\rho^2 H_1^2(k_\rho \rho) A_n^{TM} \left[ e^{jk_{nz}z} + \tilde{R}_{n,n+1}^{TM} e^{-jk_{nz}(z+2d_n)} \right] e^{-jk_{1z}z'}, \quad (3.22)$$

$$E_{zz}^n = -\frac{j}{4\pi\omega\epsilon_n} \int_{-\infty}^{+\infty} dk_\rho \frac{k_\rho^3}{j2k_{1z}} H_0^2(k_\rho \rho) A_n^{TM} \left[ e^{jk_{nz}z} + \tilde{R}_{n,n+1}^{TM} e^{-jk_{nz}(z+2d_n)} \right] e^{-jk_{1z}z'}. \quad (3.23)$$

Note que a Eq.(3.20) representa o campo elétrico vertical do dipolo sobre o meio de múltiplas camadas. Para análise, a polarização principal relativa a um dipolo vertical na direção  $z$  ( $J_z = 1$ ) é avaliada, as demais componentes são desprezadas  $J_x = J_y = 0$ .

Diferente dos coeficientes de amplitude e reflexão generalizados, Eq.(2.20) a (2.23), que possuem valores fixos para cada ângulo de incidência em cada camada, os coeficientes  $A_n^{TM}(k_\rho)$  e  $\tilde{R}_{n,n+1}^{TM}(k_\rho)$  da Eq.(3.20) são agora funções espectrais dependentes de um caminho  $k_\rho$  que varia entre  $-\infty$  e  $+\infty$  para todos os pontos coordenados  $(\rho, z)$  da função espacial. Ou seja, em cada ponto  $(\rho, z)$  de um domínio de análise é necessário solucionar a integral da Eq.(3.20). Observe também que em um meio de múltiplas camadas o valor de  $k_\rho$  depende de  $k_z$  e vice-versa.

Para radiadores ópticos pontuais, as ondas plasmônicas de superfície se espalham em um comportamento cilíndrico ao redor do ponto de excitação [62]. O fenômeno das ondas de superfície (modos guiados), é significativo nos materiais com alta constante dielétrica relativa e grande espessura [63]. Em meios de múltiplas camadas conforme o mostrado na Fig. 17 modelado através da Eq.(3.20) surgem modos de onda associados a pólos plasmônicos de superfície SPP e pólos de onda de superfície SWP (modos guiados), além de quatro cortes de ramificação relacionados a pontos de ramificação da primeira e última camada da estrutura [60], ou seja, a camada do topo e de baixo do sensor ( $k_\rho = \pm k_0$  e  $k_\rho = \pm k_0 \sqrt{\varepsilon_r}$ ), onde,  $\varepsilon_r$  é a permissividade relativa da  $n$ ésima região  $N$ . Em estruturas com perdas estes pólos não estão dispostos no eixo real. Os pólos, pontos de ramificação e cortes de ramificação são representados no plano complexo  $k_\rho$  através de quatro folhas de Riemann, suas localizações aproximadas para o sensor analisado são mostradas na Fig. 20, onde também é possível observar que para o eixo negativo de  $k_\rho$  surge um corte de ramificação, relacionado as funções de Hankel.

O pólo de onda de superfície (SWP) está concentrado no intervalo entre ( $k_\rho = \pm k_0, k_{\rho_{lim}}$ )[64], sendo que para a configuração SPCE aqui apresentada  $k_{\rho_{lim}} = \pm k_0 \sqrt{\varepsilon_{rN}} = \pm 1.517k_0$ . O pólo SPP está concentrado no intervalo onde sua parte real é maior que a parte real do ponto de ramificação mais distante da origem, ou seja,  $Re(k_{SPP}) > Re(k_{\rho_{lim}})$ , esta condição do pólo SPP também caracteriza ondas evanescentes na direção  $z$ . O pólo SWP contribui diretamente nas ondas de superfície entre a Camada de 2 para 3 da Fig. 17 e o pólo SPP contribui para as ondas plasmônicas de superfície na interface das Camadas de 1 para 2. Nota-se, a partir da Fig. 21 que para a estrutura do sensor analisado existem apenas um pólo SWP significativo e um pólo SPP, no entanto, o número de pólos poderia ser diferente, pois, estes são dependentes da geometria da estrutura e das constantes dielétricas das camadas envolvidas.

O pólo SWP possui menor contribuição na formulação, pois, em geometrias de finas camadas, as principais contribuições de guiamento para o problema consistem apenas nas ondas plasmônicas de superfície, ou seja, devido o pólo SPP, este fato é comprovado

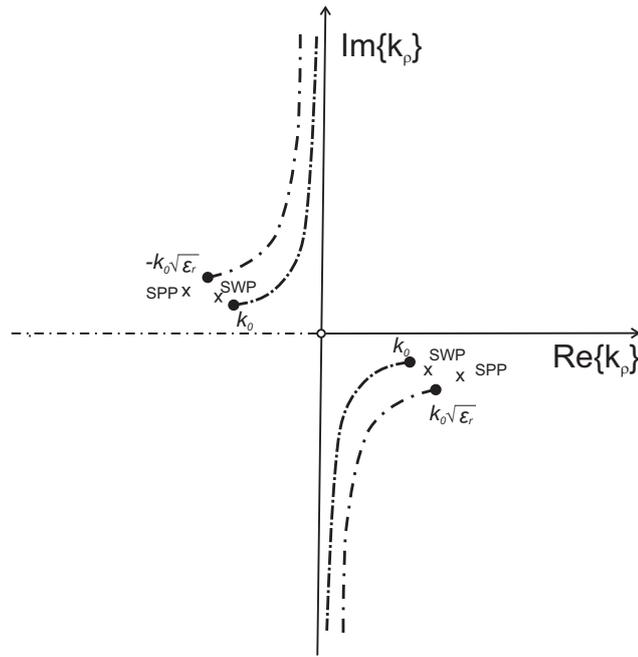


Figura 20 – Localização aproximada dos polos, cortes de ramificação e pontos de ramificação da Eq.(3.20)

através da avaliação dos coeficientes de reflexão envolvidos na Eq.(3.20), conforme Fig. 21, observa-se que a contribuição do pólo SPP é muito maior que o pólo SWP para o sensor analisado.

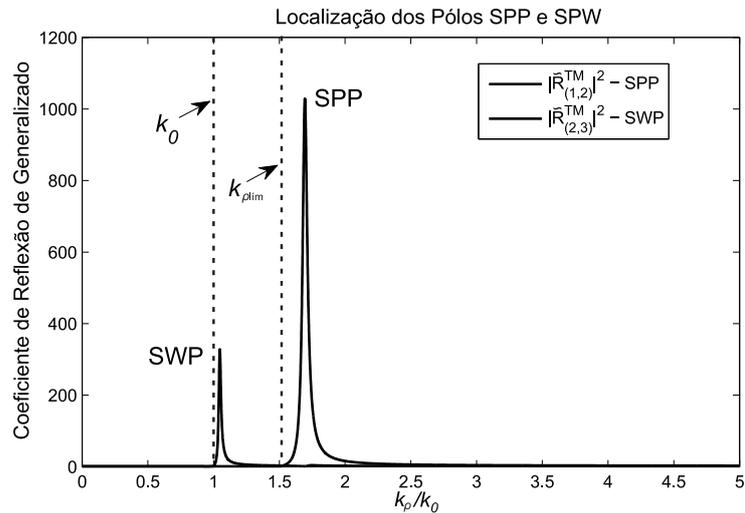


Figura 21 – Influência do pólo SWP e SPP, localizados em  $k_{SWP}$  e  $k_{SPP}$ , respectivamente, para o Coeficiente de Reflexão generalizado da estrutura multicamada do sensor na configuração SPCE.

O pólo SPP, na configuração SPCE, igualmente a configuração KR pode ser obtido anulando-se o denominador do coeficiente de reflexão generalizado obtido da segunda para

a terceira camada, ou seja, o coeficiente de reflexão de Fresnel. Desta forma, tem-se que a posição do pólo SPP para a configuração SPCE é dada por

$$k_\rho = \pm \sqrt{\frac{\varepsilon_2^2 k_1^2 - \varepsilon_1^2 k_2^2}{(\varepsilon_2^2 - \varepsilon_1^2)}} = \pm k_{SPP} \quad (3.24)$$

onde,  $k_{SPP} = \pm(1.6929 - j0.0217)k_0$ .

A avaliação das integrais derivadas da Eq.(3.20) possuem dificuldades que podem ser destacadas [60]:

- Rápidas oscilações das funções de Hankel;
- Em  $k_\rho = 0$  a função de Hankel não é definida;
- Baixa convergência do Kernel de integração;
- Necessidade de integração sobre amplo domínio ( $-\infty$  a  $+\infty$ );
- Surgimento de pontos de ramificação e cortes de ramificação (*branch points ou branch cuts*). Em meios sem perdas  $Im\{k\} = 0$ ,  $k_\rho = \pm k_0$ ;
- Aparecimento de funções de duplo ou múltiplos valores;
- A escolha de uma única folha de Riemann apropriada (folha positiva  $k_{nz} = \sqrt{k_n^2 - k_\rho^2}$  cujos valores da parte imaginária e real devem atender as condições de radiação:  $Im\{k_{zn}\} \leq 0$  e  $Re\{k_{zn}\} > 0$ );
- Possibilidade de existência de polos complexos;
- Comportamento divergente do integrando próximo das singularidades e ramos existentes no plano complexo  $k_\rho$ ;
- Métodos de integração direta sobre este eixo real são ineficientes ou inviáveis.

### 3.7 Generalização das Funções de Green para Aplicação do DCIM

As equações que representam o campo elétrico obtidas a partir da Eq.(3.20) não estão em um formato que se possa aplicar diretamente o DCIM. O método DCIM, que será descrito com mais detalhes no capítulo seguinte, basicamente aproxima o *kernel* de uma integral imprópria em termos de exponenciais complexas, onde, cada uma destas exponenciais representam uma imagem complexa. Em seguida utilizando-se da identidade de Sommerfeld muda-se a formulação do domínio espectral para o domínio espacial através da Eq.(3.2). Neste trabalho, de maneira inovadora, o método DCIM foi aplicado diretamente nas integrais de campo elétrico (Eq.(3.20)), que representam um dipolo ressonante sobre

múltiplas estruturas planares. Para aplicação do DCIM foram deduzidas as seguintes equações [65]:

$$E_{zx}^n = -\frac{1}{4\pi\omega\varepsilon_n} \frac{(x-x')}{\rho} \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} dk_\rho k_\rho H_1^2(k_\rho\rho) \frac{\tilde{f}_{xn}^i(k_z, z, z')}{j2k_{nz}} e^{-jk_{nz}|z-z'|} + \int_{-\infty}^{+\infty} dk_\rho k_\rho H_1^2(k_\rho\rho) \frac{\tilde{f}_{xn}^r(k_z, z, z')}{j2k_{nz}} e^{-jk_{nz}|z-z'|} \right] \quad (3.25)$$

$$E_{zy}^n = -\frac{1}{4\pi\omega\varepsilon_n} \frac{(y-y')}{\rho} \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} dk_\rho k_\rho H_1^2(k_\rho\rho) \frac{\tilde{f}_{yn}^i(k_z, z, z')}{j2k_{nz}} e^{-jk_{nz}|z-z'|} + \int_{-\infty}^{+\infty} dk_\rho k_\rho H_1^2(k_\rho\rho) \frac{\tilde{f}_{yn}^r(k_z, z, z')}{j2k_{nz}} e^{-jk_{nz}|z-z'|} \right], \quad (3.26)$$

$$E_{zz}^n = \frac{1}{4\pi\omega\varepsilon_n} \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} dk_\rho k_\rho H_0^2(k_\rho\rho) \frac{\tilde{f}_{zn}^i(k_z, z, z') e^{-jk_{nz}|z-z'|}}{j2k_{nz}} + \int_{-\infty}^{+\infty} dk_\rho k_\rho H_0^2(k_\rho\rho) \frac{\tilde{f}_{zn}^r(k_z, z, z') e^{-jk_{nz}|z-z'|}}{j2k_{nz}} \right]. \quad (3.27)$$

onde, neste trabalho definem-se as seguintes funções espectrais:

$$\tilde{f}_{xn}^i = \frac{k_{nz} k_\rho A_n^{TM} e^{j(k_{nz}z - k_{1z}z')}}{e^{-jk_{nz}|z-z'|}}, \quad \tilde{f}_{xn}^r = \frac{k_{nz} k_\rho A_n^{TM} \tilde{R}_{n,n+1}^{TM} e^{-j(k_{nz}(z+2d_n) + k_{1z}z')}}{e^{-jk_{nz}|z-z'|}}, \quad (3.28)$$

$$\tilde{f}_{xn}^i = \frac{k_{nz} k_\rho A_n^{TM} e^{j(k_{nz}z - k_{1z}z')}}{e^{-jk_{nz}|z-z'|}}, \quad \tilde{f}_{xn}^r = \frac{k_{nz} k_\rho A_n^{TM} \tilde{R}_{n,n+1}^{TM} e^{-j(k_{nz}(z+2d_n) + k_{1z}z')}}{e^{-jk_{nz}|z-z'|}}, \quad (3.29)$$

$$\tilde{f}_{zn}^i = \frac{k_{nz} k_\rho^2 A_n^{TM} e^{j(k_{nz}z - k_{1z}z')}}{jk_{1z} e^{-jk_{nz}|z-z'|}} \quad e \quad \tilde{f}_{zn}^r = \frac{k_{nz} k_\rho^2 A_n^{TM} \tilde{R}_{n,n+1}^{TM} e^{-j(k_{nz}(z+2d_n) + k_{1z}z')}}{jk_{1z} e^{-jk_{nz}|z-z'|}}. \quad (3.30)$$

Em que os índices  $i$  e  $r$  são aqui tratados como sendo uma contribuição espectral equivalente relacionada a incidência e reflexão na estrutura de múltiplas camadas.

Utilizando a Eq.(3.3) pode-se também reescrevê-las como

$$E_{zx}^n = -\frac{(x-x')}{4\pi\omega\varepsilon_n\rho} \left[ \int_0^{+\infty} dk_\rho k_\rho J_1(k_\rho\rho) \tilde{G}_1^x(k_\rho, z, z') + \int_0^{+\infty} dk_\rho k_\rho J_1(k_\rho\rho) \tilde{G}_2^x(k_\rho, z, z') \right] \quad (3.31)$$

$$E_{zy}^n = -\frac{(y-y')}{4\pi\omega\varepsilon_n\rho} \left[ \int_0^{+\infty} dk_\rho k_\rho J_1(k_\rho\rho) \tilde{G}_1^y(k_\rho, z, z') + \int_0^{+\infty} dk_\rho k_\rho J_1(k_\rho\rho) \tilde{G}_2^y(k_\rho, z, z') \right] \quad (3.32)$$

$$E_{zz}^n = \frac{1}{4\pi\omega\varepsilon_n} \left[ \int_0^{+\infty} dk_\rho k_\rho J_0(k_\rho\rho) \tilde{G}_1^z(k_\rho, z, z') + \int_0^{+\infty} dk_\rho k_\rho J_0(k_\rho\rho) \tilde{G}_2^z(k_\rho, z, z') \right] \quad (3.33)$$

onde,

$$\tilde{G}_1^x = \frac{\tilde{f}_{xn}^i(k_z, z, z')}{jk_{nz}} e^{-jk_{nz}|z-z'|}, \quad \tilde{G}_2^x = \frac{\tilde{f}_{xn}^r(k_z, z, z')}{jk_{nz}} e^{-jk_{nz}|z-z'|}, \quad (3.34)$$

$$\tilde{G}_1^y = \frac{\tilde{f}_{yn}^i(k_z, z, z')}{jk_{nz}} e^{-jk_{nz}|z-z'|}, \quad \tilde{G}_2^y = \frac{\tilde{f}_{yn}^r(k_z, z, z')}{jk_{nz}} e^{-jk_{nz}|z-z'|}, \quad (3.35)$$

$$\tilde{G}_1^z = \frac{\tilde{f}_{zn}^i(k_z, z, z')}{jk_{nz}} e^{-jk_{nz}|z-z'|}, \quad \tilde{G}_2^z = \frac{\tilde{f}_{zn}^r(k_z, z, z')}{jk_{nz}} e^{-jk_{nz}|z-z'|}, \quad (3.36)$$

Onde, nota-se que a formulação em termos da função de Bessel é bem definida na origem.

### 3.8 Considerações Finais

A fundamentação teórica aqui apresentada parte da Transformação das Funções de Green do domínio espectral para o domínio espacial. Equações generalistas para o campo elétrico de um dipolo são aqui obtidas em equações elegantes e no estado da arte para aplicação do DCIM para qualquer número de camadas. Estas equações são então solucionadas no capítulo seguinte e comparadas com métodos numéricos e com o software comercial COMSOL Multiphysics<sup>®</sup>.

## 4 Método das Imagens Complexas Discretas

### 4.1 Introdução

No capítulo anterior, foram obtidas as expressões para as funções de Green no domínio espectral para um meio de múltiplas camadas. Nesta seção, exploram-se os meios para avaliar essas integrais utilizando-se da identidade de Sommerfeld, a fim de encontrar seus valores no domínio espacial a partir da função espectral. Equações como a Eq. (3.20) são extremamente complicadas para calcular e não possuem geralmente formas fechadas de solução. As principais dificuldades de avaliação destas integrais se apresentam no caminho de integração para as funções espectrais e na natureza oscilatória das funções de Hankel, que impedem a convergência rápida da integração, além de que a implementação computacional é difícil devido o comportamento divergente do integrando nas singularidades existentes no plano  $k_\rho$  complexo [66]. Desta forma, a falta de expressões analíticas de forma fechada combinadas com um pesado custo computacional associado com a integração direta, devido a baixa convergência, tornam a avaliação numérica direta uma abordagem inviável para a nossa análise. Como solução destes problemas, várias abordagens têm sido propostas [34],[67] [68] [64]. Todas consistem na avaliação das funções espectrais utilizando a Identidade de Sommerfeld com variantes do DCIM como ferramenta de aceleração. O Método das Imagens Complexas Discretas DCIM tem sido amplamente utilizado na literatura devido à sua versatilidade, eficiência e relativa facilidade de integração, e tem encontrado uso generalizado em aplicações que se utilizem-se de problemas de múltiplas interfaces [69] [70]. No entanto, geralmente as aplicações encontradas não estão em frequências ópticas ou terminam a última camada por paredes condutoras, também, a aplicação do método têm se limitado a soluções baseadas na aproximação do *kernel* obtido através do vetor potencial magnético e da função potencial escalar [71]. A abordagem aqui utilizada, diferente das anteriores, não se utiliza das funções potenciais, e aplica o DCIM de maneira inovadora diretamente sobre as equações integrais de campo Elétrico, introduzindo uma aplicação versátil para utilização do DCIM e uma metodologia de aplicação do DCIM diretamente sobre as equações integrais de campo elétrico.

O DCIM expande as equações integrais de Sommerfeld em um somatório de termos complexos, ou seja, estima valores de integrais complexas sobre um caminho de integração no domínio dos complexos, geralmente com variação entre  $[-\infty, \infty]$  ou  $[0, \infty]$ , por um número finito de amostras do integrando. Utiliza-se um esquema sofisticado, onde o integrando é aproximado por uma superposição de exponenciais complexas.

## 4.2 Aproximação do Caminho de Integração em Dois Níveis

Observe que a integral da Eq.(3.20) se estende entre  $-\infty$  e  $+\infty$ . Para exemplificar a aproximação de segundo nível, considera-se inicialmente um caminho complexo fechado, de acordo com o mostrado na Fig. 22. Esta figura identifica o caminho complexo total de integração sobre o plano complexo mostrado na Fig. 20. Quando  $R \rightarrow \infty$  a contribuição do campo elétrico sobre os caminhos  $C_3$ ,  $C_6$  e  $C_9$  devem anular-se para atender às condições de radiação nula no infinito [60]. A contribuição da integral sobre os caminhos  $C_4$ ,  $C_5$ ,  $C_7$ ,  $C_8$  sobre os pólos não se anulam, mas são evitadas através do DCIM. O método DCIM cria um caminho de integração deformado e alternativo ao SIP definido por  $C_1$ ,  $C_2$ ,  $C_{10}$  e  $C_{11}$  que afasta-se destas singularidades a fim de evitar a necessidade de exclusão das mesmas [67]. A integral da Eq.(3.20) pode ser modificada para integrais apenas sobre os caminhos  $C_1$  e  $C_2$ , ou seja, entre 0 e  $+\infty$  através da equação de Bessel, Eq.(3.33), de tal forma que apenas dois caminhos são necessários para aplicação do método [27]. Então, o primeiro caminho parte do primeiro quadrante e contorna todos os cortes de ramificação e pólos existentes, afastando-se dos mesmos. Assim, nenhuma singularidade é encontrada no caminho de aproximação, desta forma, note que é possível aproximar as integrais da Eq.(3.26) a (3.28) truncando o segundo caminho em um ponto distante da origem, pois, no infinito, a contribuição do campo é nula.

Observe que o caminho resultante busca afastar-se ao máximo dos pólos SPP e SWP, a fim de evitar cálculos mais complexos que envolvam a exclusão de suas contribuições através da teoria dos resíduos complexos. Como descrito em [69], a extração destes pólos de superfície em meios de multiplas camadas pode até mesmo não ser possível. Também, [72] provou que o cálculo do campo próximo é impreciso caso a contribuição de onda de superfície seja extraída diretamente a partir das funções espectrais de Green.

O método DCIM parametriza os caminhos de integração  $C_1$  e  $C_2$  através de um parâmetro  $t \in [0, T_2]$ . Os caminhos complexos  $C_1$  e  $C_2$  podem ser mapeados no plano complexo  $k_\rho$  ou  $k_z$  (Fig. 23a e Fig. 23b, respectivamente),  $k_\rho$  é igual para todas as camadas e  $k_z$  muda para cada camada, mas seu formato continua semelhante.

Os caminhos complexos  $C_1$  e  $C_2$  podem ser mapeados no plano complexo  $k_\rho$  para todas a  $n$  camadas por [69]

$$C_1 : k_\rho = k_0 \sqrt{1 - [-jt + (1 - \frac{t}{T_2})]^2}, \quad 0 \leq t \leq T_2 \quad (4.1)$$

$$e \quad C_2 : k_\rho = k_0 \sqrt{1 + (T_2 + t)^2}, \quad 0 \leq t \leq T_1. \quad (4.2)$$

$T_1$  está relacionado aos valores de  $k_\rho$  que contornam os pólos e  $T_2$  está relacionado ao ponto de truncagem usado para substituir o infinito na integração. Desta forma, define-se valores para  $T_1$  e  $T_2$  de tal forma que  $k_{\rho_1}$  seja ligeiramente maior que a localização de todos os pólos que deseja-se contornar. Assim,  $k_{\rho_1} = k_0 \sqrt{1 + T_2^2}$  e  $k_{\rho_2} = k_0 \sqrt{1 + (T_1 + T_2)^2}$ .

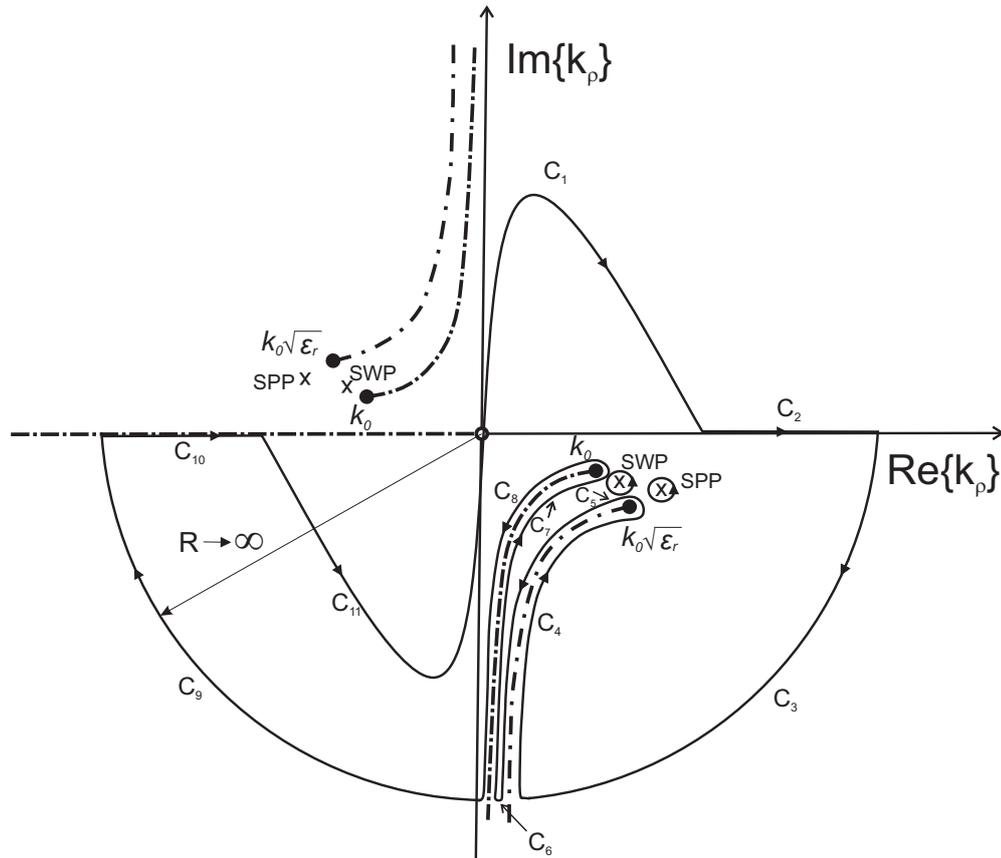


Figura 22 – Plano complexo  $k_p$  que mostra o caminho de integração completo que resulta em uma aproximação de segundo nível. Nesta figura, todos os pólos do integrando e cortes de ramificação da raiz quadrada e o relacionado a função de Hankel são mostrados.

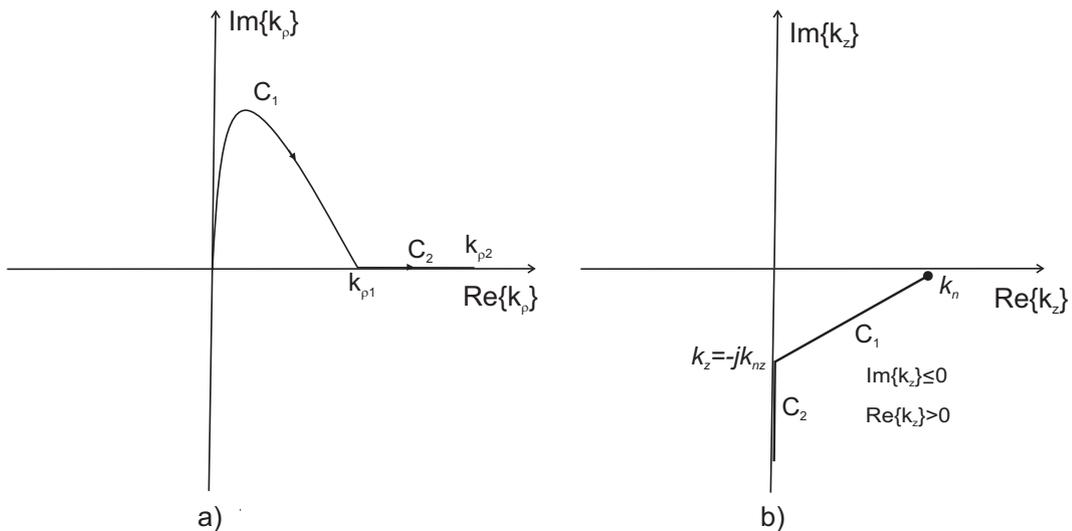


Figura 23 – a) Caminho de integração  $C_1$  e  $C_2$  no plano complexo  $k_p$  e b) Caminho de integração  $C_1$  e  $C_2$  no plano complexo  $k_z$ .

Os mesmos caminhos complexos  $C_1$  e  $C_2$  também podem ser mapeados diretamente no plano complexo  $k_z$  através de  $k_{nz} = \sqrt{k_n^2 - k_\rho^2}$ , conforme Fig. 23b), ou para todas as  $n$  camadas como

$$C_1 : k_{nz} = k_n[-jt + (1 - \frac{t}{T_2})], \quad 0 \leq t \leq T_2 \quad (4.3)$$

$$e \quad C_2 : k_{nz} = -jk_n(T_2 + t), \quad 0 \leq t \leq T_1. \quad (4.4)$$

A aproximação de segundo nível sem a extração dos pólos de superfície complexos foi proposta inicialmente para reduzir a complexidade da aproximação e estender o intervalo de validade em relação ao caminho de Sommerfeld SIP. No entanto, apesar do caminho parametrizado afastar-se dos pólos, não se elimina completamente sua contribuição. Isto resulta em erros de aproximação que em campos distantes se acumulam para altos valores de  $k_\rho$ , o que limita o método a regiões de campo próximo.

### 4.3 Detalhes da Aproximação de Segundo Nível

Neste tópico, apresenta-se o formalismo para aproximação via DCIM das Equações (3.30) que são o *kernel* das integrais da Equação (3.33). Pretende-se aproximar o *kernel* destas integrais por somatórios de funções exponenciais complexas em  $k_z$  para depois utilizar a identidade de Sommerfeld para transformação do domínio espectral para o domínio espacial. Note que aproximações diretas no *kernel* ao longo dos caminhos  $C_1$  e  $C_2$  no plano  $k_\rho$ , Fig. 23a), resultariam em exponenciais complexas também em  $k_\rho$ , o que não satisfaz a aproximação proposta, ou seja, de que estes coeficientes sejam aproximados apenas por exponenciais complexas em  $k_z$  para que depois sejam equivalentemente transformadas para o domínio espacial através da identidade de Sommerfeld. Observe que a Eq. (3.33) possui a forma

$$G_n(\bar{r}, \bar{r}') = \int_0^{+\infty} dk_\rho k_\rho J_0(k_\rho \rho) \frac{\tilde{f}_n(k_{nz}) e^{-jk_{nz}|z-z'|}}{jk_{nz}} \quad (4.5)$$

onde  $G_n$  é a função de Green no domínio espacial para uma camada  $n$  qualquer associada com uma fonte em  $z = z'$  no espaço livre. A integral (4.5) não possui um resultado analítico em forma fechada. Desta forma, a ideia do DCIM é aproximar as funções  $\tilde{f}_n(k_{nz})$  por exponenciais complexas e utilizar a identidade de Sommerfeld (3.2) de tal maneira que  $G_n$  seja determinado em uma forma fechada semianalítica, pois trata-se de um método analítico de solução aproximada.

A Eq.(4.5) pode ser reescrita como sendo a soma das integrais sobre os caminhos  $C_1$  e  $C_2$ :

$$G_n(\bar{r}, \bar{r}') = \int_0^{+\infty} dk_\rho k_\rho J_0(k_\rho \rho) \frac{[\tilde{f}_n^{C_1}(k_{nz}) + \tilde{f}_n^{C_2}(k_{nz})] e^{-jk_{nz}|z-z'|}}{jk_{nz}} \quad (4.6)$$

onde observa-se que  $\tilde{f}_n^{C_1}$  e  $\tilde{f}_n^{C_2}$  representam, individualmente, a aproximação da função nos caminhos  $C_1$  e  $C_2$ , respectivamente. Assim, note que

$$\tilde{f}_n^{C_1}(k_{nz}) = \tilde{f}_n(k_{nz}) - \tilde{f}_n^{C_2}(k_{nz}). \quad (4.7)$$

Então, substituindo-se a Eq.(4.7) na Eq.(4.6), temos

$$G_n(\bar{r}, \bar{r}') = \int_0^{+\infty} dk_\rho k_\rho J_0(k_\rho \rho) \frac{[\tilde{f}_n(k_{nz}) - \tilde{f}_n^{C_2}(k_{nz}) + \tilde{f}_n^{C_2}(k_{nz})] e^{-jk_{nz}|z-z'|}}{jk_{nz}}, \quad (4.8)$$

que resulta em

$$G_n = \int_0^\infty dk_\rho k_\rho J_0(k_\rho \rho) \frac{[\tilde{f}_n(k_{nz}) - \tilde{f}_n^{C_2}(k_{nz})] e^{-jk_{nz}|z-z'|}}{jk_{nz}} + \int_0^\infty dk_\rho k_\rho J_0(k_\rho \rho) \frac{\tilde{f}_n^{C_2}(k_{nz}) e^{-jk_{nz}|z-z'|}}{jk_{nz}}. \quad (4.9)$$

Note que (4.9) resultou em duas integrais. Na primeira integral, aproxima-se  $\tilde{f}_n^{C_2}$  fixando  $A_n = 1V/m$  através do método GPOF. Matematicamente, a aproximação no caminho  $C_2$  fica

$$\tilde{f}_n^{C_2}(k_{nz}) \approx \tilde{f}_{ap}^{C_2}(k_{nz}) = \sum_{i=1}^{N_2} \alpha_i e^{\beta_i t} = \sum_{i=1}^{N_2} a_i e^{-b_i k_{nz}}; \quad k_{nz} \in C_2 \quad (4.10)$$

onde,  $N_2$  é o número de imagens complexas utilizadas na aproximação,  $\alpha_i$  e  $\beta_i$  são coeficientes complexos obtidos na aproximação via GPOF. As amplitudes complexas  $a_i$  e  $b_i$  são encontradas facilmente isolando-se  $t$  em (4.4) e substituindo em (4.10), assim

$$a_i = \alpha_i e^{-T_2 \beta_i} \quad e \quad b_i = \frac{\beta_i}{jk_n}. \quad (4.11)$$

Note que o último somatório em (4.10) é a forma aproximada de  $\tilde{f}_n(k_{nz})$  sobre o caminho  $C_2$ . Note também que o primeiro somatório da Eq.(4.10) está em função do parâmetro  $t$ , diferentemente do segundo somatório que está em função de  $k_{nz}$ .

Então, a primeira integral da Eq.(4.9), apesar de se estender até infinito, é negligenciável sobre todo o caminho  $C_2$  devido à aproximação  $\tilde{f}_{ap}^{C_2}(k_{nz})$ . Restando na primeira integral apenas a contribuição do primeiro caminho  $C_1$ . Esta contribuição no caminho  $C_1$  é obtida estendendo-se a aproximação  $\tilde{f}_{ap}^{C_2}(k_{nz})$  ao caminho  $C_1$  e utilizam-se os mesmos coeficientes  $a_i$  e  $b_i$  obtidos na Eq.(4.11), para assim encontrar o que define-se como função estendida ao caminho  $C_1$ :

$$\tilde{f}_n^e(k_{nz}) = \sum_{i=1}^{N_1} a_i e^{-b_i k_{nz}}; \quad k_{nz} \in C_1 \quad (4.12)$$

onde,  $N_1$  é o número de imagens complexas utilizadas na aproximação via GPOF para o primeiro caminho.

Já considerando negligenciável a contribuição da integração sobre o caminho  $C_2$  na integral (4.9), então, subtrai-se a contribuição da Eq.(4.12) no caminho  $C_1$  de modo a obtermos

$$\int_0^{\infty} dk_{\rho} k_{\rho} J_0(k_{\rho} \rho) \frac{[\tilde{f}_n(k_{nz}) - \tilde{f}_n^e(k_{nz})] e^{-jk_{nz}|z-z'|}}{jk_{nz}} \quad (4.13)$$

em que o integrando  $[\tilde{f}_n(k_{nz}) - \tilde{f}_n^e(k_{nz})]$  é agora aproximado no caminho  $C_1$

$$[\tilde{f}_n(k_{nz}) - \tilde{f}_n^e(k_{nz})] \approx \sum_{l=1}^{N_1} \lambda_l e^{\delta_l t} = \sum_{l=1}^{N_1} A_l e^{-B_l k_{nz}}; \quad k_{nz} \in C_1. \quad (4.14)$$

Isolando  $t$  em (4.3) e substituindo na Eq.(4.14) pode-se provar que

$$A_l = \lambda_l e^{k_l B_l} \quad e \quad B_l = \frac{\delta_l T_2}{k_n (jT_2 + 1)}, \quad (4.15)$$

onde,  $\lambda_l$  e  $\delta_l$  são coeficientes complexos obtidos na aproximação via GPOF.

Por fim, substituindo a Eq.(4.14) na Eq.(4.13) e juntamente com a Identidade de Sommerfeld Eq.(3.2) tem-se

$$\sum_{l=1}^{N_1} A_l \int_0^{+\infty} dk_{\rho} k_{\rho} J_0(k_{\rho} \rho) \frac{e^{-jk_{nz}(|z-z'| - jB_l)}}{jk_{nz}} = \sum_{l=1}^{N_1} A_l \frac{e^{-jk_n R_{n1}}}{R_{n1}} \quad (4.16)$$

onde,  $R_{n1} = \sqrt{\rho^2 + (|z - z'| - jB_l)}$  representa as distâncias verticais das imagens complexas localizadas abaixo do plano da interface  $d_n$  para o caminho de integração  $C_1$ .

Na segunda integral da Eq.(4.9), primeiramente, calcula-se  $\tilde{f}_n(k_{nz})$  e a contribuição quase-dinâmica, aqui definida por  $\tilde{f}_{nqd}^{C_2}$ , ambos ao longo do caminho  $C_2$ . A contribuição quase-dinâmica é encontrada fazendo-se  $k_{nz} = jk_{\rho}$ . Em seguida, subtrai-se a contribuição quasi-dinâmica da primeira função  $\tilde{f}_n(k_{nz})$  no caminho  $C_2$ , de modo que  $\tilde{f}_n^{C_2}(k_{nz}) = \tilde{f}_n(k_{nz}) - \tilde{f}_{nqd}^{C_2}$ , então, utilizando-se da Eq.(4.11) e da Identidade de Sommerfeld Eq.(3.2) deduz-se que a segunda integral da Eq. (4.9) é aproximada como:

$$\sum_i^{N_2} a_i \int_0^{+\infty} dk_{\rho} k_{\rho} J_0(k_{\rho} \rho) \frac{e^{-jk_{nz}(|z-z'| - jb_i)}}{jk_{nz}} = \sum_i^{N_2} a_i \frac{e^{-jk_n R_{n2}}}{R_{n2}} \quad (4.17)$$

onde,  $N_2$  representa o número de imagens complexas da fonte tipo dipolo referente ao segundo caminho e  $R_{n2} = \sqrt{\rho^2 + (|z - z'| - jb_i)}$  representa as distâncias verticais das imagens complexas localizadas abaixo do plano da interface  $d_n$ .

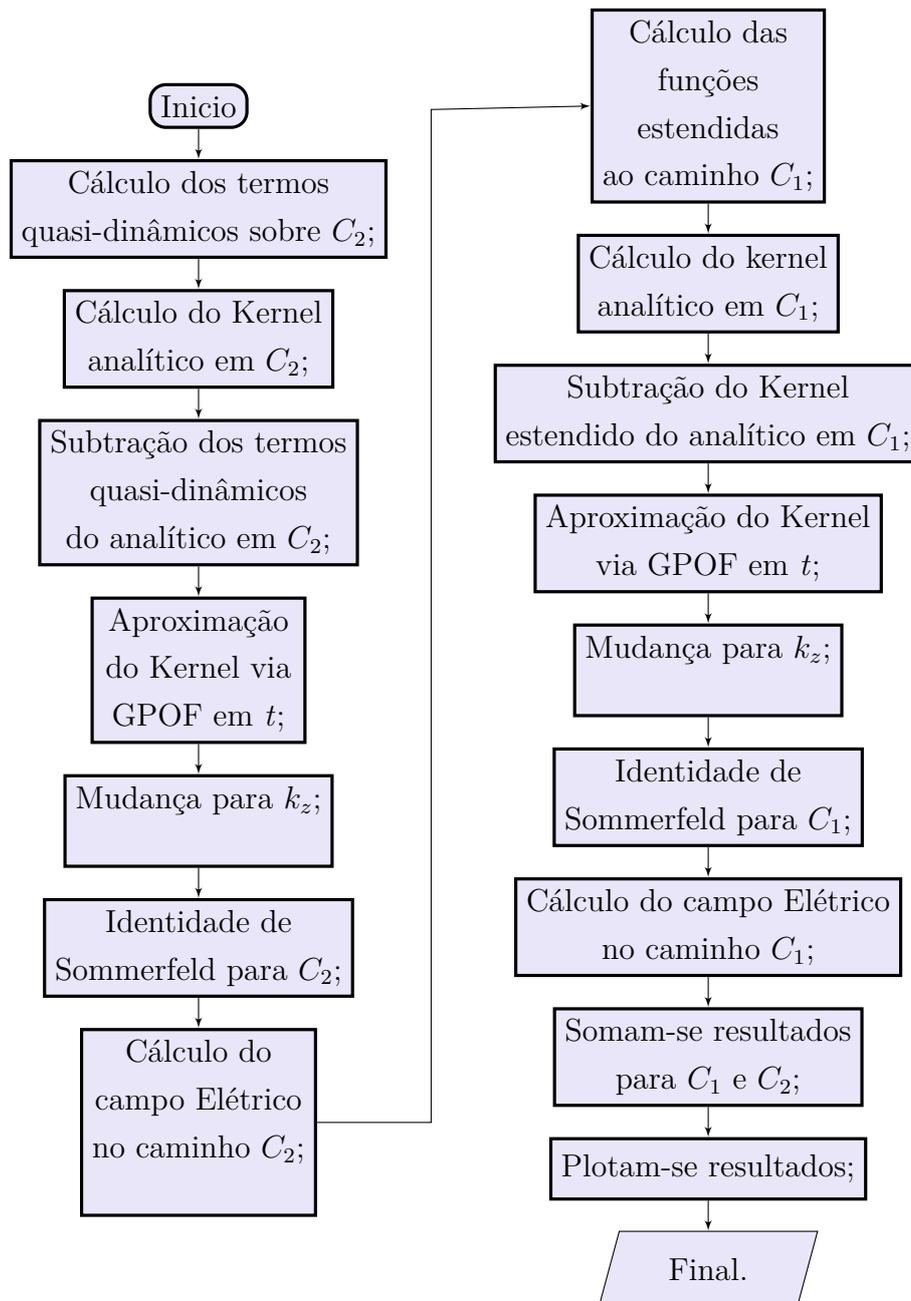
Então, finalmente somando-se a Eq.(4.16) a Eq.(4.17) chega-se a uma aproximação fechada para o problema na forma

$$G_n(\bar{r}, \bar{r}') = \sum_l^{N_1} A_l \frac{e^{-jk_n R_{n1}}}{R_{n1}} + \sum_i^{N_2} a_i \frac{e^{-jk_n R_{n2}}}{R_{n2}}. \quad (4.18)$$

A equação acima descreve apenas como são solucionadas as integrais contidas nas equações de (3.31) a (3.33).

## 4.4 Detalhes do Algoritmo de Solução

Para o sensor SPCE, foi desenvolvido um algoritmo computacional em Matlab<sup>®</sup> que é capaz de avaliar o campo próximo de radiadores ópticos do tipo dipolo sobre estruturas de múltiplas camadas planares. O fluxograma do algoritmo é apresentado a seguir e segue os passos descritos nas seções anteriores com a utilização do Método das Imagens Complexas Discretas. A rotina principal do código é apresentada no Apêndice A.



Fluxograma 1 - Principais Passos na Solução Proposta Via DCIM.

A implementação computacional do método requer uma grande quantidade de variáveis. No algoritmo, os primeiros passos são definir o domínio de análise e todas as

constantes envolvidas. Em seguida, calcula-se o Kernel, Eq.(3.30), aplicada em  $k_{nz} = jk_p$  que corresponde a contribuição quase-dinâmica e também o mesmo Kernel sobre o segundo caminho de integração. Então, parte-se para o cálculo dos coeficientes de reflexão generalizados que fazem parte do *kernel* das equações que representam incidência e reflexão apresentadas na Eq.(3.30). Todos estes coeficientes são agora dependentes da variável espectral  $k_{nz}$  e já tiveram a contribuição quasi-dinâmica previamente subtraída. Após estes passos, aplica-se o método GPOF [33] sobre o caminho  $C_2$ , primeiramente utilizando-se o parâmetro linear  $t$  que, depois, é convertido para  $k_z$ . Os resultados são, por fim, transformados através da identidade de Sommerfeld.

O software profissional COMSOL foi utilizado apenas como ferramenta de validação da teoria apresentada. Este software realiza simulações através do Método dos Elementos Finitos (FEM), que se utiliza de uma complexa malha (domínio computacional) truncada por camadas absorvedoras perfeitamente casadas (*perfectly matched layer*) PML [73].

## 4.5 Considerações Finais

O DCIM é descrito para meios de multiplas camadas, o caminho de integração de segundo nível é descrito e interpretado, detalhes do método e de sua aplicação são obtidos, equações generalistas são obtidas para aplicação a estruturas de multiplas camadas.

## 5 Resultados e Discussões

### 5.1 Introdução

Anteriormente, no decorrer do Capítulo 2 e 3 foram apresentados alguns resultados analíticos e experimentais obtidos por modelos de propagação de ondas através do coeficiente de reflexão generalizado para estruturas multicamadas. Neste capítulo, resultados baseados no sensor plasmônico na configuração SPCE são apresentados. O método DCIM, apresentado no Capítulo 4, é utilizado neste capítulo juntamente com o GPOF. Resultados são apresentados e comparados com métodos numéricos e com o software profissional COMSOL Multiphysics®. A análise teórica é focada no método DCIM aplicado aos sensores SPCE, descreve-se como as nanopartículas influenciam na capacidade de aumentar a intensidade do campo e a resposta da sensibilidade dos sensores ópticos através da diretividade da resposta de campo distante. Discutem-se o método de solução e seus resultados, apresentamos resultados de campo próximo e distante.

### 5.2 Algumas Características de um Sensor SPCE

O processo de re-emissão de NPs singulares inicialmente excitadas por uma fonte externa é equivalentemente relacionada com a emissão de um dipolo [74]. Sendo assim, do ponto de vista do eletromagnetismo clássico, uma NP irradiadora é aqui descrita como um dipolo radiando com um comprimento de onda de operação  $\lambda$  específico. Neste tópico, é apresentada uma avaliação da reciprocidade entre os sensores KR e SPCE através do formalismo apresentado no Capítulo 2 e do software COMSOL. Estes resultados foram obtidos utilizando-se um prisma óptico do tipo SF4, além de ouro e ar como meio externo, com as seguintes propriedades elétricas:  $\epsilon_{r1} = 3.06$ ,  $\epsilon_{r2} = -11.67 - j1.35$  e  $\epsilon_{r3} = 1$ , respectivamente. Nas duas configurações (KR e SPCE), utilizam-se as mesmas propriedades elétricas. O sensor opera com comprimento de onda  $\lambda = 633nm$ . O dipolo é inserido a uma altura  $z'$  da camada de ouro. Esta altura representa a localização das NPs, posicionadas através de um espaçador químico que funcione como ponte molecular entre o filme fino metálico e os analitos ou um espaçador dielétrico. A camada de ouro possui  $50nm$  de espessura. A Fig. 24 mostra a malha utilizada na avaliação do dipolo no COMSOL, através do *Radio Frequency Module*, onde são calculadas as soluções das equações de onda no domínio da frequência. Observa-se a necessidade de utilização de uma malha extremamente fina. Também são utilizadas duas camadas esféricas externas. A mais interna é definida para o cálculo do diagrama de campo distante (*Far-field*), e a de fora é atribuída como PML (*Perfect Matched Layer*) para absorção da onda nos limites da região

de análise. Não há espaço entre estas duas camadas esféricas. A malha de discretização do problema foi definida utilizando discretização com elementos tetraédricos.

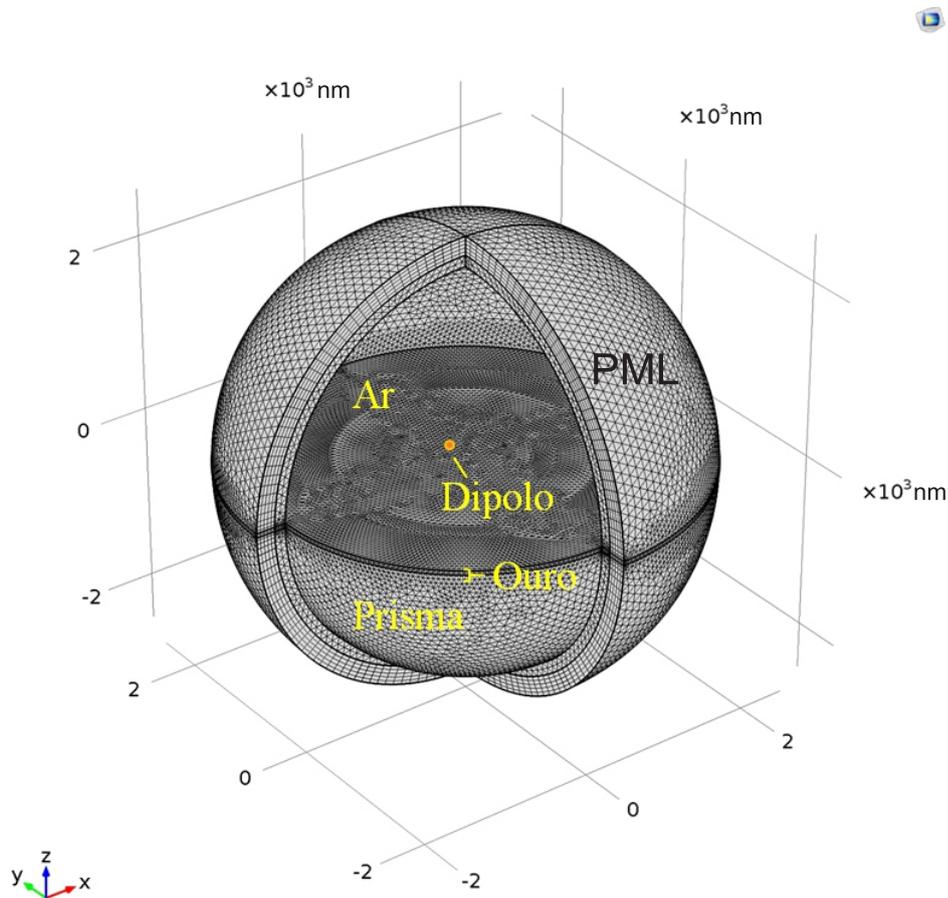


Figura 24 – Malha criada no COMSOL para avaliação do sensor SPCE.

A Fig. 25 apresenta resultados obtidos pela formulação apresentada no Capítulo 2 para o sensor KR e no COMSOL para avaliação da reciprocidade entre os sensores KR e SPCE com as configurações descritas acima, onde a Fig. 25a) mostra a parte real do campo  $H_y$  para uma onda plana incidindo no ângulo de ressonância de plasma  $\theta_{SPP} = 36.8^\circ$  no sensor KR, a Fig. 25b) mostra a parte real do campo  $E_z$  para o sensor SPCE com fonte em  $z' = 20nm$  obtido no COMSOL. Na Fig. 25b), é possível observar a formação de plasma de superfície nas direções do eixo  $x$  e  $-x$  acima da camada de ouro. Note que o eixo  $z$  foi invertido apenas para visualização da reciprocidade. A Fig. 25c) representa a fase de  $H_y$  obtida analiticamente para o sensor KR. A partir desta figura, é possível identificar a fase de incidência da onda plana sobre a camada de ouro. A Fig. 25d) ilustra a fase de  $H_y$  obtida no COMSOL para o sensor SPCE. Note que, na terceira camada, ondas planas Transversais Magnéticas (TM) são obtidas com fase recíproca à fase do sensor KR. Para as propriedades elétricas deste sensor ( $\epsilon_{r1} = 3.06$ ,  $\epsilon_{r2} = -11.67 - j1.35$  e  $\epsilon_{r3} = 1$ ), o ângulo de ressonância do sensor SPCE obtido no COMSOL ( $\theta_{SPCE} = 34.8^\circ$ ) não é mesmo do sensor KR ( $\theta_{SPP} = 36.8^\circ$ ). No entanto, observou-se que o aumento gradual

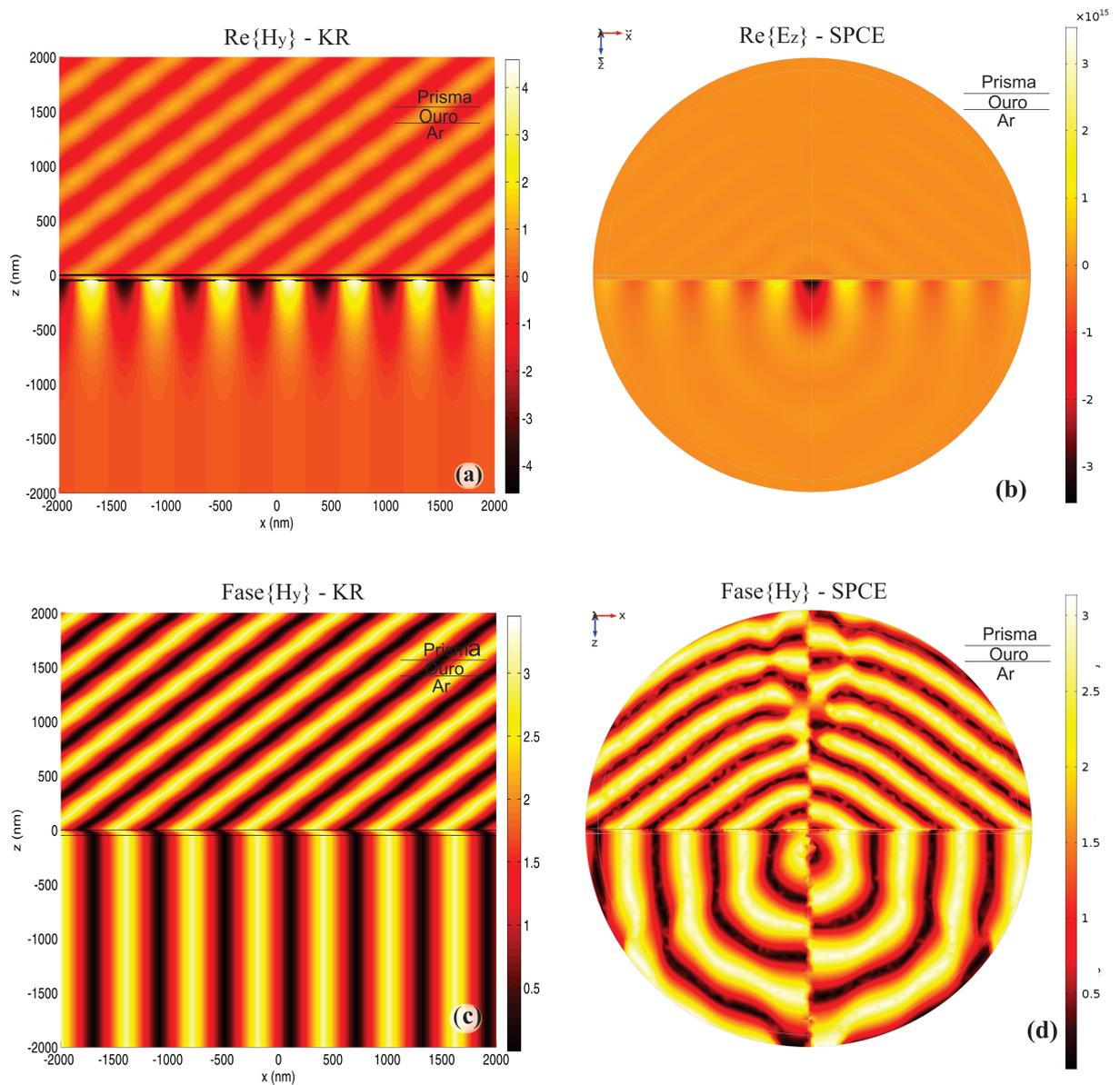


Figura 25 – Máximo acoplamento SPP para o sensor KR: a)  $\text{Re}\{H_y\}$ , c) Fase  $\text{Re}\{H_y\}$ . Acoplamento de campo no sensor SPCE b)  $\text{Re}\{E_z\}$  d) Fase de  $\{H_y\}$ .

da discretização da malha do COMSOL aproximou o ângulo de acoplamento do sensor SPCE do ângulo de ressonância de plasma do sensor KR. Entretanto, devido a limitações de recursos computacionais disponíveis para a criação da malha (estes resultados foram gerados em computador com um processador Core Intel i5-8400T, 1.7 GHz, sistema com 15GB de memória física - RAM), o melhor ângulo obtido para o ângulo acoplado no sensor SPCE para este caso foi de  $\theta_{SPP} = 34.8^\circ$ , que também possui uma excelente concordância. Sabe-se que os radiadores ópticos (analitos) avaliados irradiam luz não polarizada, o que significa dizer que a luz contém todos os elementos de polarização, nos sensores SPCE observa-se que apesar do emissor óptico ser não polarizado, a luz que irá incidir no detector

óptico na terceira camada do sensor SPCE é altamente polarizada no modo TM (Fig. 25d)). Este ângulo de acoplamento é característico dos radiadores ópticos que encontram-se na primeira camada. O surgimento desta onda polarizada no modo TM é explicado porque parte da emissão óptica do emissor está naturalmente no modo TM e excita uma onda SPP na superfície Ar/Ouro. Em seguida, após a onda evanescente ultrapassar a fina camada metálica, ela irradiará no prisma como uma onda propagante polarizada no modo TM. Portanto, o sensor no modo SPCE pode ser entendido como o recíproco eletromagnético do sensor KR.

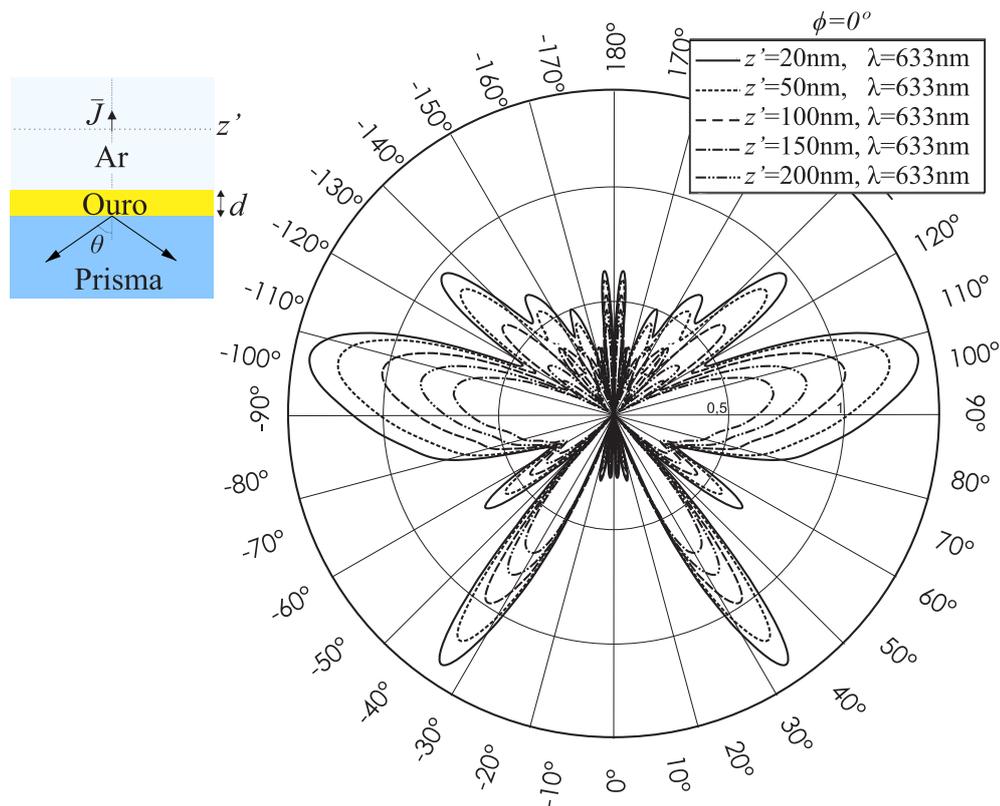


Figura 26 – Diagrama de radiação bidimensional obtido no COMSOL, avaliação da intensidade do campo distante em diferentes alturas do dipolo:  $z' = 20, 50, 100, 150$  e  $200$  nm. Mantém-se o mesmo comprimento de onda de radiação  $\lambda = 633$  nm e  $d = 50$  nm.

A Fig. 26 mostra o diagrama de campo distante bidimensional de radiação do sensor SPCE com os parâmetros apresentados neste tópico, onde mantendo-se o comprimento de onda de operação em  $\lambda = 633$  nm faz-se uma avaliação da intensidade do campo distante para diferentes alturas:  $z' = 20, 50, 100, 150$  e  $200$  nm. Note que a intensidade dos lóbulos inferiores, que dependem do campo acoplado no prisma, assim como dos lóbulos superiores, que dependem do campo total na primeira camada, aumentam de intensidade de acordo com a diminuição da altura  $z'$ . Este fato representa que o modo SPP acopla-se melhor no prisma com a proximidade das nanopartículas da interface metálica. A Fig. 27 mostra o diagrama tridimensional de campo distante do Sensor SPCE obtido no COMSOL para os

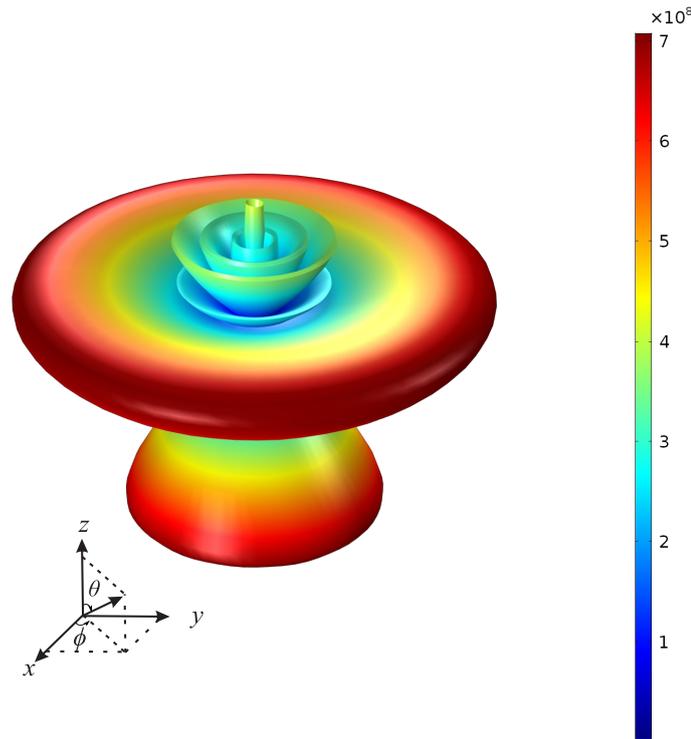


Figura 27 – Diagrama tridimensional de campo distante obtido no COMSOL.

valores de permissividade apresentados anteriormente e altura otimizada para  $z'=20\text{nm}$ . A emissão acoplada no prisma forma um cone circular. Note que a os lóbulos inferiores possuem feixes bem direcionados em um ângulo de acoplamento  $\theta_{SPC} = 34.8^\circ$ .

### 5.3 Aplicação do Método DCIM ao Sensor SPCE

Dos modelos teóricos apresentados, tem-se a base para a solução aqui proposta aos sensores SPCE. No Capítulo 2, foi avaliado o sensor na configuração KR, os quais foram avaliados analiticamente e experimentalmente. Para o sensor SPCE, também foram desenvolvidos algoritmos computacionais em Matlab (Conforme Apêndice A) que, neste tópico, são comparados com a solução numérica obtida através do software COMSOL e numérica, como será descrito adiante. Para isso, utilizam-se as mesmas propriedades elétricas do sensor KR apresentado no Capítulo 2, que são: Permissividade relativa complexa do ar (onde encontra-se o dipolo)  $\varepsilon_{r1} = 1$ , ouro  $\varepsilon_{r2} = -11.53 - j1.2$  e prisma (BK7)  $\varepsilon_{r3} = 2.3$ . No intuito de melhorar os resultados utilizou-se, a partir deste tópico, um outro computador com processador Core Intel i7-7700HQ, 2.8 GHz, sistema com 32GB de memória física - RAM.

Para a primeira camada do sensor SPCE o caminho de integração de segundo

nível apresentado na Fig. 28 foi realizado. Os seguintes parâmetros para o método DCIM foram utilizados na otimização do método:  $T_1 = 8.9$  e  $T_2 = 1.4$  para a primeira camada,  $T_1 = 20$  e  $T_2 = 0.1$  para a segunda camada e  $T_1 = 8.7$  e  $T_2 = 3.1$  para a terceira camada. O parâmetro  $t$  é discretizado 35, 50 e 40 pontos para cada camada, respectivamente. O caminho utilizado na segunda e terceira camada são semelhantes, por isso foram omitidos.

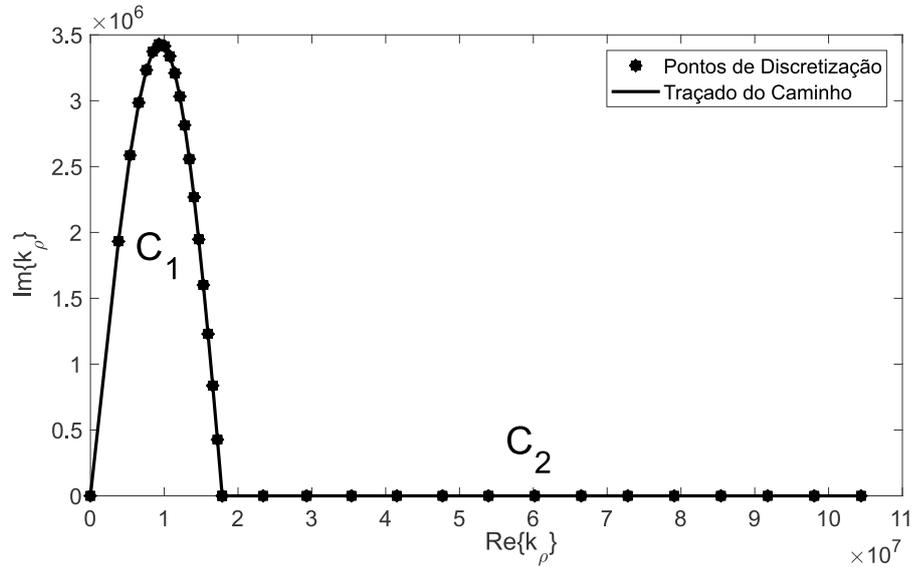


Figura 28 – Caminho de Integração Utilizado no DCIM para a primeira camada do sensor SPCE.

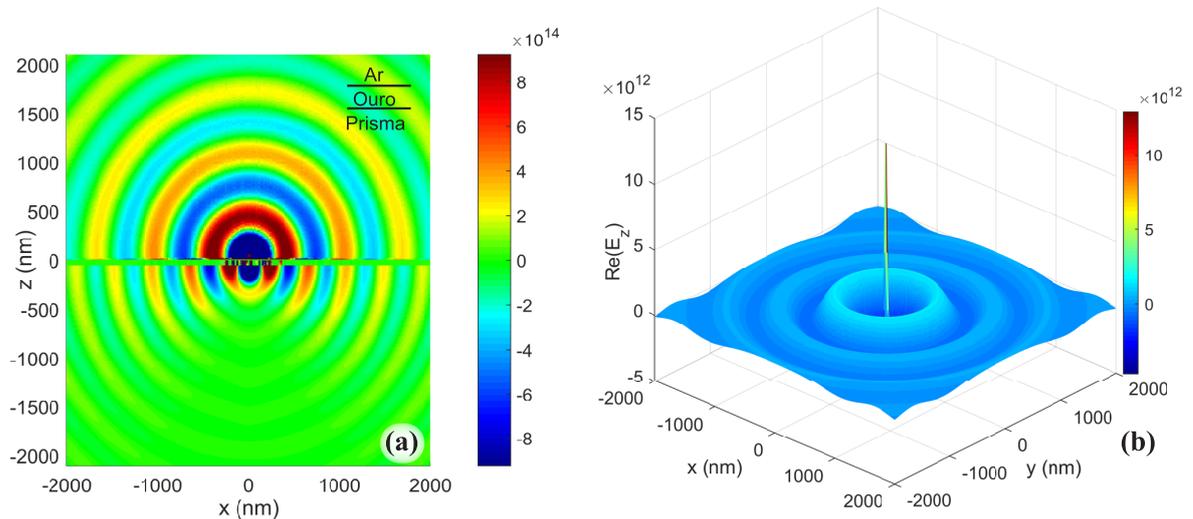


Figura 29 – Componente  $z$  do campo elétrico  $Re\{E_z\}$  obtido via DCIM: a) Nas três Camadas, b) Sobre a superfície de Ouro.

As Figs. 29a) e 29b) foram obtidas utilizando-se o DCIM através do formalismo desenvolvido no Capítulo 3. A primeira figura mostra a parte real da componente  $z$  do campo elétrico nas três camadas, já a segunda figura mostra a parte real da componente

$z$  do campo elétrico sobre a camada de ouro. O dipolo opera em comprimento de onda  $\lambda = 633\text{nm}$  e altura  $z' = 20\text{nm}$ , que representa o comprimento de onda de re-irradiação e a posição de uma molécula singular acima da fina película de ouro de espessura  $50\text{nm}$ , respectivamente. É possível observar através da Fig. 29b) que as ondas irradiadas pelas nanopartículas alvo induzem o modo plasmático de superfície na interface ar-ouro. Para esta simulação, utilizou-se  $250 \times 250$  pontos de análise em cada camada ( $N=3$ ), totalizando 187.500 pontos avaliados individualmente no plano  $x-z$ . Ou seja, todo o formalismo matemático do DCIM, juntamente com o GPOF e, levando-se em consideração as duas integrais (relativas à incidência e reflexão), apresentadas na Eq.(3.33), foram realizados em cada ponto especificado.

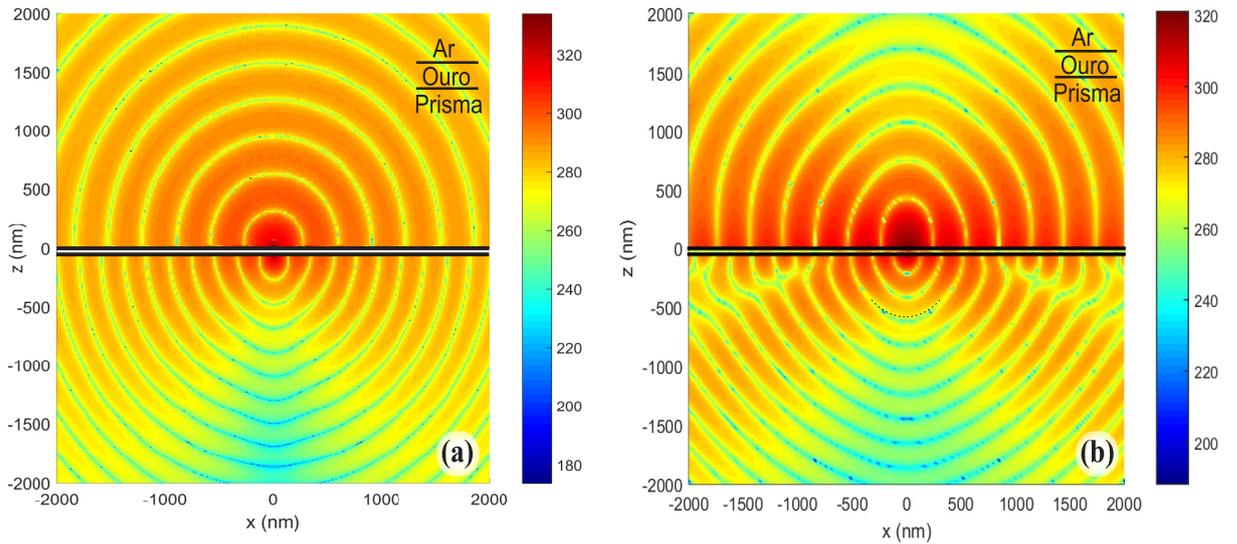


Figura 30 – Componente  $z$  do campo elétrico  $Re\{E_z\}$  em dB obtido via: a) DCIM b) Método Numérico.

A Fig. 30a) mostra a componente  $z$  da parte real do campo elétrico  $Re\{E_z\}$  em dB ( $20\log_{10}|Real\{E_z\}|$ ), obtida via DCIM. A Fig. 30b) mostra a mesma componente mas obtida via método numérico criado por K. A. Michalski [75]. A solução apresentada na Fig. 30b), realizada por método de solução independente deste trabalho, foi obtida em parceria com o grupo de pesquisa do professor K. A. Michalski e Mazin M. Mustafa da *Texas A&M University*, ambos referência neste campo de aplicação e autores de diversos trabalhos aqui citados. A solução da Fig. 30b) necessitou de várias horas de processamento para obtenção do resultado enquanto a Fig.30a) pode ser obtida em poucos minutos. Observe que estas figuras demonstram que a onda na terceira camada é semelhante a uma onda plana perfeita na direção da intensidade máxima de acoplamento.

A Fig. 31a) mostra a fase da componente  $z$  do campo elétrico do dipolo em radianos, obtida via DCIM. A Fig. 31b) mostra fase da componente  $z$  do campo elétrico do dipolo

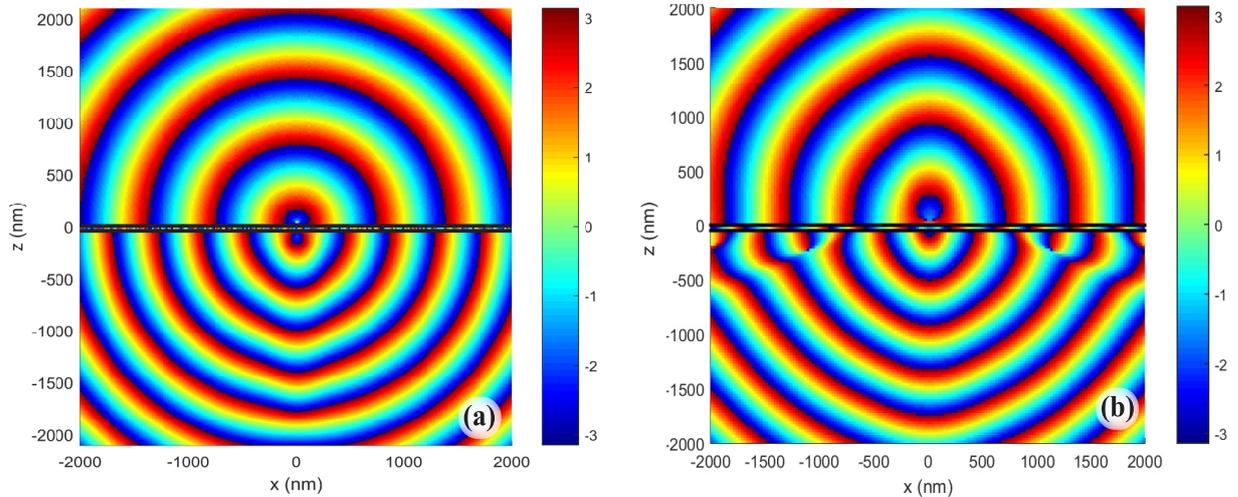


Figura 31 – Fase da componente  $z$  do campo elétrico ( $E_z$ ) em radianos obtido via: a) DCIM b) Método Numérico.

em radianos. É possível observar a semelhança entre os planos de fase, principalmente em setores próximos à fonte, justamente onde o método previsivelmente é mais eficaz.

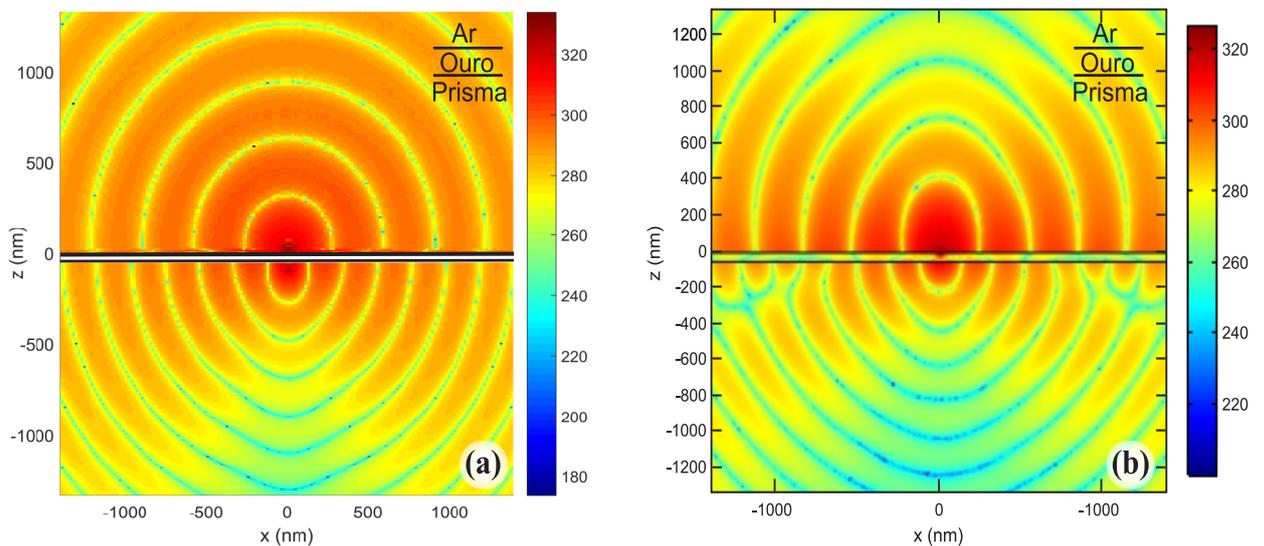


Figura 32 – Componente  $z$  do campo elétrico  $Re\{E_z\}$  em dB obtido via: a) DCIM b) COMSOL.

A Fig. 32a) mostra a componente  $z$  da parte real do campo elétrico  $Re\{E_z\}$  em dB ( $20\log_{10}|Real\{E_z\}|$ ), obtida via DCIM, que para ser obtido demora cerca de 15 minutos para amplo número de pontos. A Fig. 32b) mostra a mesma componente mas obtida via COMSOL. O domínio computacional mostrado na Fig. 32b) é menor devido limitações

computacionais disponíveis, pois, além da alta necessidade de memória computacional (utiliza-se cerca de 28GB de RAM) este resultado também demanda várias horas de processamento no COMSOL (de 8 a 10 horas).

Observa-se que os resultados obtidos nas Fig. 30 a Fig. 32 possuem semelhanças, o que confirma a metodologia e a possibilidade de aplicação do DCIM no formalismo proposto. De fato, resultados aproximados eram esperados no DCIM com a utilização de um caminho de segundo nível, pois trata-se de uma aproximação que não exclui matematicamente a contribuição dos pólos SWP e SPP além de não considerar a contribuição dos ramos e pontos de ramificação.

Destacam-se alguns comportamentos nestes resultados (Fig. 30 e Fig. 32), primeiramente, as diferenças de amplitude entre os resultados do DCIM comparadas com o método numérico e no COMSOL são relacionadas a aproximação do método. Na primeira camada observa-se que as ondas plasmônicas de superfície obtidas via DCIM não acompanharam perfeitamente a forma das ondas plasmônicas de superfície obtidas através do método numérico e no COMSOL, isto porque a contribuição dos modos plasmônicos associados ao pólo SPP não são excluídos no domínio espectral, de tal forma que conseqüentemente não são consideradas no domínio espacial. Na segunda camada, apesar da simetria esperada, o método não acompanhou as rápidas variações de campo no interior do metal, o que resultou em grandes quedas de amplitude a partir da fonte, diminuindo consideravelmente o campo no interior do metal, por isso fora retirada. Sabe-se que a contribuição dos pólos SWP no domínio espectral correspondem a ondas cilíndricas no domínio espacial e a contribuição dos pontos de ramificação no domínio espectral contribuem com ondas laterais no domínio espacial [76][77], considerando que o DCIM não exclui estes modos no domínio espectral, resulta nas diferenças de forma do resultado do DCIM, que são mais notáveis na terceira camada.

A Fig. 33 mostra o diagrama de radiação bidimensional de campo distante do sensor SPCE analisado. Note que a intensidade dos lóbulos inferiores, que dependem do campo acoplado no prisma, têm alta diretividade em ângulos característicos de emissão acoplada  $\theta_{SPCE} = \pm 43.7^\circ$ , o que caracteriza uma excelente concentração de campo no ângulo de acoplamento, este ângulo é idêntico ao ângulo de máximo acoplamento SPP  $\theta_{SPP} = \pm 43.7^\circ$  do sensor KR.

A Fig. 34 compara indiretamente as duas configurações (KR e SPCE) e observa-se que os ângulos de máxima ressonância plasmônica obtidos na configuração KR e máximo acoplamento de emissão SPCE são equivalentes.

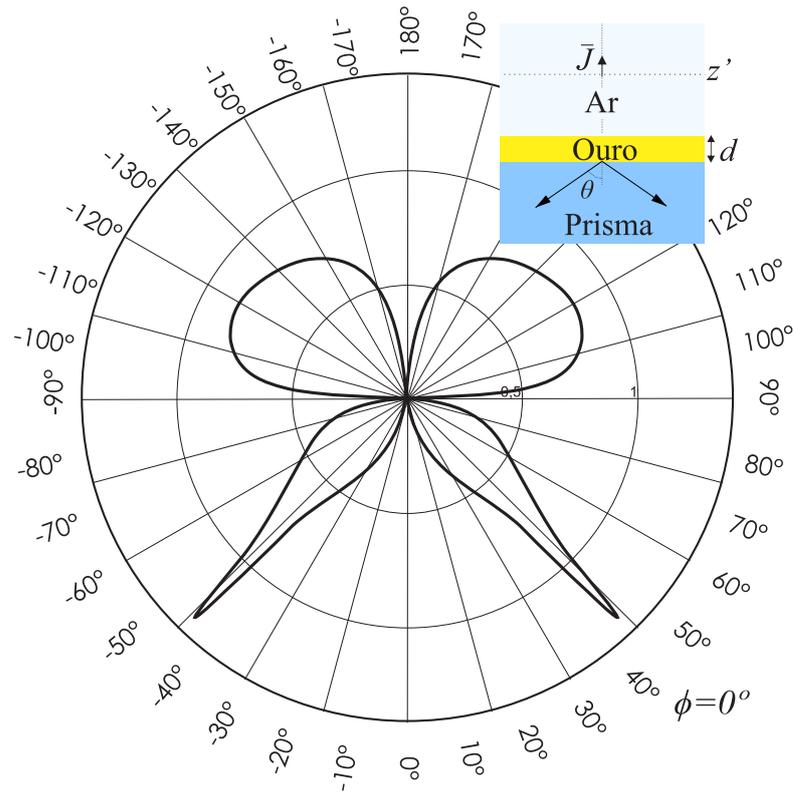


Figura 33 – Diagrama de radiação de campo distante bidimensional do sensor SPCE com altura  $z' = 20\text{nm}$ ,  $d = 50\text{nm}$  e  $\phi = 0^\circ$ . Note que o campo elétrico possui ângulo de emissão acoplado  $\theta_{SPCE} = 43.7^\circ$ .

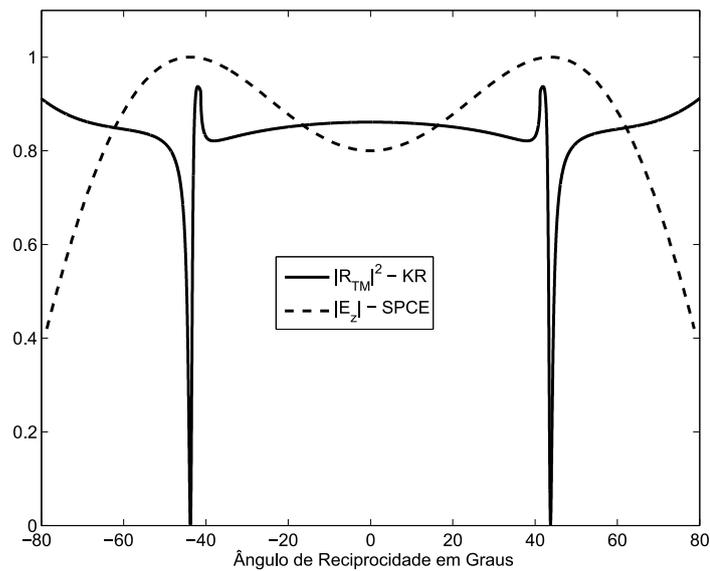


Figura 34 – Refletividade do Sensor KR e Campo Elétrico normalizado acoplado no sensor SPCE obtido via DCIM em  $z = -2050\text{nm}$ .

## 5.4 Considerações Finais

As aplicações do DCIM observadas na literatura geralmente se limitam a frequências baixas comparadas com a utilizada neste trabalho. Também, diferentemente de outras aplicações que geralmente possuem apenas pólos SWP, a aplicação aqui proposta possui forte contribuição dos pólos SPP, contribuição dos pólos SWP e contribuição de diversos ramos complexos, o que mostra que apesar das acentuadas descontinuidades, o resultado do método se justifica na sua totalidade. Também, aqui aplica-se o método de uma forma inovadora que é diretamente nas equações integrais de campo elétrico, as quais possuem singularidades bem mais expressivas que a formulação comumente utilizada que aplica o DCIM nos vetores potenciais elétricos e escalares [71]. Observou-se excelente concordância no ângulo de acoplamento do sensor, o que de fato viabiliza o método para a aplicação aqui pretendida.

Verifica-se na literatura que existe atualmente um grande esforço científico na busca de solucionar integrais semelhantes a aqui proposta através de variantes do DCIM, que envolvem desde a exclusão dos pólos analiticamente ao aperfeiçoamento do caminho de integração [78] de forma que a pesquisa nesta área ainda tem culminado em trabalhos atuais [79][80]. Deste modo, muita pesquisa ainda tem sido feita para melhorar a eficiência do DCIM.

## 6 Considerações Finais

Além da avaliação experimental e teórica de um sensor SPR na configuração KR, nos concentramos na solução de equações generalistas aplicadas a meios de múltiplas camadas planares para solução de um problema específico que é um sensor plasmônico SPR baseado na configuração SPCE. Aplicamos o método DCIM para análise de um sensor na configuração em emissão acoplada (SPCE) operando em frequências ópticas. O método DCIM foi aplicado diretamente nas equações integrais de campo elétrico para um dipolo sobre múltiplas camadas planares. Avaliou-se a radiação próxima e distante. Observou-se a ressonância plasmônica de superfície induzida na interface metal/meio-externo e características da emissão acoplada descrita na literatura para o sensor SPCE, ou seja, a alta concentração de emissão plasmônica através do prisma fortemente direcionada ao detector. Descreve-se como um sensor SPCE acoplado a nanopartículas metálicas influencia na propriedade de aumentar a intensidade de campo próximo e melhorar a resposta da sensibilidade de sensores ópticos do tipo SPCE. A solução através do DCIM para a configuração SPCE foi validada por comparação com métodos numéricos e com o software profissional COMSOL Multiphysics<sup>®</sup>. Resultados experimentais foram utilizados para comparar a reflectividade do coeficiente de reflexão generalizada usado para obter os resultados do sensor na configuração KR. Os resultados mostram que o método DCIM modela com boa precisão a interação dos elementos ressonantes sobre estruturas planares multi-camadas. A metodologia apresentada pode auxiliar na interpretação e análise de sensores SPR. No futuro, métodos de solução alternativos baseados no DCIM podem ser obtidos para mais configurações e condições paramétricas diferentes.

Especificamente, foram escritas equações no estado da arte para avaliação de meios de múltiplas camadas planares estratificadas. Expressões baseadas nas funções de Green foram obtidas no domínio espectral em uma forma para implementação direta do DCIM. O método GPOF foi aplicado na aproximação das funções exponenciais complexas a partir de um conjunto de dados discretos. Foram realizadas análises de dois sensores SPR propostos: na configuração Kretschmann e SPCE. A reciprocidade eletromagnética entre eles foi comprovada através de resultados analíticos e semianalíticos. Foi aplicado o método DCIM para uma solução generalista de meios multicamadas utilizando os coeficientes de reflexão generalizados. Os passos do método DCIM foram abordados e explicados a fim de encontrar uma solução independente de trabalhos anteriores. Finalmente, a formulação obtida foi aplicada ao sensor analisado utilizando-se do MATLAB como ferramenta de programação. Códigos em MATLAB foram desenvolvidos e implementados para serem comparados com softwares profissionais. No decorrer do desenvolvimento desta tese também contribuiu-se com publicações importantes referenciadas em [23][65].

Como principais vantagens da metodologia de solução através do DCIM, destacaram-se as seguintes:

- i) Solução semianalítica com boa interpretação física e matemática do problema;
- ii) Possibilidade de alteração das características elétricas dos materiais utilizados;
- iii) Velocidade na obtenção dos resultados;
- iv) Possibilidade de incluir fontes com outras orientações.

Para trabalhos futuros sugere-se:

- Avaliar as demais componentes de campo elétrico e magnético;
- Avaliar dipolos na configuração horizontal (HED) e inclinada;
- Utilizar o DCIM de três níveis e avaliar resultados;
- Desenvolver métodos e algoritmos para inserção da contribuição dos polos SPP, SWP, pontos de ramificação e cortes de ramificação;
- Calcular o campo distante analiticamente com aproximações assintóticas que já se encontram na literatura;
- Utilizar camadas de grafeno para avaliar possíveis melhoras na sensibilidade dos sensores SPCE;
- Propõe-se também, como possível aplicação de biosensores, utilização do sensor SPCE para avaliações clínicas que se utilizem das lâmpadas de Wood [81]. Este sensor poderia confirmar-se útil no diagnóstico clínico de doenças de pele.

Conclui-se que as expressões de forma fechada derivadas para o DCIM são relevantes no sentido de uma avaliação rápida do comportamento do sensor SPCE e também de se obter uma boa interpretação física e matemática do funcionamento deste. O método em particular pode vir a ser útil na avaliação de configurações com diferentes materiais onde o formalismo pode ser utilizado e também em outros contextos.

# Referências

- [1] S. A. Maier. *Plasmonics: Fundamentals and Applications*. Springer, 2007. Citado 2 vezes nas páginas 19 e 50.
- [2] L. Novotny and B. Hecht. *Principles of Nano-Optics*. Cambridge: New York, 2012. Citado 5 vezes nas páginas 19, 21, 28, 29 e 43.
- [3] R. W. Wood. A dynamically reconfigurable fano metamaterial through graphene tuning for switching and sensing applications. *Philosophical Magazine Series 6*, 23: 310–317, 1912. Citado na página 19.
- [4] U. J. Fano. The theory of anomalous diffraction gratings and of quasi-stationary waves on metallic surfaces (sommerfeld's waves). *Optical Society of America*, pages 213–222, 1941. Citado na página 19.
- [5] A. Otto. Excitation of non radiative surface plasma waves in silver by the method of frustrated total reflection). *Z. Physik*, 216:398–410, 1968. Citado na página 19.
- [6] E. Kretschmann and H. Raether. Radiative decay of non-radiative surface plasmons excited by light. *Z. Physik*, 23, 1968. Citado 2 vezes nas páginas 19 e 23.
- [7] C. Nylander, B. Liedberg, and T. Lind. Gas detection by means of surface plasmons resonance. *Sensors and Actuators*, 3:79–88, 1982. Citado na página 19.
- [8] B. Liedberg, Nylander C., and I. Lundstrom. Surface plasmons resonance for gas detection and biosensing. *Sensors and Actuators*, 4:299–304, 1983. Citado 2 vezes nas páginas 19 e 23.
- [9] J. Homola, S. S. Yee, and G. Gauglitz. Surface plasmon resonance sensors: review. *Sensors and Actuators B*, 54:3–15, 1999. Citado na página 19.
- [10] Sookyoung Roh, Taerin Chung, and ByoungHo Lee. Overview of the characteristics of micro and nano-structured surface plasmon resonance. *Sensors Review*, 11:1565–1588, 2011. Citado na página 19.
- [11] Gennady Evtugyn. Bio sensors: Essentials. *Springer Science & Business Media*, 2013. Citado na página 19.
- [12] J. Homola. Surface plasmon resonance sensors for detection of chemical and biological species. *Chem. Rev.*, 108:462–493, 2008. Citado na página 19.

- [13] J.I.L. Chen, Y. Chen, and D.S. Ginger. Plasmonic nanoparticle dimers for optical sensing of dna in complex media. *J. Am. Chem. Soc.*, 132:9600–9601, 2010. Citado na página 19.
- [14] B.N. Feltis and et al. A hand-held surface plasmon resonance biosensor for the detection of ricin and other biological agentes. *Biosensors and Bioelectronics*, 23: 1131–1136, 2008. Citado na página 19.
- [15] J.W. Chung and et al. Application of spr biosensor for medical diagnostics of human hepatitis b virus (hhbv). *Euroensors XVIII*, 2004. Citado na página 19.
- [16] Abdi MM and et al. Surface plasmon resonance sensing detection of mercury and lead ions based on conducting polymer composite. *PLoS ONE*, 2011. Citado na página 19.
- [17] M. A. Cooper. Optical biosensors in drug discovery. *Nat. Rev. Drug. Discov.* 1, pages 515–528, 2002. Citado 2 vezes nas páginas 19 e 42.
- [18] X.D. Hoa, A.G. Kirk, and M. Tabrizian. Towards integrated and sensitive surface plasmon resonance biosensors: A review of recent progress. *Biosensors & Bioelectronics*, 2007. Citado na página 19.
- [19] S. Cabrini and S. Kawata. *Nanofabrication Handbook*. CRC Press, 2012. Citado na página 20.
- [20] Joseph R. Lakowicz, Joanna Malicka, G. Ignacy, and G. Zygmunt. Directional surface plasmon-coupled emission: a new method for high sensitivity detection. *Biochemical and Biophysical Research Communications*, 307:435–439, 2003. Citado 3 vezes nas páginas 20, 24 e 44.
- [21] Joseph R. Lakowicz. Radiative decay engineering: Surface plasmon-coupled directional emission. *Anal Biochem*, pages 153–169, 2004. Citado 2 vezes nas páginas 20 e 25.
- [22] W. L. Barnes. Fluorescence near interfaces: the role of photonic mode density. *Journal of Modern Optics*, 45:661–699, 1998. Citado na página 20.
- [23] Nadson W. P. de Souza, K. Q. Costa, and V. Dmitriev. Development of computational 3d mom algorithm for nanoplasmonics. *Journal of Microwaves, Optoelectronics and Electromagnetic Applications*, 12:569–579, 2013. Citado 2 vezes nas páginas 20 e 76.
- [24] Bert J. Scholz, Jorg Frischeisen, Arndt Jaeger, Daniel S. Setz, Thilo C. G. Reusch, and Wolfgang Brutting. Extraction of surface plasmons in organic light-emitting diodes via high-index coupling. *Optics Express*, 20, 2012. Citado na página 20.

- [25] Michal Trnavsky, Joerg Enderlein, Thomas Ruckstuhl, Colette McDonagh, and Brian D. Mac Craith. Experimental and theoretical evaluation of surface plasmon-coupled emission sensitive fluorescence detection. *Journal of Biomedical optics*, 2008. Citado na página 20.
- [26] F. D. Stefani, K. Vasilev, N. Bocchio, N. Stoyanova, and M. Kreiter. Surface-plasmon-mediated single-molecule fluorescence through a thin metallic film. *Phys. Rev. Lett.*, pages 2168–2173, 2005. Citado na página 20.
- [27] Y. L. Chow, J.J. Yang, D. F. Fang, and G. E. Howard. A closed-forma spacial green's function for the thick microstrip substrate. *IEEE Trans. Microwave Theory*, 39: 588–592, 1991. Citado 3 vezes nas páginas 21, 23 e 58.
- [28] J. A. Kong. Electromagnetic field due to dipole antennas over stratified anisotropic media. *Geophysics*, 37(6):985–996, 1972. Citado 2 vezes nas páginas 21 e 23.
- [29] Weng Cho Chew. *Waves and Fields in Inhomogeneous Media*. IEEE PRESS Series on Eletromagnetic Waves, 1995. Citado 10 vezes nas páginas 21, 24, 29, 30, 31, 42, 43, 46, 47 e 49.
- [30] M. I. Aksum. A robust approach for the derivation of closed-formn green's. *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques*, 44(5), 1996. Citado 3 vezes nas páginas 21, 24 e 42.
- [31] M. Emre Yavuz, M. Irsadi Aksun, and Gulbin Dural. Critical study of the problems in discrete complex image method. *Electromagnetic Compatibility*, 3:1281–1284, 2003. Citado 3 vezes nas páginas 21, 24 e 42.
- [32] Y. Hua and T. K. Sarkar. Generalized pencil-of-function method for extracting poles of an em system from its transient response. *IEEE Trans. Antennas Propag.*, 37(2): 229–234, 1989. Citado na página 21.
- [33] Aytaç Alparslan. Study of green's functions of potentials and fields in layered media composed of left-handed and right-handed materials. Master's thesis, Koç Universitesi, Sariyer Istanbul Turkiye, 2008. Citado 2 vezes nas páginas 21 e 64.
- [34] Mohammad Mahdi Tajdini and Hossein Mosallaei. Characterization of large array of plasmonic nanoparticles on layered substrate: dipole mode analysis integrated with complex image method. *Applied EM and Optics Laboratory Northeastern University*, 2011. Citado 5 vezes nas páginas 25, 42, 44, 51 e 57.
- [35] K.A. Michalski. Application of the complex image method to electromagnetic field computation in planar uniaxial multilayers. *Integral Techniques for Electromagnetics*, 2015. Citado na página 25.

- [36] K. A. Michalski and J. R. Mosig. The sommerfeld half-space problem revisited: from radio frequencies and zenneck waves to visible light and fano modes. *Journal of Electromagnetic Waves and Applications*, 30:1–42, 2016. Citado 2 vezes nas páginas 25 e 34.
- [37] Krzysztof A. Michalski and Donald R. Wilton. On the computation of plane-wave impressed fields and far-zone fields of arbitrary current sources in planar multilayer dielectric and plasmonic media. *Journal of Electromagnetic Waves and Applications*, 2017. Citado na página 26.
- [38] Anatoly V. Zayats, Igor I. Smolyaninov, and Alexei A. Maradudin. Nano-optics of surface plasmon polaritons. *Physics Reports*, (408), 2005. Citado na página 28.
- [39] H. Raether. Surface plasmons on smooth and rough surfaces and on grating. *Modern Physics*, 111, 1988. Citado na página 28.
- [40] N Hikmat, Daghestanil, and Billy W. Day. Theory and applications of surface plasmon resonance. *Resonant Mirror, Resonant Waveguide Grating and Dual Polarization Interferometry Biosensors*, 10:9630–9646, 2010. Citado na página 32.
- [41] Jefferson Souza Costa. Análise de um sensor baseado em ressonância de superfície de plasma acoplado a um arranjo periódico de nanopartículas metálicas. Master's thesis, Universidade Federal do Pará, Belém - PA, 2016. Citado na página 36.
- [42] John Edicson Hernández Sánchez. Assembly of a surface plasmon resonance (spr) spectrometer for the characterization of thin organic films. Master's thesis, Pontifícia Universidade Católica, Rio de Janeiro, 2013. Citado na página 36.
- [43] Shuo Hui Cao, Yan Yun Zhai, K. X. e Li, Y. Geddes, and C. D. Ed. Surface plasmon enhanced, coupled, and controlled fluorescence. *John Wiley Sons*, 15:241–256, 2017. Citado 2 vezes nas páginas 37 e 42.
- [44] Tomás Sringer, Maria Laura Ermini, Barbora Spacková, Jani Jablonku, and Jiri Homola. Enhancing sensitivity of surface plasmon resonance biosensors by functionalized gold nanoparticles: Size matters. *Analytical Chemistry, American Chemical Society*, 2014. Citado na página 42.
- [45] J. Edwin and et al. The influence of molecular mobility on the properties of networks of gold nanoparticles and organic ligands. *Beilstein J. Nanotechnol.*, 5:1664–1674, 2014. Citado na página 42.
- [46] L. A. Lyon, M. D. Musick, and M. J. Natan. Colloidal au-enhanced surface plasmon resonance immunosensing. *Analytical Chemistry*, 24:5177–5183, 1998. Citado na página 42.

- [47] Geddes, Gryczynski, Malicka, and Lakowicz. Directional surface plasmon coupled emission. *Journal of Fluorescence*, 14(1), 2004. Citado 2 vezes nas páginas 42 e 43.
- [48] X.Q. Liu, Q. Liu, S.H. Cao, W.P. Cai, Y.H. Weng, K.X. Xie, and Y.Q. Li. Directional surface plasmon-coupled emission of cdte quantum dots and its application in hg(ii) sensing anal. methods. *The Royal Society of Chemistry*, 4:3956–3960, 2012. Citado na página 42.
- [49] Michael Paulus, Phillipe Gay-Balmaz, and Oliver J. F. martin. Accurate and efficient computation of green’s tensor for stratified media. *Physical Review E*, 62(4), 2000. Citado na página 42.
- [50] Aytaç Alparslan and M. I. Aksun. Closed-form green’s functions in planar layered media for all ranges and materials. *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, 58(3), 2010. Citado na página 42.
- [51] Ruzica Golubovic, Athanasios G. Polimeridis, and Juan R. Mosig. Efficient algorithms for computing sommerfeld integral tails. *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, 60(5), 2012. Citado na página 43.
- [52] M. L. Brongersma and P. G. Kik. *Surface Plasmon Nanophotonics*. Springer, 2007. Citado na página 43.
- [53] Julius Adams Stratton. *Eletromagnetic Theory*. McGraw-Hill, 1941. Citado na página 43.
- [54] V. I. Okhmatovski and A. C. Cangellaris. A new technique for the derivation of closed-form electromagnetic green’s functions for unbounded planar layered media. *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, 50(7):1005–1016, 2002. Citado na página 43.
- [55] G. P. Konnen. *Polarized light in Nature*. Cambridge University Press, 1985. Citado na página 44.
- [56] Jorg Enderlein, Thomas Ruckstuhl, and Stefan Seeger. Highly efficient optical detection of surface-generated fluorescence. *Applied Optics*, 38, 1999. Citado na página 44.
- [57] Tomás Sringer, Maria Laura Ermini, Barbora Spacková, Jani Jablonku, and Jiri Homola. Enhancing sensitivity of surface plasmon resonance biosensors by functionalized gold nanoparticles: Size matters. *Analytical Chemistry, American Chemical Societ*, 2014. Citado na página 44.
- [58] Jun Au Kong. *Eletromagnetic Wave Theory*. John Wiley end Sons, 1986. Citado na página 46.

- [59] Donald G. Dudley. *Mathematical Foundations for Electromagnetic Theory*. Wiley-IEEE Press, 1994. Citado na página 48.
- [60] D. G. Fang. *Antenna Theory and Microstrip Antennas*. Science Press and CRC Press, 2010. Citado 4 vezes nas páginas 49, 52, 54 e 58.
- [61] M.I. Aksun and K.A. Michalski. Discrete complex image method for planar multilayers with uniaxial anisotropy. *Antennas and Propagation, EuCAP*, 2007. Citado na página 49.
- [62] By Rodney Waterhouse. *Microstrip Patch Antennas: A Designer's Guide*. Cluwer, 2003. Citado na página 52.
- [63] Ruey Bing Hwang and Wen-Lii Chen. Observing the surface waves in a grounded dielectric slab. *Proceedings of jWEM*, 2014. Citado na página 52.
- [64] Ergun Simsek, Jianguo Liu, and Qing Huo Liu. A spectral integral method(sim) for layered media. *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, 54(6), 2006. Citado 2 vezes nas páginas 52 e 57.
- [65] Nadson Welkson Pereira de Souza, Jefferson Souza Costa, Rafael Correa dos Santos, André Felipe Souza da Cruz, Tommaso Del Rosso, and Karlo Queiroz da Costa. *Resonance: Modal Analysis of Surface Plasmon Resonance Sensor Coupled to Periodic Array of Core-Shell Metallic Nanoparticles*, chapter 9, pages 169–188. InTech, 2017. Citado 2 vezes nas páginas 55 e 76.
- [66] M. I. Aksun and R. Mittra. Choices of expansion and testing functions for the method of moments in electromagnetic problems. *IEEE Trans. Microw. Theory Tech.*, 41(3): 503–509, 1993. Citado na página 57.
- [67] L. Zhuang, W. Hu, and W. Yu. Automatic incorporation of surfacewave poles in discrete complex image method. *Progress In Electromagnetics Research*, 80:161–178, 2008. Citado 2 vezes nas páginas 57 e 58.
- [68] Mohammad Mahdi Tajdini and Amir Ahmad Shishegar. A novel analysis of microstrip structures using the gaussian green's function method. *IEEE Trans. Antennas Propag.*, 58(1), 2010. Citado na página 57.
- [69] Xin Hu. *Full-wave Analysis of Large Conductor Systems over Substrate*. PhD thesis, Massachusetts Institute of Technology, Massachusetts, Cambridge, 2006. Citado 2 vezes nas páginas 57 e 58.
- [70] Noyan Kinayman and M. I. Aksun. Efficient use of closed-form green's functions for the analysis of planar geometries with vertical connections. *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, 45(5), 1997. Citado na página 57.

- [71] K. A. Michalski. Application of the complex image method to electromagnetic field computation in planar uniaxial multilayers. 2015. Citado 2 vezes nas páginas 57 e 75.
- [72] N. Hojjat, S. Safavi-Naeini, and Y.L. Chow. Numerical computation of complex image greens functions for multilayer dielectric media: near-field zone and the interface region. *IEEE Proc. Microwave and Antenna Propag.*, 145(6), 1998. Citado na página 58.
- [73] J. Berenger. A perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves. *J. Computational Physics*, 114:185–200, 1994. Citado na página 64.
- [74] Michal Trnavsky and Meng. *Surface plasmon-coupled emission for applications in biomedical diagnostics*. PhD thesis, Dublin City University, Glasnevin, Dublin, Irlanda, 2009. Citado na página 65.
- [75] K.A. Michalski. Extrapolation methods for sommerfeld integral tails. *IEEE Trans. Antennas Propag.*, 46:1405–1418, 1998. Citado na página 71.
- [76] M.I Aksun and G. Dural. Clarification of issues on the closed-form green’s functions in stratified media. *IEEE Transactions Antennas and Propagation*, 53(11):3644–3653, 2005. Citado na página 73.
- [77] T Tamir and A. A. Oliner. Role of the lateral wave in total reflection of light. *Journal of the Optical Society of America*, 59, 1969. Citado na página 73.
- [78] K.A. Michalski, J.R. Mosig, and M.I. Aksun. Enhancing the robustness of the discrete complex image method for planar multilayered media. *Microwave Conference*, page 1–4, 2007. Citado na página 75.
- [79] E. Pınar Karabulut, Vakur B. Erturk, Lale Alatan, S. Karan, Burak Alisan, and M. I. Aksun. A novel approach for the efficient computation of 1-d and 2-d summations. *IEEE Transactions Antennas and Propagation*, 64(3), 2016. Citado na página 75.
- [80] E. Pınar Karabulut and M. I. Aksun. A novel approach for the efficient and accurate computation of sommerfeld integral tails. *Electromagnetics in Advanced Applications (ICEAA)*, 2015. Citado na página 75.
- [81] John Verrinder Veasey, Bárbara Arruda Fraletti Miguel, and Roberta Buense Bedrikow. Wood’s lamp in dermatology: applications in the daily practice. *Surg Cosmet Dermatol*, pages 328–330, 2017. Citado na página 77.

# APÊNDICE A – Solução computacional via DCIM

```

% Escrito por Nadson Welkson Pereira de Souza
% Método das Imagens Complexas Discretas com Utilização de Duplo Caminho

%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
% CONSTANTES
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

tic, clc, clear, close all
N      = 3;                % Número de camadas
A1     = 1;                % Amplitude inicial da excitação em V/m
Lamb   = 633e-9;          % Comprimento de onda de operação
e0     = 8.85418781762e-12; % Permissividade elétrica no vácuo
mu0    = 1.25663706143e-6; % Permeabilidade magnética no vácuo
c      = 1/sqrt(e0*mu0);  % Velocidade da luz no vácuo
f      = c/Lamb;          % Frequência de operação em Hz
W      = 2*pi*f;          % Frequência angular em rad/s
jay    = sqrt(-1);        % Unidade imaginária
er     = [1 (-11.5302 - j*1.2037) 2.3013]; % Permissividade relativa
e      = er.*e0;          % Permissividade
mu     = mu0*ones(1,N);  % Permeabilidade
k      = W.*sqrt(mu.*e);  % Constante de onda
k0     = W.*sqrt(mu0.*e0); % Constante no onda do espaço livre
z_linha = 20e-9;          % Altura da fonte;
x_linha = 0e-9;           % Posição da Fonte;
Qz     = 90;               % Quantidade de pontos das camadas
L_x    = 2000e-9;          % Domínio em x
L_z1   = 2000e-9;          % Extensão da primeira camada
L_zN   = 2000e-9;          % Extensão da última camada
Qx     = Qz;               % Qx = Qz
d      = [0e-9 50e-9 0];  % Posições das interfaces

% Domínio de análise:
x(:,1) = linspace(-L_x,L_x,Qx);
x(:,2) = linspace(-L_x,L_x,Qx);
x(:,3) = linspace(-L_x,L_x,Qx);
z(:,1) = linspace(L_z1,-d(1),Qz);
z(:,2) = linspace(-d(1),-d(2),Qz);
z(:,3) = linspace(-d(2),-L_zN,Qz);

%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
% PARÂMETROS DCIM
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
T02    = 3.1; % Otimização para as três camadas unidas;
T01    = 9.07; % Otimização para as três camadas unidas;
t1     = linspace(0,T01,15);
t2     = linspace(0,T02,38);
Q1     = length(t1);
Q2     = length(t2);
k_ro1  = k(1).*sqrt(1+(T02+t1).^2); % Caminho real
k_ro2  = k(1).*sqrt(1-(jay.*t2+(1-t2./T02)).^2); % Caminho Complexo
plot([k_ro2 k_ro1]);

```

```

%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
% Cálculo dos coeficientes de reflexão quasi-dinâmicos sobre C2 (k1z=k2z=jkp)
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

ATMqd      = ones(Q1,N);
ATMqd(:,1) = A1;
RTMqd      = zeros(Q1,N);
for n=1:Q1 %Variação espectral
    k_ro1(n) = k_ro1(n);
    for i=1:N
        kz(n,i) = sqrt(k(i).^2-k_ro1(n)^2);
        kz(n,i) = real(kz(n,i))-jay*abs(imag(kz(n,i)));
        kp(n,i) = sqrt(k(i).^2-kz(n,i)^2);
        kz(n,i) = jay.*kp(n,i);
    end
    %Coeficiente de reflexao generalizado
    for i=(N-1):-1:1
        rTMqd(n,i) = (e(i+1).*kz(n,i)-e(i).*kz(n,i+1))./(e(i+1).*kz(n,i)+e(i).*kz(n,i+1));
        tTMqd(n,i) = (2.*e(i+1).*kz(n,i))./(e(i+1).*kz(n,i)+e(i).*kz(n,i+1));
        RTMqd(n,i) = (rTMqd(n,i)+RTMqd(n,i+1).*...
            exp(-2.*jay.*kz(n,i+1).*(d(i+1)-d(i))))./(1+rTMqd(n,i).*RTMqd(n,i+1).*...
            exp(-2.*jay.*kz(n,i+1).*(d(i+1)-d(i)))); %R Generalizado TM
    end
    %Coeficiente de transmissao e amplitudes
    for i=2:N
        STMqd(n,i-1) = (tTMqd(n,i-1))./(1+rTMqd(n,i-1).*RTMqd(n,i).*exp(-2.*jay.*kz(n,i).*(d(i)-d(i-1))));
        ATMqd(n,i) = ATMqd(n,i-1).*exp(-jay.*kz(n,i-1).*(d(i-1))).*STMqd(n,i-1)./exp(-jay.*kz(n,i).*(d(i-1)));
        TTMqd(n,i-1) = ATMqd(n,i).*exp(-jay.*kz(n,i).*(d(i-1)))./ATMqd(n,1).*exp(-jay.*kz(n,1).*(d(1)));
    end
end
end

%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
% Cálculo do kernel quasi-dinâmicos sobre C2 (k1z=k2z=jkp)
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

z(:,1) = linspace(-1.*d(1),L_z1,Qz);
for n=1:Q1 %Variação espectral
    for i=1:Qz
        f_incTM1qd(n,i,1) = (kz(n,1).*(kp(n,1).^2).*ATMqd(n,1).*exp(jay.*(kz(n,1).*...
            absoluto(z(i,1),z_linha)-kz(n,1).*z_linha)))./...
            (jay.*kz(n,1).*exp(-jay.*(kz(n,1).*modulo(z(i,1),z_linha))));
        f_refTM1qd(n,i,1) = (kz(n,1).*(kp(n,1).^2).*ATMqd(n,1).*RTMqd(n,1).*...
            exp(-jay.*(kz(n,1).*(z(i,1)+2.*d(1))+kz(n,1).*z_linha)))./...
            (jay.*kz(n,1).*exp(-jay.*(kz(n,1).*modulo(z(i,1),z_linha))));
    end
    %Camadas internas
    if (N>2)
        for m=2:(N-1) % m ésima camada interna
            z(:,m)=linspace(-1.*d(m),-1.*d(m-1),Qz);
            for i=1:Qz
                f_incTM1qd(n,i,m) = (kz(n,m).*(kp(n,1).^2).*...
                    ATMqd(n,m).*exp(jay.*(kz(n,m).*absoluto(z(i,2),z_linha)-kz(n,1).*z_linha)))./...
                    (jay.*kz(n,1).*exp(-jay.*(kz(n,m).*modulo(z(i,m),z_linha))));
                f_refTM1qd(n,i,m) = (kz(n,m).*(kp(n,1).^2).*ATMqd(n,m).*RTMqd(n,m).*...
                    exp(-jay.*(kz(n,m).*(z(i,m)+2.*d(m))+kz(n,1).*z_linha)))./...
                    (jay.*kz(n,1).*exp(-jay.*(kz(n,m).*modulo(z(i,m),z_linha))));
            end
        end
    end
end
end
%Campo na ultima camada

```

```

z(:,N)=linspace(-1*L_zN,-1.*d(N-1),Qz);
for i=1:Qz
    f_incTM1qd(n,i,N) = (kz(n,N).*(kp(n,1).^2).*ATMqd(n,N).*exp(jay.*(kz(n,N).*...
    absoluto(z(i,3),z_linha)-kz(n,1).*z_linha))./...
    (jay.*kz(n,1).*exp(-jay.*(kz(n,N).*modulo(z(i,N),z_linha))));
    f_refTM1qd(n,i,N) = (kz(n,N).*(kp(n,1).^2).*...
    ATMqd(n,N).*RTMqd(n,N).*...
    exp(-jay.*(kz(n,N).*(z(i,N)+2.*d(N))+kz(n,1).*z_linha))./...
    (jay.*kz(n,1).*exp(-jay.*(kz(n,N).*modulo(z(i,N),z_linha))));
end
end

%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
% Subtração dos termos quasi-dinâmicos do analítico em C2
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

ATM          = ones(Q1,N);
ATM(:,1)     = A1;
RTM          = zeros(Q1,N);
for n=1:Q1 %Variação espectral
    k_ro1(n)  = k_ro1(n);
    for i=1:N
        kz(n,i) = sqrt(k(i).^2-k_ro1(n)^2);
        kz(n,i) = real(kz(n,i))-jay*abs(imag(kz(n,i)));
        kp(n,i) = sqrt(k(i).^2-kz(n,i)^2);
    end
    %Coeficiente de reflexao generalizado
    for i=(N-1):-1:1
        rTM1(n,i) = (e(i+1).*kz(n,i)-e(i).*kz(n,i+1))./(e(i+1).*kz(n,i)+e(i).*kz(n,i+1));
        tTM1(n,i) = (2.*e(i+1).*kz(n,i))./(e(i+1).*kz(n,i)+e(i).*kz(n,i+1));
        RTM(n,i) = (rTM1(n,i)+RTM(n,i+1).*exp(-2.*jay.*kz(n,i+1).*(d(i+1)-d(i))))./...
        (1+rTM1(n,i).*RTM(n,i+1).*exp(-2.*jay.*kz(n,i+1).*(d(i+1)-d(i))));
    end
    for i=2:N
        STM(n,i-1) = (tTM1(n,i-1))./(1+rTM1(n,i-1).*RTM(n,i).*exp(-2.*jay.*kz(n,i).*(d(i)-d(i-1))));
        ATM(n,i)   = ATM(n,i-1).*exp(-jay.*kz(n,i-1).*(d(i-1))).*STM(n,i-1)./exp(-jay.*kz(n,i).*(d(i-1)));
        TTM(n,i-1) = ATM(n,i).*exp(-jay.*kz(n,i).*(d(i-1)))./ATM(n,1).*exp(-jay.*kz(n,1).*(d(1)));
    end
end
end
for n=1:Q1 % Variação espectral em kp
    for i=1:Qz % Variação espacial em cada ponto z
        f_incTM1(n,i,1) = (kz(n,1).*(kp(n,1).^2).*ATM(n,1).*...
        exp(jay.*(kz(n,1).*absoluto(z(i,1),z_linha)-kz(n,1).*z_linha))./...
        (jay.*kz(n,1).*exp(-jay.*(kz(n,1).*modulo(z(i,1),z_linha))));
        f_incTM1(n,i,1) = f_incTM1(n,i,1) - f_incTM1qd(n,i,1);
        f_refTM1(n,i,1) = (kz(n,1).*(kp(n,1).^2).*ATM(n,1).*RTM(n,1).*...
        exp(-jay.*(kz(n,1).*(z(i,1)+2.*d(1))+kz(n,1).*z_linha))./...
        (jay.*kz(n,1).*exp(-jay.*(kz(n,1).*modulo(z(i,1),z_linha))));
        f_refTM1(n,i,1) = f_refTM1(n,i,1) - f_refTM1qd(n,i,1);
    end
end
for i=1:Qz
    f_incTM1(n,i,2) = (kz(n,2).*(kp(n,1).^2).*ATM(n,2).*...
    exp(jay.*(kz(n,2).*absoluto(z(i,2),z_linha)-kz(n,1).*z_linha))./...
    (jay.*kz(n,1).*exp(-jay.*(kz(n,2).*modulo(z(i,2),z_linha))));
    f_incTM1(n,i,2) = f_incTM1(n,i,2) - f_incTM1qd(n,i,2);
    f_refTM1(n,i,2) = (kz(n,2).*(kp(n,1).^2).*ATM(n,2).*RTM(n,2).*...
    exp(-jay.*(kz(n,2).*(z(i,2)+2.*d(2))+kz(n,1).*z_linha))./...
    (jay.*kz(n,1).*exp(-jay.*(kz(n,2).*modulo(z(i,2),z_linha))));
    f_refTM1(n,i,2) = f_refTM1(n,i,2) - f_refTM1qd(n,i,2);
end
end

```

```

for i=1:Qz
    f_incTM1(n,i,3) = (kz(n,3).*(kp(n,1).^2).*ATM(n,3).*...
    exp(jay.*(kz(n,3).*absoluto(z(i,3),z_linha)-kz(n,1).*z_linha)))./...
    (jay.*kz(n,1).*exp(-jay.*(kz(n,3).*modulo(z(i,3),z_linha))));
    f_incTM1(n,i,3) = f_incTM1(n,i,3) - f_incTM1qd(n,i,3);
    f_refTM1(n,i,3) = (kz(n,3).*(kp(n,1).^2).*ATM(n,3).*RTM(n,3).*...
    exp(-jay.*(kz(n,3).*(z(i,3)+2.*d(3))+kz(n,1).*z_linha)))./...
    (jay.*kz(n,1).*exp(-jay.*(kz(n,3).*modulo(z(i,3),z_linha))));
    f_refTM1(n,i,3) = f_refTM1(n,i,3) - f_refTM1qd(n,i,3);
end
end

%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
% Aproximação do Kernel via GPOF em t
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

tol = 8.83e-200;
disp('INICIALIZANDO APROXIMAÇÃO NO SEGUNDO CAMINHO')
for i=1:Qz
    [B_incTM1(:,i,1), A_incTM1(:,i,1),M2] = gpof(f_incTM1(:,i,1),tol) ;
    [B_refTM1(:,i,1), A_refTM1(:,i,1),M2] = gpof(f_refTM1(:,i,1),tol) ;
    % Mudança para kz
    B_incTM1(:,i,1) = B_incTM1(:,i,1).*T02./(k(1).*(jay*T02+1));
    A_incTM1(:,i,1) = A_incTM1(:,i,1).*exp(k(1).*B_incTM1(:,i,1));
    B_refTM1(:,i,1) = B_refTM1(:,i,1).*T02./(k(1).*(jay*T02+1));
    A_refTM1(:,i,1) = A_refTM1(:,i,1).*exp(k(1).*B_refTM1(:,i,1));
end
for i=1:Qz
    [B_incTM1(:,i,2),A_incTM1(:,i,2),M1] = gpof(f_incTM1(:,i,2),tol) ;
    [B_refTM1(:,i,2),A_refTM1(:,i,2),M1] = gpof(f_refTM1(:,i,2),tol) ;
    % Mudança para kz
    A_incTM1(:,i,2) = A_incTM1(:,i,2).*exp(-T02.*B_incTM1(:,i,2));
    B_incTM1(:,i,2) = B_incTM1(:,i,2)./(jay*k(2));
    A_refTM1(:,i,2) = A_refTM1(:,i,2).*exp(-T02.*B_refTM1(:,i,2));
    B_refTM1(:,i,2) = B_refTM1(:,i,2)./(jay*k(2));
end
for i=1:Qz
    [B_incTM1(:,i,3),A_incTM1(:,i,3),M1] = gpof(f_incTM1(:,i,3),tol) ;
    [B_refTM1(:,i,3),A_refTM1(:,i,3),M1] = gpof(f_refTM1(:,i,3),tol) ;
    % Mudança para kz
    A_incTM1(:,i,3) = A_incTM1(:,i,3).*exp(-T02.*B_incTM1(:,i,3));
    B_incTM1(:,i,3) = B_incTM1(:,i,3)./(jay*k(3));
    A_refTM1(:,i,3) = A_refTM1(:,i,3).*exp(-T02.*B_refTM1(:,i,3));
    B_refTM1(:,i,3) = B_refTM1(:,i,3)./(jay*k(3));
end

%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
% APLICAÇÃO DA IDENTIDADE DE SOMMERFELD
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

J1 = length(B_incTM1(:,1,1));
disp('CÁLCULO DO CAMPO NA CAMADA 1')
% CALCULO DO CAMPO ELÉTRICO NA CAMADA 1
for i=1:Qx

```



```

% Cálculo das funções estendidas ao caminho C1
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

for i=1:Qz
    f_incTM_a1(:,i,1) = A_incTM1(:,i,1).'*exp(-B_incTM1(:,i,1)*kz(:,1).');
    f_refTM_a1(:,i,1) = A_refTM1(:,i,1).'*exp(-B_refTM1(:,i,1)*kz(:,1).');
end
for i=1:Qz
    f_incTM_a1(:,i,2) = A_incTM1(:,i,2).'*exp(-B_incTM1(:,i,2)*kz(:,2).');
    f_refTM_a1(:,i,2) = A_refTM1(:,i,2).'*exp(-B_refTM1(:,i,2)*kz(:,2).');
end
for i=1:Qz
    f_incTM_a1(:,i,3) = A_incTM1(:,i,3).'*exp(-B_incTM1(:,i,3)*kz(:,3).');
    f_refTM_a1(:,i,3) = A_refTM1(:,i,3).'*exp(-B_refTM1(:,i,3)*kz(:,3).');
end

%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
% CÁLCULO DO KERNEL NO CAMINHO COMPLEXO C1
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

ATM          = ones(Q2,N);
ATM(:,1)     = A1;
RTM          = zeros(Q2,N);
for n=1:Q2 %Variacao do angulo de incidencia (n)
    %Coeficiente de reflexao generalizado
    for i=(N-1):-1:1
        rTM(n,i) = (e(i+1).*kz(n,i)-e(i).*kz(n,i+1))./(e(i+1).*kz(n,i)+e(i).*kz(n,i+1));
        tTM(n,i) = (2.*e(i+1).*kz(n,i))./(e(i+1).*kz(n,i)+e(i).*kz(n,i+1));
        RTM(n,i) = (rTM(n,i)+RTM(n,i+1).*exp(-2.*jay.*kz(n,i+1).*(d(i+1)-d(i))))./...
            (1+rTM(n,i).*RTM(n,i+1).*exp(-2.*jay.*kz(n,i+1).*(d(i+1)-d(i))));
    end
    for i=2:N
        STM(n,i-1) = (tTM(n,i-1))./(1+rTM(n,i-1).*RTM(n,i).*exp(-2.*jay.*kz(n,i).*(d(i)-d(i-1))));
        ATM(n,i)   = ATM(n,i-1).*exp(-jay.*kz(n,i-1).*(d(i)-d(i-1)))./exp(-jay.*kz(n,i).*(d(i)-d(i-1)));
        TTM(n,i-1) = ATM(n,i).*exp(-jay.*kz(n,i).*(d(i)-d(i-1)))./ATM(n,1).*exp(-jay.*kz(n,1).*(d(i)-d(1)));
    end
end

%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
% Subtração do Kernel estendido do analítico em C1
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

for n=1:Q2 % Variação espectral em kp
    for i=1:Qz % Variação espacial em cada ponto z
        f_incTM2(n,i,1) = (kz(n,1).*(kp(n,1).^2).*ATM(n,1).*...
            exp(jay.*(kz(n,1).*absoluto(z(i,1),z_linha)-kz(n,1).*z_linha)))./...
            (jay.*kz(n,1).*exp(-jay.*(kz(n,1).*modulo(z(i,1),z_linha))));
        f_incTM2(n,i,1) = f_incTM2(n,i,1) - f_incTM_a1(n,i,1);
        f_refTM2(n,i,1) = (kz(n,1).*(kp(n,1).^2).*ATM(n,1).*RTM(n,1).*...
            exp(-jay.*(kz(n,1).*(z(i,1)+2.*d(1))+kz(n,1).*z_linha)))./...
            (jay.*kz(n,1).*exp(-jay.*(kz(n,1).*modulo(z(i,1),z_linha))));
        f_refTM2(n,i,1) = f_refTM2(n,i,1) - f_refTM_a1(n,i,1);
    end
    for i=1:Qz
        f_incTM2(n,i,2) = (kz(n,2).*(kp(n,1).^2).*ATM(n,2).*...
            exp(jay.*(kz(n,2).*absoluto(z(i,2),z_linha)-kz(n,1).*z_linha)))./...
            (jay.*kz(n,1).*exp(-jay.*(kz(n,2).*modulo(z(i,2),z_linha))));
        f_incTM2(n,i,2) = f_incTM2(n,i,2) - f_incTM_a1(n,i,2);
        f_refTM2(n,i,2) = (kz(n,2).*(kp(n,1).^2).*ATM(n,2).*RTM(n,2).*...
            exp(-jay.*(kz(n,2).*(z(i,2)+2.*d(2))+kz(n,1).*z_linha)))./...

```

```

    (jay.*kz(n,1).*exp(-jay.*(kz(n,2).*modulo(z(i,2),z_linha))));
    f_refTM2(n,i,2) = f_refTM2(n,i,2) - f_refTM_a1(n,i,2);
end
for i=1:Qz
    f_incTM2(n,i,3) = (kz(n,3).*(kp(n,1).^2).*ATM(n,3).*...
    exp(jay.*(kz(n,3).*absoluto(z(i,3),z_linha)-kz(n,1).*z_linha)))/...
    (jay.*kz(n,1).*exp(-jay.*(kz(n,3).*modulo(z(i,3),z_linha))));
    f_incTM2(n,i,3) = f_incTM2(n,i,3) - f_incTM_a1(n,i,3);
    f_refTM2(n,i,3) = (kz(n,3).*(kp(n,1).^2).*ATM(n,3).*RTM(n,3).*...
    exp(-jay.*(kz(n,3).*(z(i,3)+2.*d(3))+kz(n,1).*z_linha)))/...
    (jay.*kz(n,1).*exp(-jay.*(kz(n,3).*modulo(z(i,3),z_linha))));
    f_refTM2(n,i,3) = f_refTM2(n,i,3) - f_refTM_a1(n,i,3);
end
end

%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
% Aproximação do Kernel via GPOF em t
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

disp('INICIALIZANDO APROXIMAÇÃO NO SEGUNDO CAMINHO')
for i=1:Qz
    [B_incTM2(:,i,1), A_incTM2(:,i,1),M2] = gpof(f_incTM2(:,i,1),tol) ;
    [B_refTM2(:,i,1), A_refTM2(:,i,1),M2] = gpof(f_refTM2(:,i,1),tol) ;
    %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
    % Mudança para kz
    %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
    B_incTM2(:,i,1) = B_incTM2(:,i,1).*T02./(k(1).*(jay*T02+1));
    A_incTM2(:,i,1) = A_incTM2(:,i,1).*exp(k(1).*B_incTM2(:,i,1));
    B_refTM2(:,i,1) = B_refTM2(:,i,1).*T02./(k(1).*(jay*T02+1));
    A_refTM2(:,i,1) = A_refTM2(:,i,1).*exp(k(1).*B_refTM2(:,i,1));
end
for i=1:Qz
    [B_incTM2(:,i,2), A_incTM2(:,i,2),M2] = gpof(f_incTM2(:,i,2),tol) ;
    [B_refTM2(:,i,2), A_refTM2(:,i,2),M2] = gpof(f_refTM2(:,i,2),tol) ;
    %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
    % Mudança para kz
    %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
    B_incTM2(:,i,2) = B_incTM2(:,i,2).*T02./(k(2).*(jay*T02+1));
    A_incTM2(:,i,2) = A_incTM2(:,i,2).*exp(k(2).*B_incTM2(:,i,2));
    B_refTM2(:,i,2) = B_refTM2(:,i,2).*T02./(k(2).*(jay*T02+1));
    A_refTM2(:,i,2) = A_refTM2(:,i,2).*exp(k(2).*B_refTM2(:,i,2));
end
for i=1:Qz
    [B_incTM2(:,i,3), A_incTM2(:,i,3),M2] = gpof(f_incTM2(:,i,3),tol) ;
    [B_refTM2(:,i,3), A_refTM2(:,i,3),M2] = gpof(f_refTM2(:,i,3),tol) ;
    %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
    % Mudança para kz
    %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
    B_incTM2(:,i,3) = B_incTM2(:,i,3).*T02./(k(3).*(jay*T02+1));
    A_incTM2(:,i,3) = A_incTM2(:,i,3).*exp(k(3).*B_incTM2(:,i,3));
    B_refTM2(:,i,3) = B_refTM2(:,i,3).*T02./(k(3).*(jay*T02+1));
    A_refTM2(:,i,3) = A_refTM2(:,i,3).*exp(k(3).*B_refTM2(:,i,3));
end

%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
% Identidade de Sommerfeld para C1
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

J2 = length(B_incTM2(:,1,1));
disp('CÁLCULO DO CAMPO NA CAMADA 1')
```

```

for i=1:Qx
    for j=1:Qz
        for n=1:J2
            R2_inc(i,j,n) = sqrt((x(i,1)-x_linha).^2+(z(j,1)-z_linha - 2*d(1) - B_incTM2(n,j,1)).^2);
            R2_ref(i,j,n) = sqrt((x(i,1)-x_linha).^2+(z(j,1)-z_linha - 2*d(1) - B_refTM2(n,j,1)).^2);
            Ez_inc2(i,j,n) = A_incTM2(n,i,1).*(exp(-jay.*k(1).*R2_inc(i,j,n))./R2_inc(i,j,n);
            Ez_ref2(i,j,n) = A_refTM2(n,i,1).*(exp(-jay.*k(1).*R2_ref(i,j,n))./R2_ref(i,j,n);
            Ez_total2(i,j,n)= Ez_inc2(i,j,n) + Ez_ref2(i,j,n);
        end
        Ez_soma11 = sum(Ez_total2,3);
    end
end
Ez11 = (1/(2*pi*W.*e(1))).*Ez_soma11.';
Ez_tot1 = (Ez11+Ez1);
disp('CÁLCULO DO CAMPO NA CAMADA 2')
for i=1:Qx
    for j=1:Qz
        for n=1:J2
            R2_inc(i,j,n) = sqrt((x(i,2)-x_linha).^2+(z(j,2)-z_linha - 2*d(2) - B_incTM2(n,j,2)).^2);
            R2_ref(i,j,n) = sqrt((x(i,2)-x_linha).^2+(z(j,2)-z_linha - 2*d(2) - B_refTM2(n,j,2)).^2);
            Ez_inc2(i,j,n) = A_incTM2(n,i,2).*(exp(-jay.*k(2).*R2_inc(i,j,n))./R2_inc(i,j,n);
            Ez_ref2(i,j,n) = A_refTM2(n,i,2).*(exp(-jay.*k(2).*R2_ref(i,j,n))./R2_ref(i,j,n);
            Ez_total2(i,j,n) = Ez_inc2(i,j,n) + Ez_ref2(i,j,n);
        end
        Ez_soma22 = sum(Ez_total2,3);
    end
end
Ez22 = (1/(2*pi*W.*e(2))).*Ez_soma22.';
Ez_tot2 = (Ez22+Ez2);
disp('CÁLCULO DO CAMPO NA CAMADA 3')
for i=1:Qx
    for j=1:Qz
        for n=1:J2
            R2_inc(i,j,n) = sqrt((x(i,3)-x_linha).^2+(z(j,3)-z_linha - 2*d(3) - B_incTM2(n,j,3)).^2);
            R2_ref(i,j,n) = sqrt((x(i,3)-x_linha).^2+(z(j,3)-z_linha - 2*d(3) - B_refTM2(n,j,3)).^2);
            Ez_inc2(i,j,n) = A_incTM2(n,i,3).*(exp(-jay.*k(3).*R2_inc(i,j,n))./R2_inc(i,j,n);
            Ez_ref2(i,j,n) = A_refTM2(n,i,3).*(exp(-jay.*k(3).*R2_ref(i,j,n))./R2_ref(i,j,n);
            Ez_total2(i,j,n) = Ez_inc2(i,j,n) + Ez_ref2(i,j,n);
        end
        Ez_soma33 = sum(Ez_total2,3);
    end
end
Ez33 = (1/(2*pi*W.*e(3))).*Ez_soma33.';
Ez_tot3 = (Ez33+Ez3);

%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
% Plota-se resultados
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

figure
hold on
for i=1:1
    [X,Z]=meshgrid(x(:,i),z(:,i));
    surf(1e9.*X,1e9.*Z,20*log10(abs(real(Ez_tot1))), 'EdgeAlpha', 0),
    axis([1e9.*min(x(:,1)) 1e9.*max(x(:,1)) 1e9.*min(z(:,N)) 1e9.*max(z(:,1)) ]);
    xlabel('x (nm)'),ylabel('z (nm)'),alpha 1.0 , view(0,90), grid off , hold on
end
hold on
for i=2:2
    [X,Z]=meshgrid(x(:,i),z(:,i));

```

```

surf(1e9.*X,1e9.*Z,20*log10(abs(real(Ez_tot2))), 'EdgeAlpha', 0),
axis([1e9.*min(x(:,1)) 1e9.*max(x(:,1)) 1e9.*min(z(:,N)) 1e9.*max(z(:,1)) ]);
xlabel('x (nm)'),ylabel('z (nm)'),alpha 1.0 , view(0,90), grid off , hold on
end
hold on
for i=3:3
[X,Z]=meshgrid(x(:,i),z(:,i));
surf(1e9.*X,1e9.*Z,20*log10(abs(real(Ez_tot3))), 'EdgeAlpha', 0),
axis([1e9.*min(x(:,1)) 1e9.*max(x(:,1)) 1e9.*min(z(:,N)) 1e9.*max(z(:,1)) ]);
xlabel('x (nm)'),ylabel('z (nm)'),alpha 1.0 , view(0,90), grid off , hold on
end
colormap(flipud(hot));

figure
hold on
for i=1:1
[X,Z]=meshgrid(x(:,i),z(:,i));
surf(1e9.*X,1e9.*Z,(abs(angle(Ez_tot1))), 'EdgeAlpha', 0),
axis([1e9.*min(x(:,1)) 1e9.*max(x(:,1)) 1e9.*min(z(:,N)) 1e9.*max(z(:,1)) ]);
xlabel('x (nm)'),ylabel('z (nm)'),alpha 1.0 , view(0,90), grid off , hold on
end
hold on
for i=2:2
[X,Z]=meshgrid(x(:,i),z(:,i));
surf(1e9.*X,1e9.*Z,(abs(angle(Ez_tot2))), 'EdgeAlpha', 0),
axis([1e9.*min(x(:,1)) 1e9.*max(x(:,1)) 1e9.*min(z(:,N)) 1e9.*max(z(:,1)) ]);
xlabel('x (nm)'),ylabel('z (nm)'),alpha 1.0 , view(0,90), grid off , hold on
end
hold on
for i=3:3
[X,Z]=meshgrid(x(:,i),z(:,i));
surf(1e9.*X,1e9.*Z,(abs(angle(Ez_tot3))), 'EdgeAlpha', 0),
axis([1e9.*min(x(:,1)) 1e9.*max(x(:,1)) 1e9.*min(z(:,N)) 1e9.*max(z(:,1)) ]);
xlabel('x (nm)'),ylabel('z (nm)'),alpha 1.0 , view(0,90), grid off , hold on
end
colormap(flipud(hot));

```