

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

ANÁLISE COMPARATIVA DAS PROPRIEDADES RESSONANTES DE  
NANOPARTÍCULAS E DE NANOANTENAS *BOWTIE* DE OURO DE  
DIFERENTES GEOMETRIAS

THAÍS LIRA TAVARES DOS SANTOS

TD – 15 / 2012

UFPA / ITEC / PPGEE  
Campus Universitário do Guamá  
Belém-Pará-Brasil  
2012



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

ANÁLISE COMPARATIVA DAS PROPRIEDADES RESSONANTES DE  
NANOPARTÍCULAS E DE NANOANTENAS *BOWTIE* DE OURO DE  
DIFERENTES GEOMETRIAS

THAÍS LIRA TAVARES DOS SANTOS

TD – 15 / 2012

UFPA / ITEC / PPGEE  
Campus Universitário do Guamá  
Belém-Pará-Brasil  
2012

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

THAÍS LIRA TAVARES DOS SANTOS

ANÁLISE COMPARATIVA DAS PROPRIEDADES RESSONANTES DE  
NANOPARTÍCULAS E DE NANOANTENAS *BOWTIE* DE OURO DE  
DIFERENTES GEOMETRIAS

Tese de doutorado submetida à  
Banca Examinadora do Programa de  
Pós-Graduação em Engenharia  
Elétrica da UFPA para a obtenção  
do Grau de Doutora em Engenharia  
Elétrica.

Orientador: Prof. Dr. Victor  
Alexandrovich Dmitriev

UFPA / ITEC / PPGEE  
Campus Universitário do Guamá  
Belém-Pará-Brasil  
2012

---

Santos, Thaís Lira Tavares dos

Análise comparativa das propriedades ressonantes de nanopartículas e de nanoantenas BOWTIE de ouro de diferentes geometrias / Thaís Lira Tavares dos Santos; Orientador, Victor Alexandrovich Dmitriev.- 2012.

Tese (Doutorado) – Universidade Federal do Pará, Instituto de Tecnologia, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Elétrica, Belém, 2012.

1. Nanotecnologia - materiais I. Orientador. II. Título.

CDD 22. ed. 620.5

---

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

ANÁLISE COMPARATIVA DAS PROPRIEDADES RESSONANTES DE  
NANOPARTÍCULAS E DE NANOANTENAS *BOWTIE* DE OURO DE  
DIFERENTES GEOMETRIAS

AUTORA: THAÍS LIRA TAVARES DOS SANTOS

TESE DE DOUTORADO SUBMETIDA À AVALIAÇÃO DA BANCA  
EXAMINADORA APROVADA PELO COLEGIADO DO PROGRAMA DE PÓS-  
GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA ELÉTRICA DA UNIVERSIDADE FEDERAL  
DO PARÁ E JULGADA ADEQUADA PARA OBTENÇÃO DO GRAU DE  
DOUTORA EM ENGENHARIA ELÉTRICA NA ÁREA DE  
TELECOMUNICAÇÕES.

APROVADA EM 14 / 12 / 2012

BANCA EXAMINADORA:

---

Prof. Dr. Victor Alexandrovich Dmitriev  
(ORIENTADOR – PPGEE/UFPA)

---

Prof. Dr. Karlo Queiroz da Costa  
(CO-ORIENTADOR – PPGEE/UFPA)

---

Prof. Dr. Márcio André Rodrigues Cavalcanti de Alencar  
(MEMBRO – IF/UFAL)

---

Prof. Dr. Humberto César Chaves Fernandes  
(MEMBRO – DEE/UFRN)

---

Prof. Dr. José Felipe Souza de Almeida  
(MEMBRO – ICIBE/UFRA)

---

Prof. Dr. Danilo Teixeira Alves  
(MEMBRO – PPGF/UFPA)

VISTO:

---

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

*“Quem acredita sempre alcança!”*  
Renato Manfredini Júnior.  
(1960 – 1996)

## **DEDICATÓRIA**

Esta tese de doutorado é dedicada aos meus avós maternos Osvaldo e Maria e à minha mãe Odiléa, com muito amor, e a todos aqueles que são ou foram vítimas de *bullying*, com o meu mais profundo respeito.



## AGRADECIMENTOS

Em primeiro lugar, agradeço a Deus pela conquista do tão sonhado título de doutora e por ter confortado meu coração nos momentos mais difíceis.

Agradeço ao meu orientador, Prof. Dr. Victor Dmitriev, por ter confiado em mim como pesquisadora e por ter me dado a oportunidade de realizar um sonho que quase foi interrompido. Agradeço também ao Prof. Dr. Karlo Queiroz da Costa pela orientação que foi fundamental para a conclusão deste trabalho.

Agradeço sempre e desde sempre ao Prof. Dr. José Felipe Souza de Almeida, aos demais membros da banca examinadora e aos revisores da revista por suas precisas contribuições para a versão final deste trabalho.

Agradeço à Universidade Federal do Pará e a todos os professores das disciplinas cursadas no doutorado, pelo suporte de ensino. Agradeço também ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico pela concessão da bolsa de doutorado.

Agradeço aos meus avós maternos Osvaldo e Maria, pelo apoio e suporte dados nos últimos 3 anos, sem os quais eu não teria concluído esta tese. Agradeço à minha mãe Odiléa, à minha família Lira Tavares, ao meu cunhado Zé Filho, à minha irmã Lorena e aos meus sobrinhos Leonardo e Daniel, pelas suas orações e pela torcida de sempre. Agradeço à Priscila (*in memoriam*), minha cadelinha linda, pelo carinho dado.

Agradeço à minha amiga Gabriela Torres, pelas vibrações positivas e pela energia de otimismo. Agradeço à família Torres por sempre me receberem com muita alegria em sua casa. Em especial a Izabel, Solange, Iacélis, Elenice, Dona Zélia, Luan, Fernanda e Tia Vivi. A torcida de vocês foi de extrema importância.

Agradeço à Renata pelo suporte dado no início do doutorado e aos meus amigos Luana, Walessa, Andressa, Hardiney e Marco Dantas, pela compreensão da minha ausência nos momentos da diversão e pela amizade verdadeira.

Agradeço aos colegas de curso, Fabrício e Rodrigo Lisbôa, ao Prof. Dr. Rodrigo Oliveira e aos amigos do Laboratório de Nanoeletrônica e Nanofotônica: Anderson, Andrey, André, Clerisson, Bruno, Dionísio, Luciana, Tiago, Fernando Gomes, Fernando Paixão, Francisco, Gianni, Leonardo, Marcelo, Rafael, Daiman, Antônio, Ewerton, Nadson, Dilermando e à Dona Arlete, pelos momentos de alegria compartilhados.

Finalmente, agradeço à Física, meu amor maior, razão pela qual sempre tive vontade de alcançar as estrelas.

## SUMÁRIO

<b>LISTA DE FIGURAS.....</b>	<b>x</b>
<b>LISTA DE TABELAS.....</b>	<b>xiii</b>
<b>LISTA DE SÍMBOLOS.....</b>	<b>xv</b>
<b>LISTA DE SIGLAS.....</b>	<b>xvi</b>
<b>RESUMO.....</b>	<b>xvii</b>
<b>ABSTRACT.....</b>	<b>xviii</b>

### CAPÍTULO 1

<b>INTRODUÇÃO.....</b>	<b>1</b>
1.1 Conteúdo do Capítulo.....	1
1.2 Introdução Geral.....	1
1.3 Objetivos do Trabalho.....	2
1.4 Organização do Trabalho.....	2
1.5 Referências.....	3

### CAPÍTULO 2

<b>NANOPLASMÔNICA E NANOESTRUTURAS METÁLICAS.....</b>	<b>5</b>
2.1 Conteúdo do Capítulo.....	5
2.2 Nanopartículas Metálicas.....	5
2.2.1 Ressonância Plasmônica de Superfície.....	5
2.2.2 Propriedades dos Metais em Frequências Ópticas.....	6
2.2.3 O Modelo de Lorentz-Drude.....	7
2.2.4 Aplicações de Nanopartículas Metálicas: Estado da Arte.....	8
2.3 Nanoantenas Metálicas.....	10
2.3.1 Nanoantenas <i>Bowtie</i> .....	10
2.3.2 Aplicações de Nanoantenas <i>Bowtie</i> : Estado da Arte.....	11
2.4 Referências.....	11

### CAPÍTULO 3

<b>NANOPARTÍCULAS DE OURO COM NOVAS GEOMETRIAS TRIANGULARES E RESULTADOS NUMÉRICOS.....</b>	<b>15</b>
3.1 Conteúdo do Capítulo.....	15
3.2 Introdução.....	15
3.3 O <i>Software</i> CST MICROWAVE STUDIO®.....	15
3.4 Primeiro Grupo de Nanopartículas de Ouro Analisadas.....	16
3.4.1 Resultados Numéricos.....	17
3.4.1.1 Respostas Ressonantes do Campo Elétrico Próximo.....	17
3.4.1.2 Distribuições Espaciais do Campo Elétrico Próximo.....	19
3.4.1.3 Densidade de Corrente.....	21
3.5 Segundo Grupo de Nanopartículas de Ouro Analisadas.....	22
3.5.1 Resultados Numéricos.....	23
3.5.1.1 Respostas Ressonantes do Campo Elétrico Próximo.....	23
3.5.1.2 Distribuições Espaciais do Campo Elétrico Próximo.....	25
3.5.1.3 Densidade de Corrente.....	27
3.6 Terceiro Grupo de Nanopartículas de Ouro Analisadas.....	28

3.6.1 Resultados Numéricos.....	29
3.6.1.1 Respostas Ressonantes do Campo Elétrico Próximo.....	29
3.6.1.2 Distribuições Espaciais do Campo Elétrico Próximo.....	30
3.6.1.3 Densidade de Corrente.....	32
3.7 Análise Comparativa dos Resultados Numéricos.....	33
3.8 Referências.....	34

## CAPÍTULO 4

<b>NANOANTENAS <i>BOWTIE</i> DE OURO COM NOVAS GEOMETRIAS TRIANGULARES E RESULTADOS NUMÉRICOS.....</b>	<b>36</b>
4.1 Conteúdo do Capítulo.....	36
4.2 Introdução.....	36
4.3 Nanoantenas <i>Bowtie</i> com Novas Geometrias Triangulares.....	36
4.3.1 Resultados Numéricos.....	37
4.3.1.1 Respostas Ressonantes do Campo Elétrico Próximo.....	37
4.3.1.1.1 Influência do Tamanho do <i>Gap</i> .....	40
4.3.1.1.2 Influência de um Substrato de SiO <sub>2</sub> .....	41
4.3.1.2 Distribuições Espaciais do Campo Elétrico Próximo.....	42
4.3.1.3 Densidade de Corrente.....	45
4.3.1.4 Diagramas de Campo Distante.....	45
4.4 Nanoantenas <i>Bowtie</i> Triangulares de Lado Encurvado e com Três Pontas.	46
4.4.1 Resultados Numéricos.....	47
4.4.1.1 Respostas Ressonantes do Campo Elétrico Próximo.....	47
4.4.1.2 Distribuições Espaciais do Campo Elétrico Próximo.....	48
4.4.1.3 Densidade de Corrente.....	50
4.4.1.4 Diagramas de Campo Distante.....	51
4.5 Referências.....	52

## CAPÍTULO 5

<b>CONCLUSÕES.....</b>	<b>53</b>
5.1 Considerações Finais.....	53
5.2 Trabalhos Futuros.....	54
5.3 Publicações.....	54

## LISTA DE FIGURAS

<b>Figura 2.1.</b>	Ressonância plasmônica de superfície.....	6
<b>Figura 2.2.</b>	Parte imaginária (a) e parte real (b) da permissividade relativa $\epsilon_r$ , calculada para o ouro pelo modelo de Lorentz-Drude nas regiões do visível e do infravermelho próximo do espectro eletromagnético.....	7
<b>Figura 2.3.</b>	Nanopartículas metálicas de diferentes geometrias: (a) Nanodisco triangular [16], (b) Nanodisco circular [13], (c) Nanoesfera [18], (d) Nanohaste [18], (e) Tetraedro modificado [19], (f) <i>Nanoburger</i> [20], (g) Nanoestrela [21], Nanopartícula cônica com a ponta modificada [22].....	8
<b>Figura 2.4.</b>	Geometria de uma nanoantena <i>bowtie</i> .....	10
<b>Figura 3.1.</b>	Primeiro grupo de NPOs analisadas: (a) NPC138, (b) NPTCx96, (c) NPTCx162, (d) NPTCx336, (e) NPTE138, (f) NPTCv325 e (g) NPTCv160: $W = 138,6$ nm, $H = 20$ nm; Para (a), (b), (c), (d), (f) e (g), $R = 60$ nm, $96,3$ nm, $162,9$ nm, $336,5$ nm, $325$ nm e $160$ nm, respectivamente.....	16
<b>Figura 3.2.</b>	Distância $d$ entre a ponta de uma NPO até o ponto de observação no eixo $x$ ( $(W/2), 0, 0$ ).....	17
<b>Figura 3.3.</b>	Intensidade do campo elétrico $ E_x ^2$ no ponto $d = 5$ nm para as NPOs ilustradas na Fig. 3.1.....	18
<b>Figura 3.4.</b>	Distribuição espacial do campo elétrico $ E_x $ no plano $xy$ ( $z = 0$ ) para (a) NPC138, (b) NPTCx96, (c) NPTCx162, (d) NPTCx336, (e) NPTE138, (f) NPTCv325 e (g) NPTCv160.....	20
<b>Figura 3.5.</b>	Distribuição espacial do campo elétrico $ E_x $ no plano $yz$ ( $x = 74,3$ nm) para (a) NPTE138 e (b) NPTCv325.....	21
<b>Figura 3.6.</b>	Distribuição espacial do campo elétrico $ E_x $ no plano $xz$ ( $y = 0$ ) para (a) NPTE138 e (b) NPTCv325.....	21
<b>Figura 3.7.</b>	Densidade de corrente no plano $xy$ ( $z = 0$ ): (a) NPTE138, (b) ponta de NPTE138, (c) NPTCv325, (d) ponta de NPTCv325.....	22
<b>Figura 3.8.</b>	Segundo grupo de geometrias analisadas: (a) NPT3P60LE, (b) NPT3P75LE, (c) NPT3P90LE, (d) NPT3P105LE e (e) NPT138LE: $W = R = 138,6$ nm, $H = 20$ nm; Para (a), (b), (c) e (d), $W_T = 60$ nm, $75$ nm, $90$ nm e $105$ nm, respectivamente.....	23
<b>Figura 3.9.</b>	Intensidade do campo elétrico $ E_x ^2$ no ponto $d = 5$ nm para as NPOs ilustradas na Fig. 3.8.....	24
<b>Figura 3.10.</b>	Distribuição espacial do campo elétrico $ E_x $ no plano $xy$ ( $z = 0$ ) para (a) NPT3P60LE, (b) NPT3P75LE, (c) NPT3P90LE, (d) NPT3P105LE, (e) NPT138LE.....	26
<b>Figura 3.11.</b>	Distribuição espacial do campo elétrico $ E_x $ no plano $yz$ ( $x = 74,3$ nm) para (a) NPT3P105LE (1° pico), (b) NPT3P105LE (2° pico) e (c) NPT138LE.....	27
<b>Figura 3.12.</b>	Distribuição espacial do campo elétrico $ E_x $ no plano $xz$ ( $y = 0$ ) para (a) NPT3P105LE (1° pico), (b) NPT3P105LE (2° pico) e (c) NPT138LE.....	27
<b>Figura 3.13.</b>	Densidade de corrente no plano $xy$ ( $z = 0$ ): (a) NPT3P105LE, (b) ponta de NPT3P105LE, (c) NPT138LE, (d) ponta de NPT138LE.....	28
<b>Figura 3.14.</b>	Terceiro grupo de geometrias analisadas: (a) NPT3P60, (b) NPT3P75, (c) NPT3P90, (d) NPT3P105 e (e) NPTE138: $W = 138,6$ nm, $H = 20$ nm; Para (a), (b), (c) e (d), $W_T = 60$ nm, $75$ nm, $90$ nm e	28

	105 nm, respectivamente.....	
<b>Figura 3.15.</b>	Intensidade do campo elétrico $ E_x ^2$ no ponto $d = 5$ nm para as NPOs ilustradas na Fig. 3.14.....	29
<b>Figura 3.16.</b>	Distribuição espacial do campo elétrico $ E_x $ no plano $xy$ ( $z = 0$ ) para (a) NPT3P60, (b) NPT3P75, (c) NPT3P90, (d) NPT3P105LE.....	31
<b>Figura 3.17.</b>	Distribuição espacial do campo elétrico $ E_x $ no plano $yz$ ( $x = 74,3$ nm) para (a) NPT3P105 (1° pico), (b) NPT3P105 (2° pico).....	31
<b>Figura 3.18.</b>	Distribuição espacial do campo elétrico $ E_x $ no plano $xz$ ( $y = 0$ ) para (a) NPT3P105 (1° pico), (b) NPT3P105 (2° pico).....	32
<b>Figura 3.19.</b>	Densidade de corrente no plano $xy$ ( $z = 0$ ): (a) NPT3P105, (b) ponta de NPT3P105.....	32
<b>Figura 3.20.</b>	Geometrias triangulares modificadas: (a) NPTE138, (b) NPTCv160, (c) NPT138LE e (d) NPT3P105LE: $W = 138,6$ nm, $H = 20$ nm; para (b), (c) e (d), $R = 138,6$ nm; para (d), $W_T = 105$ nm....	33
<b>Figura 3.21.</b>	Intensidade do campo elétrico $ E_x ^2$ no ponto $d = 5$ nm para as NPOs ilustradas na Fig. 3.20.....	34
<b>Figura 4.1.</b>	NBOs analisadas: (a) NBTE, (b) NBTC, (c) NBTLE e (d) NBT3PLE: $W = 138,6$ nm, $g = 10$ nm, $H = 20$ nm; para (c) e (d), $R = 138,6$ nm; para (d), $L = 33,6$ nm.....	37
<b>Figura 4.2.</b>	Intensidade do campo elétrico $ E ^2$ no meio do <i>gap</i> para as NBOs ilustradas na Fig. 4.1.....	37
<b>Figura 4.3.</b>	Intensidade do campo elétrico $ E ^2$ em dois pontos ( $d = 5$ e $20$ nm) próximos de uma das duas pontas laterais de NBT3PLE (Fig. 4.1d).	38
<b>Figura 4.4.</b>	Intensidade do campo elétrico $ E ^2$ em dois pontos ao longo do eixo $x$ ( $d = 5$ e $20$ nm) próximos de uma das pontas laterais da NBT3PLE.....	39
<b>Figura 4.5.</b>	Intensidade do campo elétrico $ E ^2$ no meio dos três <i>gaps</i> ( $g = 10, 15$ e $20$ nm), para a (a) NBTE e para a (b) NBT3PLE.....	40
<b>Figura 4.6.</b>	Intensidade do campo elétrico $ E ^2$ no ponto no meio do <i>gap</i> para a NBT3PLE com e sem o substrato de $\text{SiO}_2$ .....	42
<b>Figura 4.7.</b>	Distribuição espacial do campo elétrico $ E $ no plano $xy$ ( $z = 0$ ) para (a) NBTE, (b) NBTC, (c) NBTLE e (d) NBT3PLE.....	43
<b>Figura 4.8.</b>	Distribuição espacial do campo elétrico $ E $ no plano $yz$ ( $x = 0$ ) para (a) NBTE e (b) NBT3PLE.....	44
<b>Figura 4.9.</b>	Distribuição espacial do campo elétrico $ E $ no plano $xz$ ( $y = 0$ ) para (a) NBTE e (b) NBT3PLE.....	44
<b>Figura 4.10.</b>	Densidade de corrente no plano $xy$ ( $z = 0$ ): (a) NBTE, (b) ponta de NBTE, (c) NBT3P105LE, (d) ponta de NBT3P105LE.....	45
<b>Figura 4.11.</b>	(a) Seções retas de espalhamento na direção $+z$ <i>versus</i> comprimento de onda. (b) Diagramas de intensidade de radiação $U(\theta, \phi)$ das NBOs no plano $xz$ , em seus respectivos comprimentos de onda ressonantes apresentados na Tabela 4.1. Estes diagramas foram normalizados com a intensidade máxima de radiação da NBTE.....	46
<b>Figura 4.12.</b>	NBT3PLEs analisadas: $g = 10$ nm, $W = R = 138,6$ nm; (a) NBT3P60LE ( $W_T = 60$ nm), (b) NBT3P75LE ( $W_T = 75$ nm), (c) NBT3P90LE ( $W_T = 90$ nm) e (d) NBT3P105LE ( $W_T = 105$ nm).....	47
<b>Figura 4.13.</b>	Intensidade do campo elétrico $ E ^2$ no ponto no meio do <i>gap</i> para as NBOs ilustradas na Fig. 4.12.....	47
<b>Figura 4.14.</b>	Distribuição espacial do campo elétrico $ E $ no plano $xy$ ( $z = 0$ ) para (a) NBT3P60LE, (b) NBT3P75LE, (c) NBT3P90LE e (d)	49

	NBT3P105LE.....	
<b>Figura 4.15.</b>	Distribuição espacial do campo elétrico $ E $ no plano $yz$ ( $x = 0$ ) para (a) NBT3P60LE, (b) NBT3P75LE, (c) NBT3P90LE e (d) NBT3P105LE.....	49
<b>Figura 4.16.</b>	Distribuição espacial do campo elétrico $ E $ no plano $xz$ ( $y = 0$ ) para (a) NBT3P60LE, (b) NBT3P75LE, (c) NBT3P90LE e (d) NBT3P105LE.....	50
<b>Figura 4.17.</b>	Densidade de corrente no plano $xy$ : (a) NBT3P75LE ( $z = 0$ ), (b) ponta de NBT3P75LE ( $z = 0$ ), (c) NBT3P90LE ( $z = 0$ ), (d) ponta de NBT3P90LE ( $z = 0$ ).....	51
<b>Figura 4.18.</b>	(a) Seções retas de espalhamento na direção $+z$ <i>versus</i> comprimento de onda. (b) Diagramas de intensidade de radiação $U(\theta, \phi)$ das NBOs no plano $xz$ , em seus respectivos comprimentos de onda ressonantes apresentados na Tabela 4.10. Estes diagramas foram normalizados com a máxima intensidade de radiação da NBT3P90LE.....	51

## LISTA DE TABELAS

<b>Tabela 3.1.</b>	Valores máximos da intensidade do campo elétrico $ E_{x\max} ^2$ e comprimentos de onda ressonantes $\lambda_{\text{res}}$ para as NPOs ilustradas na Fig. 3.1.....	19
<b>Tabela 3.2.</b>	Percentual da diferença entre os valores máximos da intensidade do campo elétrico e comprimentos de onda ressonantes das NPOs ilustradas na Fig. 3.1 em relação aos valores apresentados pela NPTE138 (Fig. 3.1e).....	19
<b>Tabela 3.3.</b>	Valores máximos da intensidade do campo elétrico $ E_{x\max} ^2$ e comprimentos de onda ressonantes $\lambda_{\text{res}}$ para as NPOs ilustradas na Fig. 3.8.....	24
<b>Tabela 3.4.</b>	Percentual da diferença entre os valores máximos da intensidade do campo elétrico e comprimentos de onda ressonantes das NPOs ilustradas na Fig. 3.8 em relação aos valores apresentados pela NPTE138LE (Fig. 3.8e).....	25
<b>Tabela 3.5.</b>	Valores máximos da intensidade do campo elétrico $ E_{x\max} ^2$ e comprimentos de onda ressonantes $\lambda_{\text{res}}$ para as NPOs ilustradas na Fig. 3.14.....	30
<b>Tabela 3.6.</b>	Percentual da diferença entre os valores máximos da intensidade do campo elétrico e comprimentos de onda ressonantes das NPOs ilustradas na Fig. 3.14 em relação aos valores apresentados pela NPTE138 (Fig. 3.14e).....	30
<b>Tabela 3.7.</b>	Valores máximos da intensidade do campo elétrico $ E_{x\max} ^2$ e comprimentos de onda ressonantes $\lambda_{\text{res}}$ para as NPOs ilustradas na Fig. 3.20.....	34
<b>Tabela 3.8.</b>	Percentual da diferença entre os valores máximos da intensidade do campo elétrico e comprimentos de onda ressonantes das NPOs ilustradas na Fig. 3.20 em relação aos valores apresentados pela NPTE138 (Fig. 3.20d).....	34
<b>Tabela 4.1.</b>	Valores máximos da intensidade do campo elétrico $ E_{\max} ^2$ e comprimentos de onda ressonantes $\lambda_{\text{res}}$ para as NBOs ilustradas na Fig. 4.1.....	38
<b>Tabela 4.2.</b>	Percentual da diferença entre os valores máximos da intensidade do campo elétrico e comprimentos de onda ressonantes das NPOs ilustradas na Fig. 4.1 em relação aos valores apresentados pela NBTE (Fig. 4.1a).....	38
<b>Tabela 4.3.</b>	Valores máximos do campo elétrico $ E_{\max} ^2$ e comprimentos de onda ressonantes $\lambda_{\text{res}}$ em dois pontos ao longo do eixo $x$ ( $d = 5$ e $20$ nm) próximos de uma das duas pontas laterais da NBT3PLE.....	39
<b>Tabela 4.4.</b>	Percentual da diferença entre os valores máximos da intensidade do campo elétrico e comprimentos de onda ressonantes da NBT3PLE no ponto $d = 5$ nm em relação aos valores no ponto $d = 20$ nm.....	40
<b>Tabela 4.5.</b>	Valores máximos do campo elétrico $ E_{\max} ^2$ e comprimentos de onda ressonantes $\lambda_{\text{res}}$ no meio dos três <i>gaps</i> ( $g = 10, 15$ e $20$ nm) para a NBTE e para a NBT3PLE.....	41

<b>Tabela 4.6.</b>	Percentual da diferença entre os valores máximos da intensidade do campo elétrico e comprimentos de onda ressonantes nos <i>gaps</i> $g = 15$ nm e $20$ nm em relação aos valores no <i>gap</i> $g = 10$ nm.....	41
<b>Tabela 4.7.</b>	Propriedades do Dióxido de Silício ( $\text{SiO}_2$ ).....	41
<b>Tabela 4.8.</b>	Valores máximos da intensidade do campo elétrico $ E_{\text{max}} ^2$ e comprimentos de onda ressonantes $\lambda_{\text{res}}$ para a NBT3PLE com e sem o substrato de $\text{SiO}_2$ .....	42
<b>Tabela 4.9.</b>	Percentual da diferença entre os valores máximos da intensidade do campo elétrico e comprimentos de onda ressonantes sem o substrato em relação aos valores no com o substrato de $\text{SiO}_2$ .....	42
<b>Tabela 4.10.</b>	Valores máximos de intensidade do campo elétrico $ E_{\text{max}} ^2$ e comprimentos de onda ressonantes $\lambda_{\text{res}}$ das NBOs ilustradas na Fig. 4.12.....	48
<b>Tabela 4.11.</b>	Percentual da diferença entre os valores máximos da intensidade do campo elétrico e comprimentos de onda ressonantes das NPOs ilustradas na Fig. 4.12 em relação aos valores apresentados pela NBTE (Fig. 4.1a).....	48



## LISTA DE SÍMBOLOS

$\varepsilon$	Permissividade elétrica complexa do ouro
$\varepsilon_0$	Permissividade elétrica do vácuo
$\varepsilon_r$	Permissividade elétrica relativa
$\varepsilon_\infty$	Epsilon infinito
$\omega$	Frequência angular
$\omega_{p1}$	Frequência de plasma
$\Gamma$	Constante de amortecimento
$\omega_0$	Frequência de ressonância bem definida
$c$	Velocidade da luz no vácuo
$\lambda_0$	Comprimento de onda limite de boa aproximação
$\omega_{p2}$	Frequência de plasma dependente da densidade de elétrons ligados
$\gamma$	Constante de amortecimento para os elétrons ligados
$\varepsilon_{\text{Real}}$	Parte real da permissividade elétrica complexa
$\varepsilon_{\text{Imag}}$	Parte imaginária da permissividade elétrica complexa
$\text{Imag}(\varepsilon_r)$	Parte imaginária da permissividade elétrica relativa complexa do ouro
$\text{Real}(\varepsilon_r)$	Parte real da permissividade elétrica relativa complexa do ouro
$f$	Frequência
$x, y \text{ e } z$	Coordenadas do Sistema Cartesiano
$H$	Espessura das nanoestruturas
$W$	Largura das nanoestruturas (altura dos triângulos)
$E_x$	Componente $x$ do Campo Elétrico
$H_y$	Componente $y$ do Campo Magnético
$k_z$	Componente $z$ do vetor de onda
$R$	Raio de curvatura dos lados das geometrias das nanoestruturas
$d$	Distância do ponto de observação
$E_0$	Campo elétrico da onda plana incidente
$\infty$	Infinito
$E_{x\text{max}}$	Valor máximo da componente $x$ do campo elétrico
$\lambda_{\text{res}}$	Comprimento de onda ressonante
$W_T$	Largura das pontas laterais das nanoestruturas (altura dos triângulos)
$g$	<i>Gap</i> das nanoantenas <i>bowtie</i>
$E$	Valor absoluto do campo elétrico
$E_{\text{max}}$	Valor absoluto máximo do campo elétrico
$\text{SiO}_2$	Dióxido de Silício
$U$	Intensidade de radiação
$\theta$	Ângulo azimutal
$\phi$	Ângulo polar

## LISTA DE SIGLAS

<b>MoM</b>	Método dos momentos
<b>FDTD</b>	Método das diferenças finitas no domínio do tempo
<b>FI</b>	Integração finita
<b>CST MWS®</b>	<i>Computer Simulation Technology Microwave Studio®</i>
<b>NPOs</b>	Nanopartículas de ouro
<b>NBOs</b>	Nanoantenas <i>bowtie</i> de ouro
<b>PML</b>	Camadas perfeitamente casadas
<b>NPC138</b>	Nanopartícula circular com $W = 138$ nm
<b>NPTCx96</b>	Nanopartícula triangular convexa com $R = 96,3$ nm
<b>NPTCx162</b>	Nanopartícula triangular convexa com $R = 162,9$ nm
<b>NPTCx336</b>	Nanopartícula triangular convexa com $R = 336,5$ nm
<b>NPTE138</b>	Nanopartícula triangular equilátera com $W = 138$ nm
<b>NPTCv325</b>	Nanopartícula triangular côncava com $R = 325$ nm
<b>NPTCv160</b>	Nanopartícula triangular côncava com $R = 160$ nm
<b>NPT3P60LE</b>	Nanopartícula triangular de 3 pontas, lado encurvado ( $W_T = 60$ nm)
<b>NPT3P75LE</b>	Nanopartícula triangular de 3 pontas, lado encurvado ( $W_T = 75$ nm)
<b>NPT3P90LE</b>	Nanopartícula triangular de 3 pontas, lado encurvado ( $W_T = 90$ nm)
<b>NPT3P105LE</b>	Nanopartícula triangular de 3 pontas, lado encurvado ( $W_T = 105$ nm)
<b>NPT138LE</b>	Nanopartícula triangular de 3 pontas ( $W = 138$ nm)
<b>NPT3P60</b>	Nanopartícula triangular de 3 pontas ( $W_T = 60$ nm)
<b>NPT3P75</b>	Nanopartícula triangular de 3 pontas ( $W_T = 75$ nm)
<b>NPT3P90</b>	Nanopartícula triangular de 3 pontas ( $W_T = 90$ nm)
<b>NPT3P105</b>	Nanopartícula triangular de 3 pontas ( $W_T = 105$ nm)
<b>NPT138</b>	Nanopartícula triangular de 3 pontas ( $W = 138$ nm)
<b>NBTE</b>	Nanoantena <i>bowtie</i> triangular equilátera
<b>NBTC</b>	Nanoantena <i>bowtie</i> triangular côncava
<b>NBTLE</b>	Nanoantena <i>bowtie</i> triangular equilátera de lado encurvado
<b>NBT3PLE</b>	Nanoantena <i>bowtie</i> triangular de 3 pontas e lado encurvado
<b>NBT3P60LE</b>	Nanoantena <i>bowtie</i> de 3 pontas, lado encurvado ( $W_T = 60$ nm)
<b>NBT3P75LE</b>	Nanoantena <i>bowtie</i> de 3 pontas, lado encurvado ( $W_T = 75$ nm)
<b>NBT3P90LE</b>	Nanoantena <i>bowtie</i> de 3 pontas, lado encurvado ( $W_T = 90$ nm)
<b>NBT3P105LE</b>	Nanoantena <i>bowtie</i> de 3 pontas, lado encurvado ( $W_T = 105$ nm)
<b>SCS</b>	Seção reta de espalhamento

## RESUMO

Este trabalho apresenta uma análise comparativa das propriedades ressonantes de nanopartículas e de nanoantenas *bowtie* de ouro com novas geometrias triangulares. As geometrias propostas são as seguintes: geometrias triangulares com lados encurvados e geometrias triangulares com um dos seus vértices formado por três pontas. As propriedades investigadas são as respostas ressonantes, as distribuições espaciais do campo elétrico próximo e os comprimentos de onda ressonantes. A densidade de corrente dentro das nanoestruturas também é analisada para melhor entendimento do realce do campo elétrico próximo. Para o caso das nanoantenas *bowtie*, a pesquisa também é focada no estudo da influência de um substrato de dióxido de silício nas suas propriedades ressonantes e no estudo das suas características na região de campo distante (seção reta de espalhamento e diagrama de radiação).

Os resultados numéricos são obtidos nas regiões do visível e do infravermelho próximo do espectro eletromagnético, simulados pela técnica de integração finita. Para as nanopartículas isoladas, esses resultados mostram que as geometrias sugeridas possuem intensidade de campo elétrico próximo em torno de 160% mais alta e comprimento de onda ressonante 15% deslocado para o vermelho, comparadas com a geometria triangular equilátera. Já no caso das nanoantenas *bowtie*, as novas geometrias possuem intensidade de campo elétrico próximo em torno de 90% mais alta e comprimento de onda ressonante 15% deslocado para o azul, comparadas com a nanoantena *bowtie* triangular equilátera.

Os resultados deste trabalho podem servir para modelagem, fabricação e projeto de nanopartículas e de nanoantenas *bowtie* de ouro para diferentes aplicações, tais como microscopia e sensores de fibra óptica.

**Palavras-chave:** Nanoplasmônica, nanopartículas de ouro, nanoantenas *bowtie* de ouro, campo elétrico próximo, comprimento de onda ressonante, diagramas de campo distante.

## ABSTRACT

This work presents a comparative analysis of the resonant properties of gold nanoparticles and gold bowtie nanoantennas with new triangular geometries. The proposed geometries are as follows: the curved side triangular ones and the triangular geometries with one corner formed by three tips. The investigated properties are the resonant responses, the spatial distributions of the electric near-field and the resonant wavelengths. The current density inside the nanostructures is also analysed for better understanding of the electric near-field enhancement. For the case of *bowtie* nanoantennas, the research is also focused on the study of the influence of a silicon dioxide substrate on their resonant properties and on the study of their characteristics in the far-field region (scattering cross section and radiation pattern).

The numerical results are obtained in the visible and near infrared regions of the electromagnetic spectrum, simulated by the finite integration technique. For isolated nanoparticles, these results show that the suggested geometries have electric near-field intensity around 160% higher and resonant wavelength redshifted by 15%, as compared to the equilateral triangular geometry. In the case of *bowtie* nanoantennas, the new geometries have electric near-field intensity 90% higher and resonant wavelength blueshifted by 15%, as compared to the triangular equilateral *bowtie* nanoantenna.

The results of this work can serve for modeling, fabrication and designing of gold nanoparticles and gold *bowtie* nanoantennas for different applications, for example, microscopy and optical fibre sensors.

**Keywords:** Nanoplasmonics, gold nanoparticles, gold *bowtie* nanoantennas, electric near-field, resonant wavelength, far-field diagrams.

## CAPÍTULO 1

### INTRODUÇÃO

#### 1.1 Conteúdo do Capítulo

Este Capítulo tem como objetivo introduzir o tema nanoplasmônica, enfatizando sua importância e suas principais aplicações. Também visa apresentar os objetivos do trabalho e como o mesmo foi organizado. Uma discussão mais aprofundada da base teórica e o estado da arte são apresentados no Capítulo 2.

#### 1.2 Introdução Geral

O espalhamento de ondas eletromagnéticas em elementos metálicos nas frequências ópticas produz oscilações dos elétrons (plasmon-polárítos) na superfície do metal (ressonâncias plasmônicas de superfície), as quais geram campo próximo fortemente realçado. Estas oscilações possuem diferentes frequências ressonantes, as quais dependem tanto das propriedades elétricas, dimensões e geometria do metal, quanto do ângulo e polarização da onda eletromagnética incidente [1]. A resposta óptica das nanoestruturas metálicas é estudada por uma área científica conhecida como nanoplasmônica [2], que tem crescido rapidamente devido às suas possíveis aplicações, tais como microscópios ultrasensíveis, *chips* de computador super-rápidos, dispositivos a *laser*, espectroscopia, aplicações na medicina para tratamento de câncer [3] e nanoantenas [4].

As nanoantenas, assim como nanopartículas isoladas, são nanoestruturas metálicas usadas para transmitir, receber, confinar e realçar campos eletromagnéticos ópticos, portanto elas são úteis em diversas aplicações, tais como a espectroscopia não linear, os dispositivos fotônicos, a obtenção de energia solar, os sensores biológicos e químicos, a manipulação de campo próximo e os sensores de fibra óptica [5], [6]. O avanço das tecnologias de fabricação em nanoescala, tais como a litografia por feixe de elétrons [7], a estampagem eletroquímica no estado sólido [8] e a evolução da computação de alto desempenho têm permitido o desenvolvimento de diversos tipos de nanoantenas, tais como as nanoantenas monopolo [9], dipolo [10] e *bowtie* [11], assim como as nano-aberturas *bowtie* [12].

Para entender o comportamento eletromagnético das nanopartículas e, conseqüentemente, das nanoantenas, é importante investigar os efeitos de diferentes geometrias na sua resposta óptica. Algumas geometrias já têm sido analisadas, tais como as nanopartículas esférica, circular e triangular equilátera [13], e uma

nanopartícula cônica com a ponta modificada [14].

Para avaliar o desempenho de nanopartículas na faixa óptica, diversos métodos numéricos eletromagnéticos têm sido utilizados, tais como o método dos momentos (MoM) [13], o método das diferenças finitas no domínio do tempo (FDTD) [15] e a técnica de integração finita (FI) [16]. Neste trabalho foi utilizado o *software* CST MWS® [17], baseado na técnica FI, para analisar as propriedades ressonantes de nanopartículas (NPOs) e de nanoantenas *bowtie* de ouro (NBOs) com novas geometrias triangulares. A fim de descrever a permissividade complexa do ouro  $\varepsilon = \varepsilon_0 \varepsilon_r$ , o modelo de Lorentz-Drude com um termo de interbanda foi aplicado para definir a permissividade relativa  $\varepsilon_r$  [2].

### 1.3 Objetivos do Trabalho

Considerando a relevância do estudo da nanoplasmonica no contexto apresentado na Seção 1.2, os objetivos deste trabalho são:

- Analisar comparativamente as propriedades ressonantes de nanopartículas e de nanoantenas *bowtie* de ouro com novas geometrias triangulares, de acordo com a variação dos seus parâmetros. Tais propriedades são as respostas ressonantes, as distribuições espaciais do campo elétrico próximo e os comprimentos de onda ressonantes;
- Analisar a densidade de corrente dentro das nanoestruturas que apresentaram campo elétrico próximo mais realçado;
- Analisar comparativamente a influência de um substrato de dióxido de silício ( $\text{SiO}_2$ ) nas propriedades ressonantes das novas nanoantenas *bowtie*, assim como também analisar suas características na região de campo distante (seção reta de espalhamento e diagrama de radiação);
- Comparar os resultados obtidos para as novas geometrias triangulares com os resultados obtidos para a geometria triangular equilátera (convencional), a fim de validar a relevância do trabalho e propor atividades para trabalhos futuros.

### 1.4 Organização do Trabalho

Este é o primeiro dos cinco capítulos deste trabalho, os quais estão estruturados e organizados da seguinte forma:

- O Capítulo 2 trata dos conceitos básicos da nanoplasmonica, apresenta uma visão geral das nanoestruturas metálicas (nanopartículas de ouro e nanoantenas

*bowtie*), algumas de suas aplicações e os trabalhos relacionados com esta pesquisa, encontrados na literatura (estado da arte);

- O Capítulo 3 apresenta as nanopartículas de ouro modeladas com as novas geometrias triangulares e os principais resultados numéricos alcançados;
- O Capítulo 4 apresenta as nanoantenas *bowtie* de ouro modeladas com as novas geometrias triangulares e os principais resultados numéricos alcançados;
- O Capítulo 5 apresenta as considerações finais do trabalho, as atividades propostas para trabalhos futuros e as publicações obtidas no decorrer desta pesquisa.

## 1.5 Referências

- [1] M. L. Brongersma and P. G. Kik, *Surface Plasmon Nanophotonics*.: Springer Series in Optical Sciences, 2007.
- [2] L. Novotny and B. Hecht, *Principles of Nano-Optics*.: Cambridge University Press, 2006.
- [3] J. Xing et al., "Gold-Based Nanoparticles for Breast Cancer Diagnosis and Treatment," in *IEEE International Symposium on Circuits and Systems, ISCAS*, New Orleans, LA, USA, 2007, pp. 2882-2885.
- [4] S. A. Maier, "Plasmonic Nanoantennas: New design principles and new applications," in *The 2nd International Conference on Frontiers of Plasmonics*, Chengdu, Sichuan, China, 2012, p. 36.
- [5] E. Cubukcu et al., "Plasmonic Laser Antennas and Related Devices," *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics*, vol. 14, no. 6, pp. 1448-1461, Nov./Dec. 2008.
- [6] D. W. Pohl, *Optical Antennas*.: Forthcoming Publications: Science, PRL.
- [7] R. G. Hobbs et al., "Resist–substrate interface tailoring for generating high-density arrays of Ge and Bi<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> nanowires by electron beam lithography," *Journal of Vacuum Science & Technology B: Microelectronics and Nanometer Structures*, vol. 30, no. 4, pp. 041602 - 041602-7, Jul. 2012.
- [8] K. Hsu, P. Schultz, P. Ferreira, and N. Fang, "Solid-state electrochemical stamping of functional metallic nanostructures," in *7th IEEE Conference on Nanotechnology, IEEE-NANO*, Hong Kong, China, 2007, pp. 162-165.
- [9] T. H. Taminiau, R. J. Moerland, F. B. Segerink, L. Kuipers, and N. F. van Hulst, " $\lambda/4$  Resonance of an Optical Monopole Antenna Probed by Single Molecule Fluorescence," *Nano Letters*, vol. 7, no. 1, pp. 28-33, Jan. 2007.
- [10] B. Hecht et al., "Prospects of Resonant Optical Antennas for Nano-Analysis," *CHIMIA International Journal for Chemistry*, vol. 60, no. 11, pp. 765-769, 2006.
- [11] R. D. Grober, R. J. Schoelkopf, and D. E. Prober, "Optical antenna: towards a unity

- efficiency near-field optical probe," *Applied Physics Letters*, vol. 70, no. 11, pp. 1354-1356, Mar. 1997.
- [12] M. Mivelle et al., "Bowtie nano-aperture as interface between near-fields and a single-mode fiber," *Optics Express*, vol. 18, no. 15, pp. 15964-15974, Jul. 2010.
- [13] K. Q. da Costa and V. Dmitriev, "Comparative Analysis of Circular and Triangular Gold Nanodisks for Field Enhancement Applications," *Journal of Microwave and Optoelectronics Applications*, vol. 9, no. 2, pp. 123-130, Dec. 2010.
- [14] A. García-Etxarri, M. Käll, P. Apell, and J. Aizpurua, "Optical cascade effect for huge tip field-enhanced through plasmonic intracoupling," in *11th International Conference on Near-Field Optics*, Beijing, China, 2010, p. 80.
- [15] J. T. Krug, E. J. Sánchez, and X. S. Xie, "Design of near-field optical probes with optimal field enhancement by finite difference time domain electromagnetic simulation," *Journal of Chemical Physics*, vol. 116, no. 24, pp. 10895-10901, Jun. 2002.
- [16] T. Weiland, "A discretization model for the solution of Maxwell's equations for six-component fields," *Archiv fuer Elektronik und Uebertragungstechnik*, vol. 31, pp. 116-120, Mar. 1977.
- [17] (2012) CST MWS®. [Online]. <http://www.cst.com/>



## **CAPÍTULO 2**

### **NANOPLASMÔNICA E NANOESTRUTURAS METÁLICAS**

#### **2.1 Conteúdo do Capítulo**

Este Capítulo trata dos conceitos básicos da nanoplasmônica, apresenta uma visão geral das nanoestruturas metálica, algumas de suas aplicações e os trabalhos relacionados com esta pesquisa, encontrados na literatura (estado da arte).

#### **2.2 Nanopartículas Metálicas**

Como foi mencionado no Capítulo 1, nanoplasmônica é a área científica responsável pelo estudo da resposta óptica de nanoestruturas metálicas [1]. A composição metálica dessas nanoestruturas produz mudanças significativas nas suas propriedades ópticas, tornando-as dependentes do seu tamanho e da sua geometria [1]. Alguns metais têm sido utilizados na composição das nanopartículas, como por exemplo, o cobre, a prata e o ouro. Estudos sobre as propriedades ópticas desses metais já foram realizados [2], [3].

As nanopartículas de ouro são muito utilizadas como colorantes em vitrais, em cerâmica e esmalte de cerâmica [4]. Durante muito tempo não se tinha conhecimento dos mecanismos básicos que dão origem à grande variedade de cores das nanopartículas metálicas [4]. Muitos efeitos de espalhamento e mudanças de cores foram explicados por Maxwell–Garnett, em 1904 e 1906 [5], [6]. Pouco tempo depois, em 1908, Mie explicou quantitativamente as propriedades ópticas de esferas metálicas [7], ou seja, solucionou analiticamente as equações de Maxwell para a dispersão de radiação eletromagnética por partículas esféricas.

No início do século XX havia pouco interesse em entender como a geometria de pequenas partículas poderia influenciar nas suas propriedades ressonantes, pelo fato de, na época, ainda não existir métodos químicos ou físicos capazes de manipular tal geometria. Depois de uma década, as nanopartículas metálicas anisotrópicas foram descobertas e suas propriedades ópticas foram interpretadas de acordo com a teoria de Gans [8], que é uma extensão da teoria de Mie para partículas esféricas achatadas.

##### **2.2.1 Ressonância Plasmônica de Superfície**

Os metais são bons condutores, uma vez que os seus elétrons não estão ligados a átomos individuais. Em vez disso, eles formam uma “nuvem” em torno dos núcleos atômicos. Essa nuvem de elétrons movimenta-se, permitindo que o metal transporte cargas (elétrons) com facilidade, como mostrado na Fig. 2.1 [9].

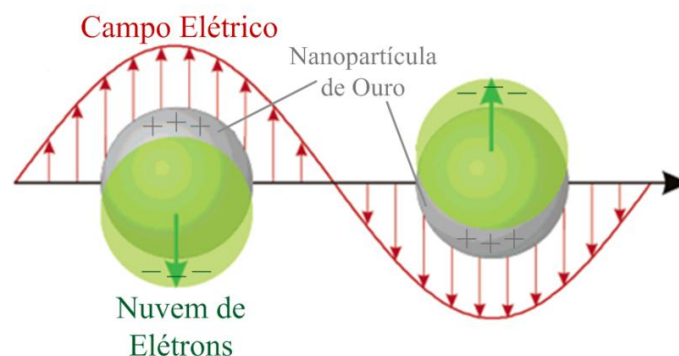


Figura 2.1. Ressonância plasmônica de superfície.

Quando um metal absorve luz em frequências ópticas, a nuvem de elétrons na superfície do metal vibra e dissipa energia. Essa vibração é chamada de plasmon-polárítons de superfície. Esse fenômeno é conhecido como ressonância plasmônica de superfície [9].

No caso do ouro, ele é um metal muito interessante devido às suas propriedades ópticas e elétricas por diversas razões [4], [9]. Primeiro, ele é quimicamente inerte e não oxida. Segundo, ele apresenta ressonância plasmônica na região visível do espectro eletromagnético, enquanto que na maioria dos outros metais, essa ressonância acontece na região ultravioleta. Portanto, as propriedades ópticas das nanopartículas de ouro estão nas regiões do visível e do infravermelho próximo do espectro eletromagnético e são regidas pela resposta coletiva dos elétrons de condução [4]. Existem certos comprimentos de onda para metais onde os fótons não são refletidos, em vez disso são absorvidos e convertidos em ressonância plasmônica de superfície [9].

### 2.2.2 Propriedades dos Metais em Frequências Ópticas

Como já foi dito anteriormente, as propriedades ópticas das nanopartículas de ouro dependem do tamanho e da geometria das nanopartículas, assim como do ambiente que as circunda [1].

As nanopartículas de ouro são fabricadas com geometrias que produzam campo eletromagnético realçado próximo da superfície. O realce eletromagnético é derivado da excitação plasmônica presente na nanopartícula [1]. Os plasmons produzem fortes efeitos tanto na resposta de campo próximo, quanto na resposta de campo distante. As propriedades de campo próximo afetam as regiões vizinhas da nanopartícula em uma distância menor que ou da ordem do comprimento de onda da luz [4].

As soluções de eletromagnetismo clássico fornecem uma excelente descrição das propriedades ópticas das nanopartículas de ouro, com o ouro representado pela função dielétrica dependente da frequência  $\varepsilon(\omega)$  [4]. Essa constante dielétrica (permissividade

elétrica) é complexa em comprimentos de onda ópticos, ou seja,  $\varepsilon_r(\omega) = \varepsilon_{\text{Real}}(\omega) + j\varepsilon_{\text{Imag}}(\omega)$  [10].

### 2.2.3 O Modelo de Lorentz-Drude

Já foi visto que a resposta óptica dos metais é regida pelo comportamento coletivo da nuvem de elétrons livres. Os elétrons de condução do metal podem ser tratados como uma nuvem ideal, movendo-se através dos íons positivos. Para descrever a permissividade complexa do ouro  $\varepsilon = \varepsilon_0 \varepsilon_r$ , o modelo de Lorentz-Drude é aplicado com um termo de interbanda para definir a permissividade relativa  $\varepsilon_r$  da seguinte forma:

$$\varepsilon_r = \varepsilon_\infty - \frac{\omega_{p1}^2}{\omega^2 - j\Gamma\omega} + \frac{\omega_{p2}^2}{\omega_0^2 - \omega^2 + j\gamma\omega} \quad (1)$$

Para o ouro, os parâmetros desta equação são  $\varepsilon_\infty = 7$ ,  $\omega_{p1} = 13,8 \times 10^{15} \text{ s}^{-1}$ ,  $\Gamma = 1,075 \times 10^{14} \text{ s}^{-1}$ ,  $\omega_0 = 2\pi c/\lambda_0$ ,  $c = 299.79 \times 10^6 \text{ m/s}$ ,  $\lambda_0 = 450 \text{ nm}$ ,  $\omega_{p2} = 45 \times 10^{14} \text{ s}^{-1}$  e  $\gamma = 9 \times 10^{14} \text{ s}^{-1}$  [1]. Já que as propriedades ópticas das nanopartículas de ouro estão nas regiões do visível e do infravermelho próximo (400~1400 nm) do espectro eletromagnético, a análise dessas nanopartículas geralmente é feita nesta faixa de frequência. Ainda no caso do ouro, como  $\omega < \omega_{p1}$ , a parte real de  $\varepsilon_r$  é negativa, o que quer dizer que os elétrons de condução não oscilam em fase com o campo externo. Isto explica o brilho característico na superfície deste metal [11].

A Fig. 2.2 apresenta o gráfico da parte imaginária (Fig. 2.2a) e da parte real (Fig. 2.2b) da permissividade relativa  $\varepsilon_r$ , calculada para o ouro pelo modelo de Lorentz-Drude na faixa de comprimento de onda entre 400 e 1400 nm [11], comparadas com o resultado experimental apresentado em [2].

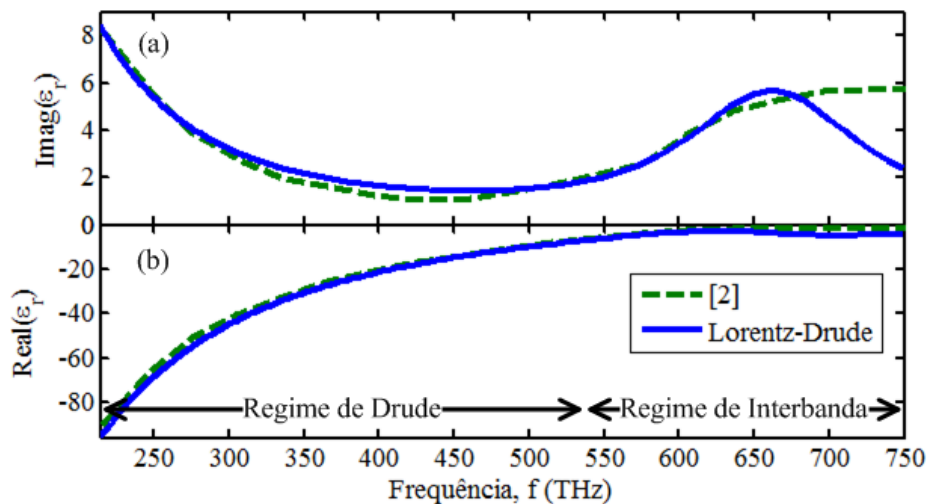


Figura 2.2. Parte imaginária (a) e parte real (b) da permissividade relativa  $\varepsilon_r$ , calculada para o ouro pelo modelo de Lorentz-Drude nas regiões do visível e do infravermelho próximo do espectro eletromagnético.

Vale lembrar que o termo de Lorentz é incluído porque, embora o termo de Drude dê resultados bastante precisos para as propriedades ópticas do ouro no regime infravermelho, ele precisa ser complementado na faixa visível pela resposta dos elétrons ligados. Para o ouro, em um comprimento de onda menor que 550 nm, a parte imaginária medida da função dielétrica aumenta mais que o previsto pela teoria de Drude [1]. O modelo de Drude não leva em conta a possibilidade de os fótons de alta energia gerar transições de interbanda. Esses fótons podem promover elétrons das bandas da camada de valência mais baixa para dentro da banda de condução de energia mais alta. Assim, tais transições podem ser descritas excitando a oscilação dos elétrons ligados. Essa liberdade adicional relacionada aos elétrons ligados pode ser descrita por osciladores harmônicos amortecidos com frequências ressonantes bem definidas  $\omega_0$ , gerando contribuições à resposta dielétrica do tipo Lorentz [11].

#### 2.2.4 Aplicações de Nanopartículas Metálicas: Estado da Arte

O avanço das pesquisas sobre nanoestruturas metálicas tem gerado grandes expectativas a respeito de suas aplicações que vão desde estruturas plasmônicas até circuitos fotônicos e comunicações ópticas [4]. Para entender o comportamento eletromagnético dessas nanoestruturas, é importante investigar os efeitos de diferentes geometrias na sua resposta óptica. Algumas geometrias já têm sido analisadas, tais como nanopartículas esférica [12], circular [13], [14], [15] e triangular [14], [15], [16], [17].

Muitos trabalhos sobre nanopartículas metálicas de diferentes geometrias podem ser encontrados na literatura. Algumas dessas geometrias são apresentadas na Fig. 2.3.

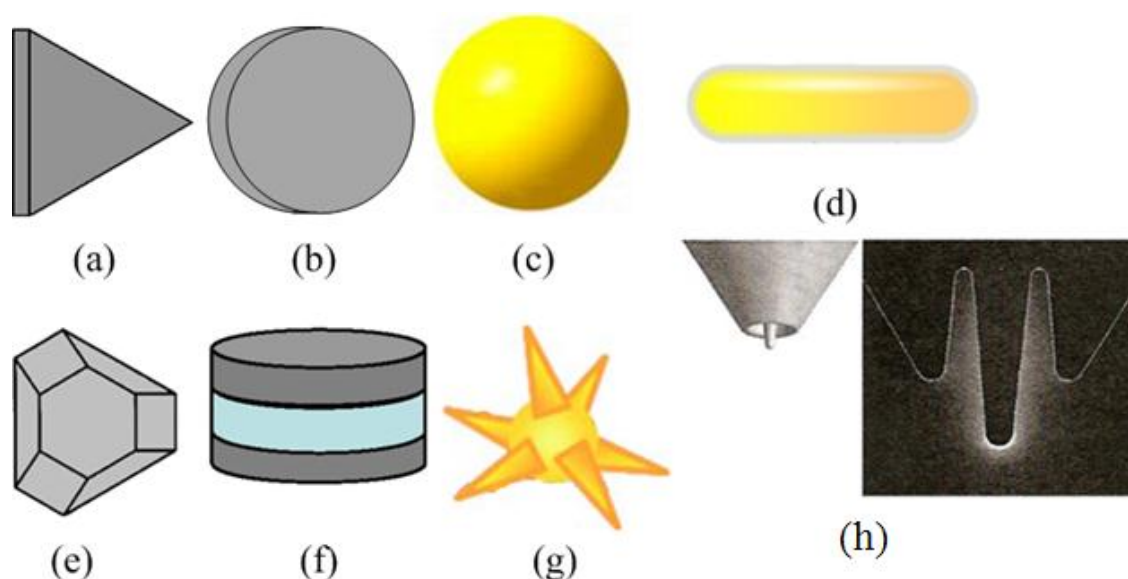


Figura 2.3. Nanopartículas metálicas de diferentes geometrias: (a) Nanodisco triangular [16], (b) Nanodisco circular [13], (c) Nanoesfera [18], (d) Nanohaste [18], (e) Tetraedro modificado [19], (f) *Nanoburger* [20], (g) Nanoestrela [21], Nanopartícula cônica com a ponta modificada [22].

Alguns desses trabalhos são descritos a seguir, separados por ano de publicação.

Em 2003, Rechberger et al. estudaram a excitação plasmônica de superfície de pares idênticos de nanopartículas de ouro circulares (Fig. 2.3b) através de espectroscopia de transmissão óptica [13].

Em 2005, Germain, Brioude, Ingerter e Pileni analisaram nanodiscos de prata em formato de tetraedro modificado (Fig. 2.3e) com dois tamanhos diferentes [19].

Em 2007, Nelayah et al. apresentaram um novo método aplicado em nanotriângulos de prata (Fig. 2.3a). Esse método se baseia na detecção de plasmons em nanopartículas de parâmetros geométricos bem-definidos [16]; Cho et al. analisaram o espalhamento eletromagnético em *nanoburgers* (Fig. 2.3f) formados por duas camadas metálicas e uma camada de dióxido de silício ( $\text{SiO}_2$ ) [20]; Winter relatou a utilização de nanopartículas de ouro como biosensores [9].

Em 2008, El-Brolossy et al. relataram as propriedades de absorção óptica de nanopartículas de ouro de diferentes geometrias e tamanhos, medidas por método fotoacústico [18]; Fischer e Martin investigaram as propriedades ópticas de nanoantenas *bowtie* e de nanoantenas dipolo plasmônico, aplicando a técnica tensorial de Green. Eles discutiram também a influência dos parâmetros geométricos no realce de campo nas nanoantenas [23]; Lee et al. estudaram os efeitos do tamanho de nanopartículas de prata em suas propriedades ópticas [24]; Llopis et al. analisaram a espectroscopia óptica de campo próximo de nanopartículas de Gálio [25].

Em 2009, Hrelescu et al. observaram o espalhamento Raman de nanoestrelas de ouro individuais (Fig. 2.3g) revestido com monocamadas de ácido 4-mercaptobenzóico [21].

Em 2010, Peng et al. investigaram respostas ópticas de arranjos de nanopartículas planas quasitriangulares [17]; Costa e Dmitriev estudaram a ressonância de nanoantenas *bowtie* modificadas [26] e também analisaram nanodiscos de ouro circular e triangular com altos realces de campo elétrico próximo [14]; Veres, Cui e Clime demonstraram a fabricação de nanoestrelas e a simulação numérica calculou alto realce de campo eletromagnético próximo das pontas dessas nanoestrelas [27]; García-Etxarri, Käll, Apell e Aizpurua estudaram o realce de campo elétrico próximo da ponta modificada de uma nanopartícula cônica (Fig. 2.3h). Essa modificação consiste em formar uma borda ao redor da ponta da nanopartícula [22].

Em 2011, Cao, Huang, Xu e Elsayed-Ali estudaram a ressonância plasmônica de superfície de nanopartículas de prata circular e triangular, utilizando microscopia de campo escuro e espectroscopia óptica [15].

Em 2012, Namin, Wang e Werner estudaram as propriedades ópticas de nanoesferas de ouro através do acoplamento entre modos fotônicos e plasmônicos [12]; Zhang, Jun, Birch e Chen demonstraram a transferência de energia entre um registro de DNA comumente usado e nanohastes de ouro. Essas nanohastes mostraram muita eficiência na transferência de energia [28].

### 2.3 Nanoantenas Metálicas

Nanoantenas, também conhecidas como antenas ópticas, são nanoestruturas metálicas usadas para transmitir, receber, confinar e realçar campos eletromagnéticos ópticos, ou seja, a luz [29]. Esta definição é similar à definição de antenas de rádio frequência (RF) e de micro-ondas. A principal diferença é que os metais que constituem as nanoantenas não podem ser considerados como condutores perfeitos, devido às suas propriedades físicas em frequências ópticas [30], como explicado na seção 2.4, por causa dos efeitos plasmônicos, já que a resposta óptica dos metais é descrita por uma função complexa  $\epsilon$  dielétrica dependente da frequência  $\epsilon_r(\omega) = \epsilon_{\text{Real}}(\omega) + j\epsilon_{\text{Imag}}(\omega)$  [31].

Ao contrário das antenas de RF, que sempre aparecem como elementos de circuitos conectados a um circuito de alimentação, as nanoantenas geralmente aparecem como estruturas isoladas. A evolução da computação de alto desempenho e o avanço das tecnologias de fabricação em nanoescala, tais como litografia por feixe de elétrons [32] e estampagem eletroquímica no estado sólido [33] têm permitido o desenvolvimento de diversos tipos de nanoantenas. As mais comuns encontradas são as nanoantenas monopolo [34], dipolo [35] e *bowtie* [36], assim como nano-aberturas *bowtie* [37]. As nanoantenas *bowtie* são descritas na próxima seção.

#### 2.3.1 Nanoantenas *Bowtie*

Nanoantenas *bowtie* são nanoantenas constituídas por dois triângulos voltados um para o outro ponta-a-ponta [11], [38], [39], como mostra a Fig. 2.4.

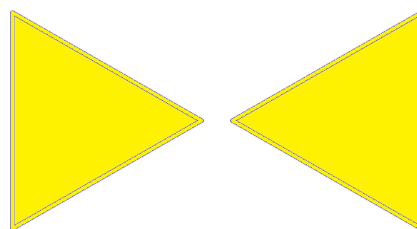


Figura 2.4. Geometria de uma nanoantena *bowtie*.

Elas são consideradas como tendo maior realce de campo no *gap*, comparadas com nanoantenas formadas por nanohaste [40]. É importante notar que, em vista de aplicações práticas, as nanoantenas geralmente são colocadas em um substrato. De acordo com a teoria de antenas ópticas, sabe-se que o índice de refração do substrato age como uma impedância parasita, deslocando a frequência de ressonância para o vermelho (*redshift*) [41]. Portanto, é importante também analisar o efeito de substratos nas propriedades ópticas de nanoantenas *bowtie*.

### 2.3.2 Aplicações de Nanoantenas *Bowtie*: Estado da Arte

Nanoantenas são úteis em diversas aplicações, tais como a espectroscopia não linear, os dispositivos fotônicos, a obtenção de energia solar, os sensores biológicos e químicos, a manipulação de campo próximo e os sensores de fibra óptica [29].

Dentro da área de sensores ópticos, vários trabalhos abordando a utilização de nanoantenas *bowtie* têm sido publicados. Em [42], uma simples molécula fluorescente foi usada como sonda de realces de brilho fluorescente, atuando como sensor óptico do campo elétrico no *gap* de uma nanoantena *bowtie* de ouro. Foi visto que a nanoantena *bowtie* com o menor *gap* gera os mais altos valores de realces de brilho fluorescente, isto é, dez vezes mais alto que o relatado anteriormente em [43]. Em [37], investigou-se uma nano-abertura *bowtie* de *gap* único, colocada na extremidade de uma longa fibra óptica. Esta combinação cria uma sonda de nanoantena-simples altamente eficiente, a qual é usada como um nanocoletor de campo elétrico para microscopia óptica de campo próximo de varredura, pois ele atua como uma nanofonte que realça a intensidade da luz por centenas de vezes e confina a energia em alguns nanômetros cúbicos. Em [44], investigou-se a natureza de deslocamentos espectrais em sensoriamento de hidrogênio realçado com uma geometria que consiste de uma nanoantena triangular próxima a um nanodisco de paládio. A ressonância da nanoantena, neste caso, desloca-se para o vermelho. Adicionando outra nanoantena triangular na geometria atual, forma-se uma nanoantena *bowtie* e isso faz a sensibilidade duplicar o seu valor.

## 2.4 Referências

- [1] L. Novotny and B. Hecht, *Principles of Nano-Optics*.: Cambridge University Press, 2006.
- [2] P. B. Johnson and R. W. Christy, "Optical Constants of the Noble Metals," *Physical Review B*, vol. 6, no. 12, pp. 4370–4379, Dec. 1972.
- [3] A. L. González, J. A. Reyes-Esqueda, and C. Noguez, "Optical Properties of

- Elongated Noble Metal Nanoparticles," *Journal of Physical Chemistry C*, vol. 112, no. 19, pp. 7356–7362, Apr. 2008.
- [4] V. Myroshnychenko et al., "Modelling the optical response of gold nanoparticle," *Chemical Society Reviews*, vol. 37, no. 9, pp. 1792–1805, Jul. 2008.
- [5] J. C. Maxwell–Garnett, "Colours in metal glasses and in metallic films," *Philosophical Transactions of the Royal Society of London A*, vol. 203, pp. 385–420, 1904.
- [6] J. C. Maxwell–Garnett, "Colours in metal glasses, in metallic films, and in metallic solutions. II," *Philosophical Transactions of the Royal Society of London A*, vol. 205, pp. 237–288, 1906.
- [7] G. Mie, "Beiträge zur Optik trüber Medien speziell kolloidaler Metallösungen," *Annals of Physics*, vol. 330, no. 3, pp. 377–445, 1908.
- [8] R. Gans, "Über die Form ultramikroskopischer Goldteilchen," *Annals of Physics*, vol. 342, no. 5, pp. 881–900, 1912.
- [9] J. Winter, "Gold nanoparticles biosensors," The Ohio State University, Nanoscale Science and Engineering Center, Rev. 3, 2007.
- [10] M. L. Brongersma and P. G. Kik, *Surface Plasmon Nanophotonics*.: Springer Series in Optical Sciences, 2007.
- [11] P. Biagioni, J.-S. Huang, and B. Hecht, "Nanoantennas for visible and infrared radiation," *Reports on Progress in Physics*, vol. 75, pp. 1–40, 2012.
- [12] F. Namin, X. Wang, and D. H. Werner, "Wideband absorbers in the visible spectrum based on optimizing quasicrystal nanosphere arrays," in *IEEE Antennas and Propagation Society International Symposium, APSURSI*, Chicago, IL, USA, 2012, pp. 1–2.
- [13] W. Rechberger et al., "Optical properties of two interacting gold nanoparticles," *Optics Communications*, vol. 220, no. 1–3, pp. 137–141, Mar. 2003.
- [14] K. Q. da Costa and V. Dmitriev, "Comparative Analysis of Circular and Triangular Gold Nanodisks for Field Enhancement Applications," *Journal of Microwave and Optoelectronics Applications*, vol. 9, no. 2, pp. 123–130, Dec. 2010.
- [15] W. Cao, T. Huang, X.-H. N. Xu, and H. E. Elsayed-Ali, "Localized surface plasmon resonance of single silver nanoparticles studied by dark-field optical microscopy and spectroscopy," *Journal of Applied Physics*, vol. 109, no. 3, pp. 034310 - 034310-6, Feb. 2011.
- [16] J. Nelayah et al., "Mapping surface plasmons on a single metallic nanoparticle," *Nature Physics*, vol. 3, pp. 348 - 353, Apr. 2007.
- [17] Y. Peng et al., "Plasmonics of thin film quasitriangular nanoparticles," *Applied Physics Letters*, vol. 96, no. 13, pp. 133104–133107, Mar. 2010.
- [18] T.A. El-Brolosy et al., "Shape and size dependence of the surface plasmon resonance of gold nanoparticles studied by photoacoustic technique," *The European Physical Journal Special Topics*, vol. 153, no. 1, pp. 361–364, 2008.



- [19] V. Germain, A. Brioude, D. Ingert, and M. P. Pileni, "Silver nanodisks: size selection via centrifugation process and optical properties," *The Journal of Chemical Physics*, vol. 122, no. 12, pp. 124707-124715, Mar. 2005.
- [20] D. Cho et al., "Plasmon resonances of strongly coupled nanodisks," in *International Nano-Optoelectronics Workshop, i-NOW*, Beijing and Lanzhou, China, 2007, pp. 88-89.
- [21] C. Hrelescu, T. K. Sau, A. L. Rogach, F. Jäckel, and J. Feldmann, "Single gold nanostars enhance Raman scattering," *Applied Physics Letters*, vol. 94, no. 15, pp. 153113-153116, Apr. 2009.
- [22] A. García-Etxarri, M. Käll, P. Apell, and J. Aizpurua, "Optical cascade effect for huge tip field-enhanced through plasmonic intracoupling," in *11th International Conference on Near-Field Optics*, Beijing, China, 2010, p. 80.
- [23] H. Fischer and Olivier J. F. Martin, "Engineering the optical response of plasmonic nanoantennas," *Optics Express*, vol. 16, no. 12, pp. 9144-9154, 2008.
- [24] K. C. Lee, S. J. Lin, C. H. Lin, C.S. Tsai, and Y. J. Lu, "Size effect of Ag nanoparticles on surface plasmon resonance," *Surface and Coatings Technology*, vol. 202, no. 22-23, pp. 5339-5342, Aug. 2008.
- [25] A. Llopis et al., "Near-field optical spectroscopy of Ga nanoparticles for plasmonics," in *Conference on Lasers and Electro-Optics, CLEO/Conference on Quantum Electronics and Laser Science, QELS*, San Jose, CA, USA, 2008, pp. 1-2.
- [26] K. Q. da Costa and V. Dmitriev, "Resonances of Modified Bowtie Nanoparticles with Higher Field Enhancements," in *International Telecommunications Symposium, ITS*, Manaus, AM, Brasil, 2010.
- [27] T. Veres, B. Cui, and L. Clime, "Fabrication of nanostar arrays by nanoimprint lithography," *Journal of Vacuum Science & Technology B: Microelectronics and Nanometer Structures*, vol. 28, no. 6, pp. C6O26-C6O29, Nov. 2010.
- [28] Y. Zhang, Y. Jun, D. J. S. Birch, and Y. Chen, "Two-photon luminescence and energy transfer of gold nanorods for cell imaging," in *12th IEEE Conference on Nanotechnology, IEEE-NANO*, Birmingham, UK, 2012, pp. 1-5.
- [29] D. W. Pohl, *Optical Antennas*.: Forthcoming Publications: Science, PRL.
- [30] S. A. Maier, "Plasmonic Nanoantennas: New design principles and new applications," in *The 2nd International Conference on Frontiers of Plasmonics*, Chengdu, Sichuan, China, 2012, p. 36.
- [31] J. D. Jackson, *Classical Electrodynamics*, 3rd ed. New York, USA: Wiley, 1998.
- [32] R. G. Hobbs et al., "Resist-substrate interface tailoring for generating high-density arrays of Ge and Bi<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> nanowires by electron beam lithography," *Journal of Vacuum Science & Technology B: Microelectronics and Nanometer Structures*, vol. 30, no. 4, pp. 041602 - 041602-7, Jul. 2012.
- [33] K. Hsu, P. Schultz, P. Ferreira, and N. Fang, "Solid-state electrochemical stamping of functional metallic nanostructures," in *7th IEEE Conference on Nanotechnology, IEEE-NANO*, Hong Kong, China, 2007, pp. 162-165.

- [34] T. H. Taminiau, R. J. Moerland, F. B. Segerink, L. Kuipers, and N. F. van Hulst, " $\lambda/4$  Resonance of an Optical Monopole Antenna Probed by Single Molecule Fluorescence," *Nano Letters*, vol. 7, no. 1, pp. 28-33, Jan. 2007.
- [35] B. Hecht et al., "Prospects of Resonant Optical Antennas for Nano-Analysis," *CHIMIA International Journal for Chemistry*, vol. 60, no. 11, pp. 765-769, 2006.
- [36] R. D. Grober, R. J. Schoelkopf, and D. E. Prober, "Optical antenna: towards a unity efficiency near-field optical probe," *Applied Physics Letters*, vol. 70, no. 11, pp. 1354-1356, Mar. 1997.
- [37] M. Mivelle et al., "Bowtie nano-aperture as interface between near-fields and a single-mode fiber," *Optics Express*, vol. 18, no. 15, pp. 15964-15974, Jul. 2010.
- [38] P. J. Schuck, D. P. Fromm, A. Sundaramurthy, G. S. Kino, and W. E. Moerner, "Improving the Mismatch between Light and Nanoscale Objects with Gold Bowtie Nanoantennas," *Physical Review Letters*, vol. 94, pp. 017402-1 - 017402-4, Jan. 2005.
- [39] D. P. Fromm, A. Sundaramurthy, P. J. Schuck, G. Kino, and W. E. Moerner, "Gap-Dependent Optical Coupling of Single "Bowtie" Nanoantennas Resonant in the Visible," *Nano Letters*, vol. 4, no. 5, pp. 957-961, Mar. 2004.
- [40] E. Cubukcu et al., "Plasmonic Laser Antennas and Related Devices," *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics*, vol. 14, no. 6, pp. 1448-1461, Nov./Dec. 2008.
- [41] H. Tamaru, H. Kuwata, H. T. Miyazaki, and K. Miyano, "Resonant light scattering from individual Ag nanoparticles and particle pairs," *Applied Physics Letters*, vol. 80, no. 10, pp. 1826-1829, 2002 Jan.
- [42] A. Kinkhabwala et al., "Large single-molecule fluorescence enhancements produced by a bowtie nanoantenna," *Nature Photonics*, vol. 3, pp. 654-657, Oct. 2009.
- [43] S. Kuhn, U. Hakanson, L. Rogobete, and V. Sandoghdar, "Enhancement of single molecule fluorescence using a gold nanoparticle as an optical nanoantenna," *Physical Review Letters*, vol. 97, no. 1, pp. 017402-017406, Jul. 2006.
- [44] A. Tittl, C. Kremers, J. Dorfmueller, D. N. Chigrin, and H. Giessen, "Spectral shifts in optical nanoantenna-enhanced hydrogen sensors," *Optical Material Express*, vol. 2, no. 2, pp. 111-118, Feb. 2012.

## CAPÍTULO 3

### NANOPARTÍCULAS DE OURO COM NOVAS GEOMETRIAS TRIANGULARES E RESULTADOS NUMÉRICOS

#### 3.1 Conteúdo do Capítulo

Este Capítulo apresenta uma análise comparativa das propriedades ressonantes de nanopartículas de ouro (NPOs) com novas geometrias triangulares propostas neste trabalho. Tais propriedades são as respostas ressonantes, as distribuições espaciais do campo elétrico próximo e os comprimentos de onda ressonantes. Também foi analisada a densidade de corrente dentro das nanopartículas que apresentaram campo elétrico próximo mais realçado.

#### 3.2 Introdução

Neste trabalho foram analisados três grupos diferentes de NPOs. O primeiro grupo consiste em NPOs circular, triangular equilátero, triangulares convexas e triangulares côncavas. O segundo grupo consiste em NPOs triangulares com um de seus vértices formado por três pontas e com um de seus lados encurvados, e o terceiro grupo consiste nas NPOs do segundo grupo com todos os seus lados retos.

Todas as NPOs apresentadas neste trabalho são iluminadas por uma onda plana polarizada em  $x$ , propagando-se na direção  $+z$ . Todas têm espessura  $H = 20$  nm, ao longo do eixo  $z$ , e largura  $W = 138,6$  nm, ao longo do eixo  $x$ . Todas as nanopartículas são posicionadas de tal maneira que um de seus vértices fique posicionado no eixo  $x$ . O meio circundante é o vácuo.

Para descrever a permissividade complexa do ouro  $\varepsilon = \varepsilon_0 \varepsilon_r$ , o modelo de Lorentz-Drude com um termo de interbanda foi aplicado para calcular a permissividade relativa  $\varepsilon_r$  [1], [2], tal como apresentado na seção 2.2.3 do Capítulo 2.

#### 3.3 O Software CST MICROWAVE STUDIO®

As simulações computacionais realizadas neste trabalho foram feitas através do software CST MICROWAVE STUDIO (CST MWS®) [3]. Este software é especializado em simular computacionalmente, de forma rápida e precisa, problemas eletromagnéticos em três dimensões. Todos os direitos de utilização deste software são reservados para “CST Computer Simulation Technology” [3].

O CST MWS® é baseado na técnica de Integração Finita (FI), proposta por Weiland, em 1977 [4], a qual é adaptada para cálculos de banda larga, cobrindo a faixa

óptica. A técnica FI consiste em um esquema de discretização espacial com o intuito de solucionar numericamente problemas eletromagnéticos tanto no domínio do tempo, quanto no domínio da frequência e, diferente da maioria dos métodos numéricos, sua ideia básica é aplicar as Equações de Maxwell na forma integral para um conjunto de malhas escalonadas, em vez de aplicá-las na forma diferencial [4].

Nas simulações foi utilizado o *solver* do domínio da frequência. O volume das nanopartículas foi discretizado através de uma malha tetraédrica e as condições de contorno foram definidas como abertas através da técnica PML (*Perfect Matched Layers*) convolucional [5]. As simulações foram executadas no sistema operacional *Windows 7 Ultimate*® [6], em um computador Intel Core 2 Quad de 2,67 GHz e 8 GB de RAM.

Os resultados obtidos pelo CST MWS® foram validados comparando-os com os resultados obtidos pelo método analítico de espalhamento de Mie para uma nanoesfera de ouro [7], [8]. Os três grupos de NPOs analisadas e os resultados numéricos alcançados são apresentados nas próximas seções.

### 3.4 Primeiro Grupo de Nanopartículas de Ouro Analisadas

A Fig. 3.1 mostra o primeiro grupo de NPOs analisadas neste trabalho.

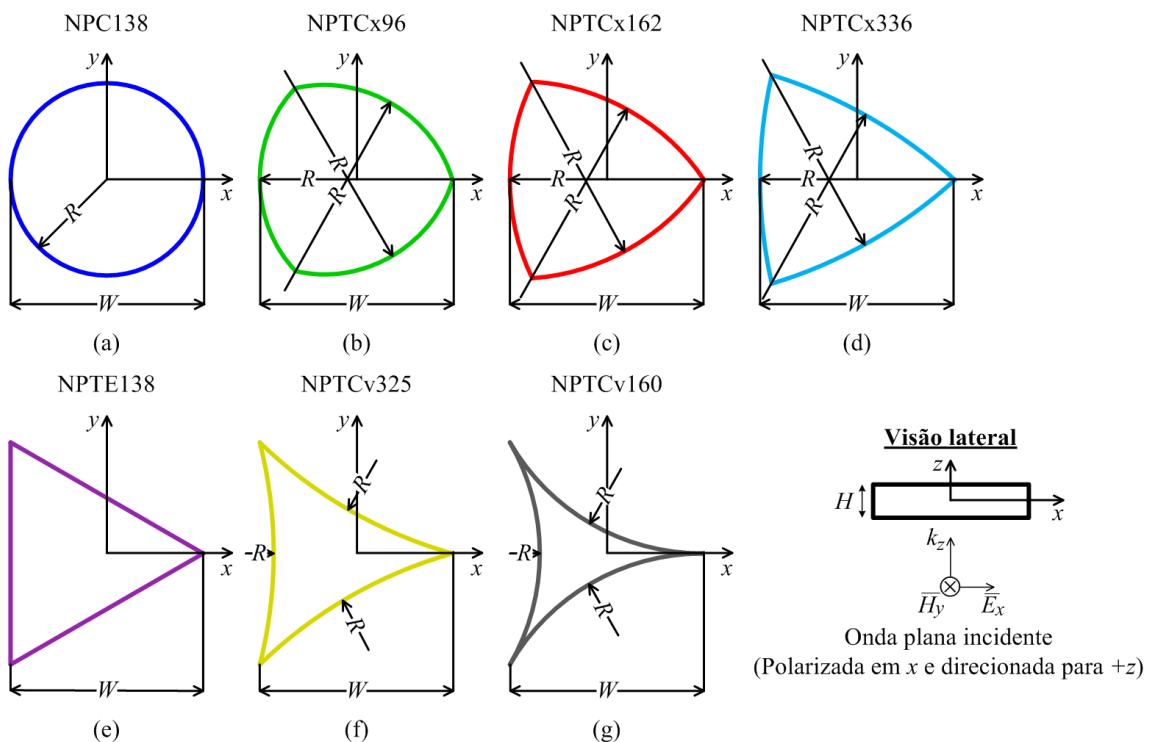


Figura 3.1. Primeiro grupo de NPOs analisadas: (a) NPC138, (b) NPTCx96, (c) NPTCx162, (d) NPTCx336, (e) NPTE138, (f) NPTCv325 e (g) NPTCv160:  $W = 138,6$  nm,  $H = 20$  nm; Para (a), (b), (c), (d), (f) e (g),  $R = 60$  nm,  $96,3$  nm,  $162,9$  nm,  $336,5$  nm,  $325$  nm e  $160$  nm, respectivamente.

A Fig. 3.1a corresponde a uma NPO circular de raio  $R = 60$  nm (NPC138). As Fig. 3.1b, Fig. 3.1c e Fig. 3.1d mostram NPOs triangulares convexas com raio de curvatura  $R$  igual a 96,3 nm (NPTCx96), 162,9 nm (NPTCx162) e 336,5 nm (NPTCx336), respectivamente. A Fig. 3.1e apresenta uma NPO triangular equilátera (NPTE138). A Fig. 3.1e e a Fig. 3.1f são NPOs triangulares côncavas com raio de curvatura  $R$  igual a 325 nm (NPTCv325) e 160 nm (NPTCv160), respectivamente.

### 3.4.1 Resultados Numéricos

#### 3.4.1.1 Respostas Ressonantes do Campo Elétrico Próximo

As respostas ressonantes do campo elétrico próximo foram calculadas em um ponto no eixo  $x$  a uma distância  $d = 5$  nm da ponta das nanopartículas, como mostra a Fig. 3.2.

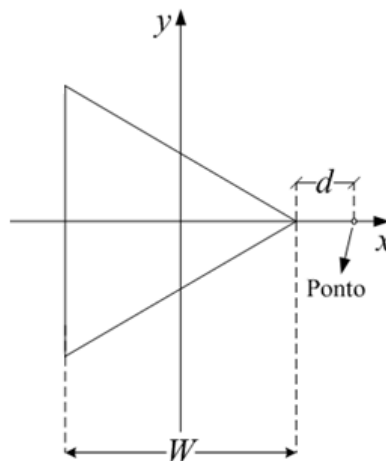


Figura. 3.2. Distância  $d$  entre a ponta de uma NPO até o ponto de observação no eixo  $x$  ( $(W/2), 0, 0$ ).

A Fig. 3.3 mostra a resposta ressonante do campo elétrico neste ponto para as NPOs mostradas na Fig. 3.1. Examinando os resultados na Fig. 3.3, é possível observar diferenças nas intensidades do campo elétrico próximo e nos comprimentos de onda ressonantes. A intensidade do campo elétrico é proporcional ao quadrado da sua amplitude, ou seja,  $|E_x|^2$ , normalizada pela intensidade do campo elétrico da onda plana incidente,  $|E_0|^2 = 1$  V/m.

Observa-se na Fig. 3.3 que quanto maior for o raio de curvatura dos lados das geometrias triangulares convexas, mais intenso será o campo elétrico próximo e maior será o comprimento de onda ressonante, devido ao fato de suas pontas se tornarem mais agudas. A NPTE138 (Fig. 3.1e) é o caso limite, já que seu raio de curvatura é infinito ( $R = \infty$ ). Por exemplo, a NPC138 (Fig. 3.1a) possui intensidade do campo elétrico próximo 90% mais baixo e comprimento de onda ressonante 12% menor que aqueles apresentados pela NPTE138 (Fig. 3.1e). Por outro lado, para o caso das geometrias triangulares côncavas, quanto menor for o raio de curvatura dos seus lados, menos

agudas serão suas pontas e menos intenso será o campo elétrico próximo a elas. A NPTCv325 (Fig. 3.1f) apresenta intensidade do campo elétrico 18% mais alto e comprimento de onda ressonante 10% maior que aqueles apresentados pela NPTE138.

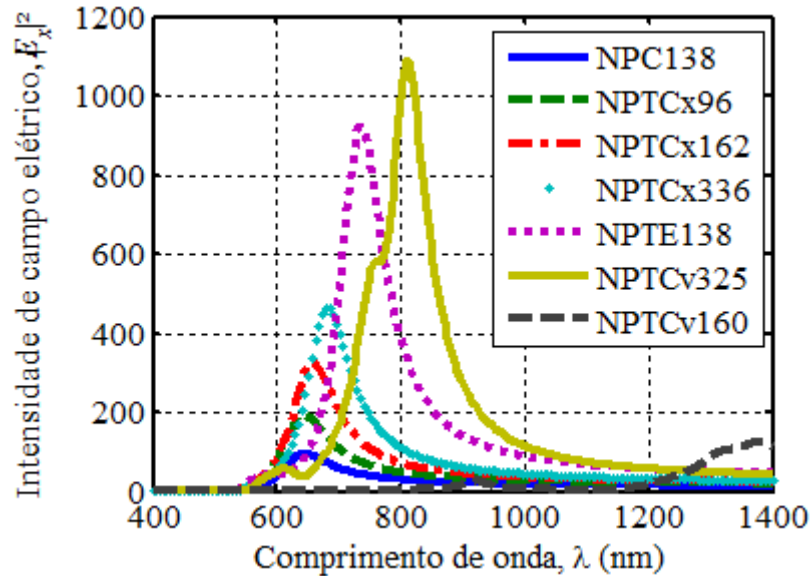


Figura 3.3. Intensidade do campo elétrico  $|E_x|^2$  no ponto  $d = 5$  nm para as NPOs ilustradas na Fig. 3.1.

Era esperado que a NPTCv160 (Fig. 3.1g) apresentasse a mais alta intensidade do campo elétrico entre todas as NPOs da Fig. 3.1, porém, dentro da faixa de comprimento de onda analisada, sua intensidade máxima de campo elétrico é 86% mais baixa que a apresentada pela NPTE138. Isso pode ser explicado por dois motivos. Primeiro, pelo fato de a ponta da NPTCv160 ser tão aguda que o campo elétrico fica tão concentrado na mesma e acaba não apresentando alta intensidade de campo elétrico no ponto de observação distante  $d = 5$  nm. Segundo, pode ser devido a uma possível instabilidade do método FI causada por problemas de singularidade provocados pela ponta muito aguda. Nestes casos, efeitos quânticos devem ser considerados na função dielétrica.

A intensidade de campo próximo também foi calculada para pontos de observação mais distantes, onde  $d = 10, 15$  e  $20$  nm, porém os valores mais intensos foram percebidos no ponto onde  $d = 5$  nm. Portanto, somente este ponto foi destacado neste trabalho. Os valores máximos da intensidade do campo elétrico  $|E_{\max}|^2$  e os comprimentos de onda ressonantes  $\lambda_{\text{res}}$  das NPOs ilustradas na Fig. 3.1 são mostrados na Tabela 3.1, enquanto que a Tabela 3.2 mostra o percentual da diferença entre esses valores em relação àqueles apresentados pela NPTE138.

Tabela 3.1. Valores máximos da intensidade do campo elétrico  $|E_{x\max}|^2$  e comprimentos de onda ressonantes  $\lambda_{\text{res}}$  para as NPOs ilustradas na Fig. 3.1

Nanopartículas	$ E_{x\max} ^2$	$\lambda_{\text{res}}$ (nm)
NPC138	96	646
NPTCx96	194	646
NPTCx162	326	657
NPTCx336	462	679
NPTE138	926	735
NPTCv325	1089	808
NPTCv160	127	1378

Tabela 3.2. Percentual da diferença entre os valores máximos da intensidade do campo elétrico e comprimentos de onda ressonantes das NPOs ilustradas na Fig. 3.1 em relação aos valores apresentados pela NPTE138 (Fig. 3.1e)

Nanopartículas	Diferença em relação a NPTE138	
	$ E_{x\max} ^2$	$\lambda_{\text{res}}$
NPC138	90% <	12% <
NPTCx96	79% <	12% <
NPTCx162	65% <	11% <
NPTCx336	50% <	8% <
NPTCv325	18% >	10% >
NPTCv160	86% <	87% >

### 3.4.1.2 Distribuições Espaciais do Campo Elétrico Próximo

Para analisar a concentração do campo elétrico nas NPOs mostradas na Fig. 3.1, a distribuição espacial no plano  $xy$  ( $z = 0$ ) do campo elétrico próximo da ponta dessas NPOs, posicionada no eixo  $x$ , é ilustrada na Fig. 3.4. É visto que essa distribuição concentra-se mais na ponta das geometrias triangulares convexas (Fig. 3.4b-d) e das geometrias triangulares côncavas (Fig. 3.4f-g), comparadas com a NPC138 (Fig. 3.4a), que possui campo elétrico distribuído simetricamente em ambos os lados.

Também foram analisadas as distribuições espaciais no plano  $yz$  ( $x = 74,3$  nm) e no plano  $xz$  ( $y = 0$ ), do campo elétrico próximo da ponta da NPTE138 e da NPTCv325, posicionada no eixo  $x$ , ilustradas na Fig. 3.5 e na Fig. 3.6, respectivamente. É visto na Fig. 3.5 que a NPTE138 (Fig. 3.5a) e a NPTCv325 (Fig. 3.5b) possuem campo elétrico uniformemente distribuído próximo desta ponta. Já na Fig. 3.6, observa-se que a NPTE138 (Fig. 3.6a) e a NPTCv325 (Fig. 3.6b) possuem campo elétrico mais concentrado nos vértices da ponta posicionada no eixo  $x$ , sendo mais confinado no caso da NPTCv325.

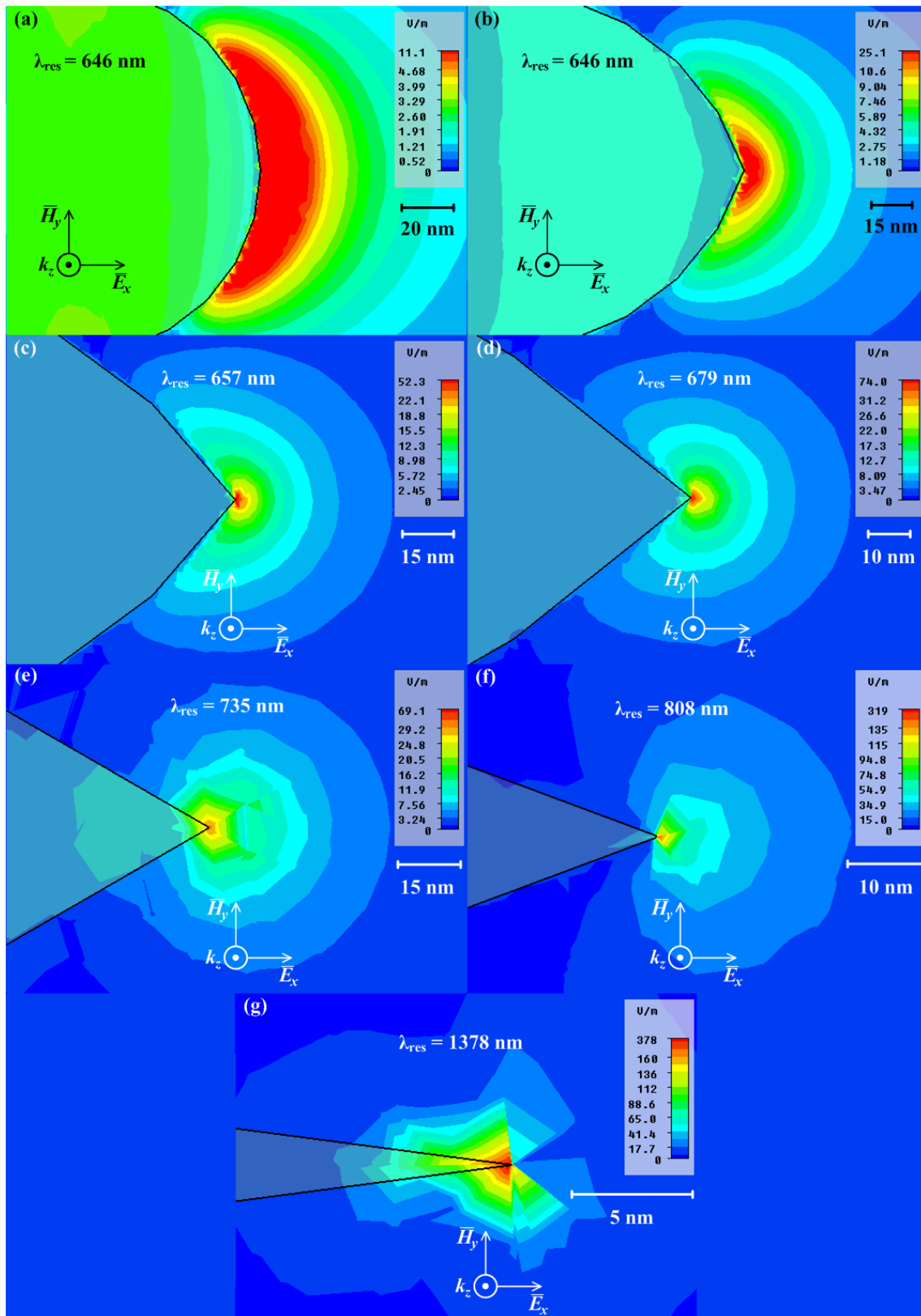


Figura 3.4. Distribuição espacial do campo elétrico  $|E_x|$  no plano  $xy$  ( $z=0$ ) para (a) NPC138, (b) NPTCx96, (c) NPTCx162, (d) NPTCx336, (e) NPTE138, (f) NPTCv325 e (g) NPTCv160.



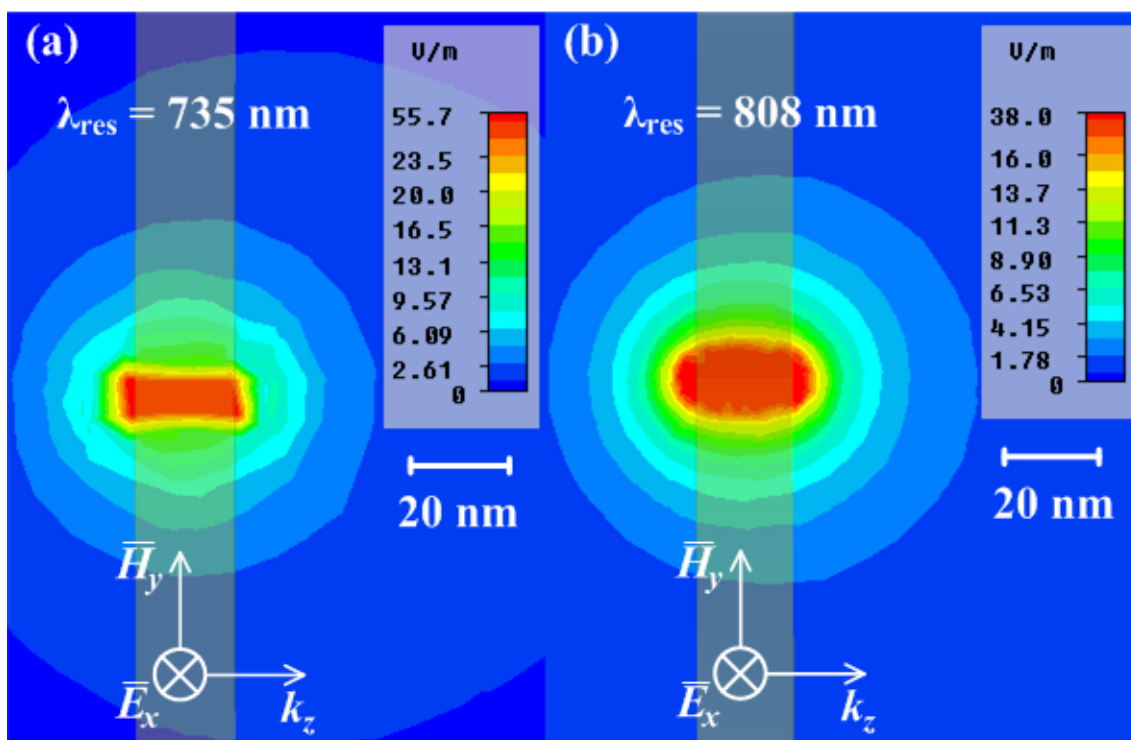


Figura 3.5. Distribuição espacial do campo elétrico  $|E_x|$  no plano  $yz$  ( $x = 74,3$  nm) para (a) NPTE138 e (b) NPTCv325.

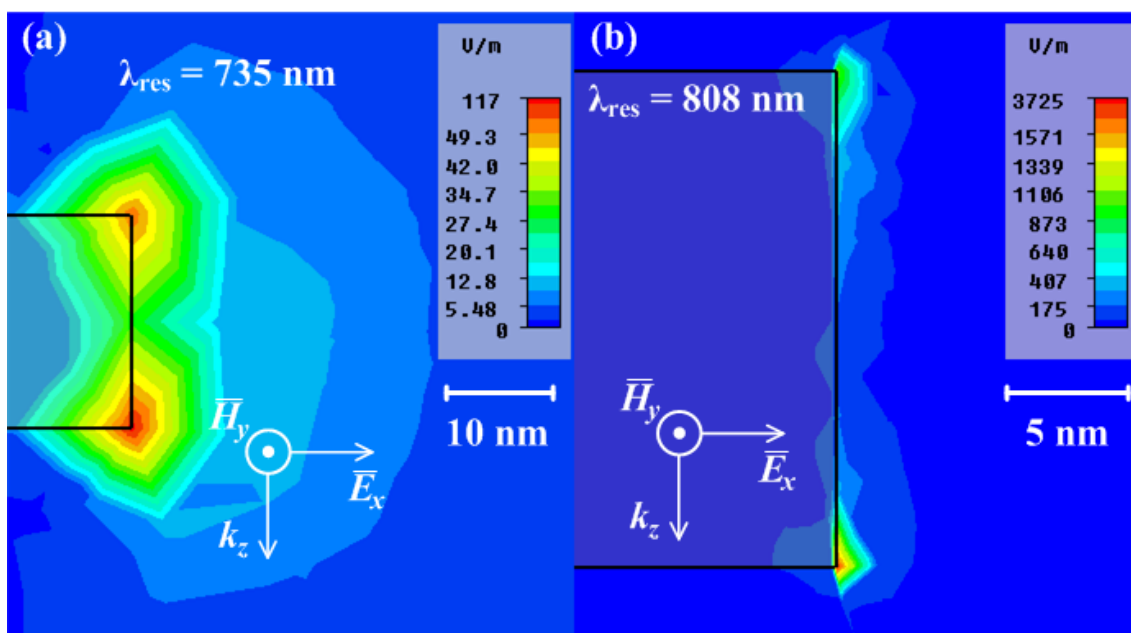


Figura 3.6. Distribuição espacial do campo elétrico  $|E_x|$  no plano  $xz$  ( $y = 0$ ) para (a) NPTE138 e (b) NPTCv325.

### 3.4.1.3 Densidade de Corrente

Para um entendimento mais completo do comportamento ressonante da NBTE138 e da NBTCv325, analisou-se também a densidade de corrente dentro dessas duas NPOs no plano  $xy$  ( $z = 0$ ). As setas da densidade de corrente são ilustradas nas Fig. 3.7. A fase

considerada da oscilação da onda plana corresponde ao valor máximo atingido pelo campo elétrico.

Para as duas NPOs, NBTE138 (Fig. 3.7a) e NPTCv325 (Fig. 3.7c), é possível observar que as setas da densidade de corrente têm sentido da direita para a esquerda, como pode ser visto no *zoom* da ponta das NPOs ilustrado na Fig 3.7b e na Fig. 3.7 d.

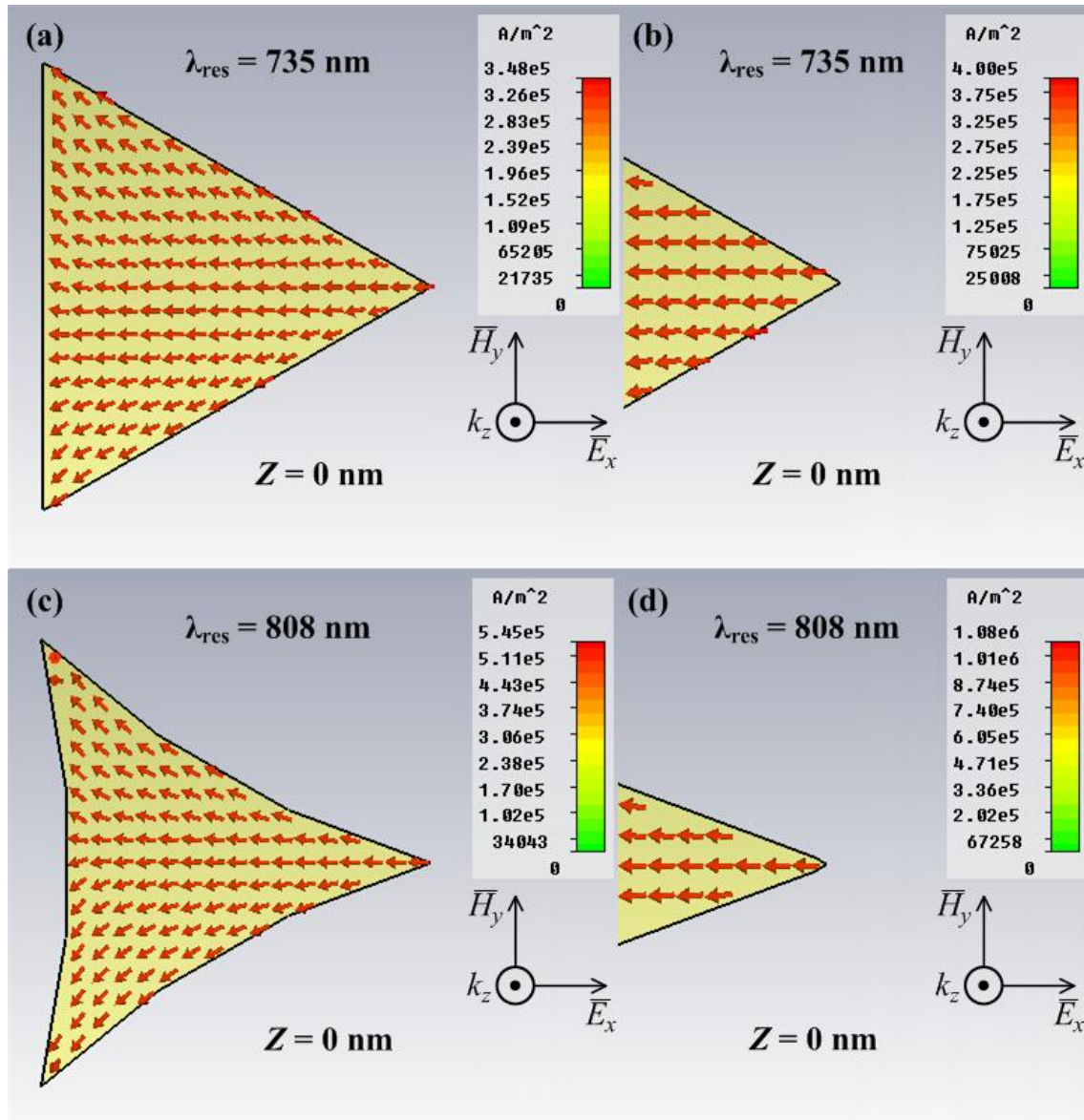


Figura 3.7. Densidade de corrente no plano  $xy$  ( $z = 0$ ): (a) NPTE138, (b) ponta de NPTE138, (c) NPTCv325, (d) ponta de NPTCv325.

### 3.5 Segundo Grupo de Geometrias Analisadas

A Fig. 3.8 mostra o segundo grupo de geometrias das NPOs analisadas neste trabalho.

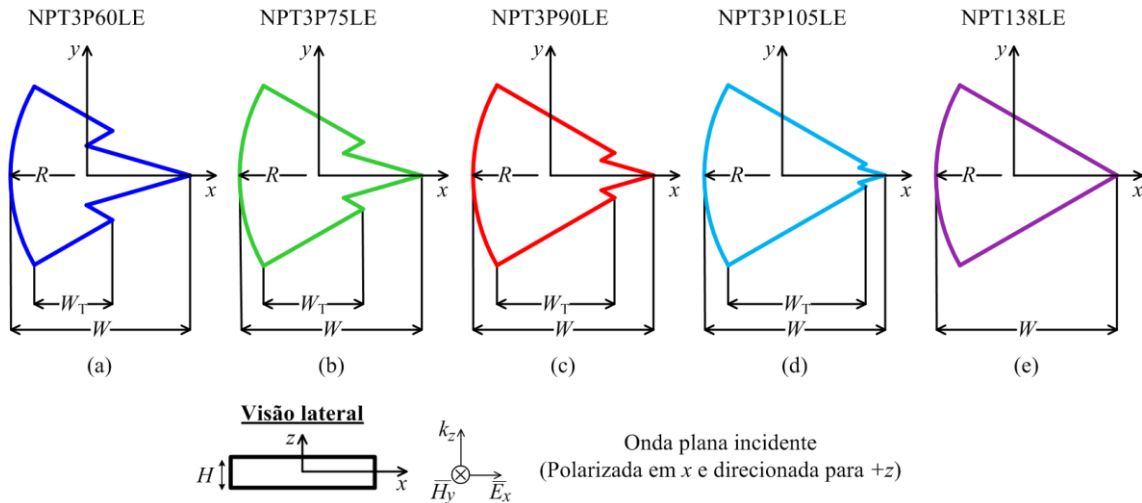


Figura 3.8. Segundo grupo de geometrias analisadas: (a) NPT3P60LE, (b) NPT3P75LE, (c) NPT3P90LE, (d) NPT3P105LE e (e) NPT138LE:  $W = R = 138,6$  nm,  $H = 20$  nm; Para (a), (b), (c) e (d),  $W_T = 60$  nm,  $75$  nm,  $90$  nm e  $105$  nm, respectivamente.

As quatro primeiras NPOs da Fig. 3.8 representam NPOs triangulares com um de seus vértices formado por três pontas e com um de seus lados encurvado (NPT3PLEs). O raio de curvatura desse lado é  $R = 138,6$  nm. Essas geometrias são formadas pela união de dois triângulos equiláteros iguais de largura  $W_T$ , mais um triângulo isósceles de largura  $W$ . As Fig. 3.8a-d correspondem a NPT3P60LE ( $W_T = 60$  nm), NPT3P75LE ( $W_T = 75$  nm), NPT3P90LE ( $W_T = 90$  nm) e NPT3P105LE ( $W_T = 105$  nm), respectivamente. A Fig. 3.8e mostra a NPO da Fig. 3.1e com um de seus lados encurvado (NPT138LE).

A ideia do vértice formado por três pontas surgiu a partir do trabalho apresentado em [9], onde os autores analisam uma nanopartícula cônica com sua ponta modificada de forma que uma borda se formasse ao redor desta ponta. Os autores de [9] afirmam que esta modificação melhora o realce de campo elétrico próximo da ponta da nanopartícula.

### 3.5.1 Resultados Numéricos

#### 3.5.1.1 Respostas Ressonantes do Campo Elétrico Próximo

As respostas ressonantes do campo elétrico próximo das NPOs ilustradas na Fig. 3.8 também foram calculadas no ponto  $d = 5$  nm. Examinando os resultados da Fig. 3.9, é possível observar que quase todas as NPOs possuem dois picos de intensidade do campo elétrico próximo, com exceção da NPT138LE (Fig. 3.8e), que possui apenas um pico de ressonância, além de ser a única que não possui um vértice formado por três pontas.

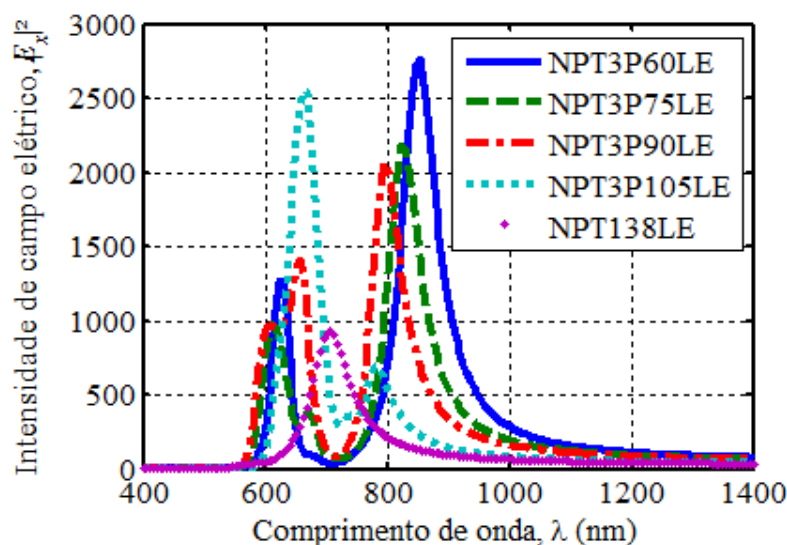


Figura 3.9. Intensidade do campo elétrico  $|E_x|^2$  no ponto  $d = 5$  nm para as NPOs ilustradas na Fig. 3.8.

Também é notado na Fig. 3.9 que, para as geometrias triangulares com três pontas, o pico de ressonância do lado esquerdo, entre  $600\text{nm} < \lambda < 700\text{nm}$ , se torna mais alto quando o valor de  $W_T$  é maior, então se pode deduzir que esta ressonância é uma função desta largura  $W_T$ , ou seja, ela é gerada pelas duas pontas laterais. Já o pico de ressonância do lado direito, entre  $800\text{nm} < \lambda < 900\text{nm}$ , é uma função da largura  $W$ , portanto este pico é gerado pela ponta do meio.

A NPT3P105LE (Fig. 3.8d) apresenta intensidade máxima de campo elétrico próximo 175% mais alta e comprimento de onda ressonante 6% menor que aqueles apresentados pela NBT138LE. Já a NPT3P60LE (Fig. 3.8d) apresenta intensidade máxima de campo elétrico próximo 198% mais alta e comprimento de onda ressonante 21% maior que aqueles apresentados pela NBT138LE. Os valores máximos da intensidade do campo elétrico  $|E_{\text{max}}|^2$  e os comprimentos de onda ressonantes  $\lambda_{\text{res}}$  das NPOs ilustradas na Fig. 3.8 são mostrados na Tabela 3.3, enquanto que a Tabela 3.4 mostra o percentual da diferença entre esses valores em relação aqueles apresentados pela NPT138LE.

Tabela 3.3. Valores máximos da intensidade do campo elétrico  $|E_{x\text{max}}|^2$  e comprimentos de onda ressonantes  $\lambda_{\text{res}}$  para as NPOs ilustradas na Fig. 3.8

Nanopartículas	Primeiro pico		Segundo pico	
	$ E_{x\text{max}} ^2$	$\lambda_{\text{res}}$ (nm)	$ E_{x\text{max}} ^2$	$\lambda_{\text{res}}$ (nm)
NPT3P60LE	1269	629	2771	853
NPT3P75LE	984	612	2189	823
NPT3P90LE	1416	657	2065	797
NPT3P105LE	2554	663	696	780
NPT138LE	929	707	929	707

Tabela 3.4. Percentual da diferença entre os valores máximos da intensidade do campo elétrico e comprimentos de onda ressonantes das NPOs ilustradas na Fig. 3.8 em relação aos valores apresentados pela NPTE138LE (Fig. 3.8e)

Nanopartículas	Diferença em relação a NPTE138LE			
	Primeiro pico		Segundo pico	
	$ E_{x\max} ^2$	$\lambda_{\text{res}}$	$ E_{x\max} ^2$	$\lambda_{\text{res}}$
NPT3P60LE	37% >	11% <	198% >	21% >
NPT3P75LE	6% >	13% <	136% >	16% >
NPT3P90LE	52% >	7% <	122% >	13% >
NPT3P105LE	175% >	6% <	25% <	10% >

### 3.5.1.2 Distribuições Espaciais do Campo Elétrico Próximo

Para analisar a concentração do campo elétrico próximo da ponta do meio das NPOs mostradas na Fig. 3.8, posicionada no eixo  $x$  ( $y = 0$ ), a sua distribuição espacial no plano  $xy$  ( $z = 0$ ) é ilustrada na Fig. 3.10. É visto que, para todas as NPOs, a distribuição do campo elétrico concentra-se principalmente nesta ponta do meio. Também é observada concentração de campo elétrico de intensidade mais baixa nas duas pontas laterais. A NPT3P105LE (Fig. 3.10d) é a NPO que apresenta mais alta intensidade de campo elétrico próximo, distribuído espacialmente. Isso pode ser explicado pelo fato de suas três pontas estarem mais próximas uma das outras. Portanto, a concentração do campo nessas três pontas tende a ser mais intensa, comparando-a com as demais NPOs.

As distribuições espaciais do campo próximo da ponta do meio das NPOs também foram analisadas para os dois picos de ressonância da NPT3P105LE e para a NPT138LE, no plano  $yz$  ( $x = 74,3$  nm) e no plano  $xz$  ( $y = 0$ ), ilustradas na Fig. 3.11 e na Fig. 3.12, respectivamente. Observa-se na Fig. 3.11 que, para o primeiro pico de ressonância da NPT3P105LE (Fig. 3.11a), a distribuição espacial do campo elétrico concentra-se principalmente onde  $z = 0$ , ou seja, exatamente no plano onde foram calculados os valores da intensidade do campo elétrico próximo. Já no segundo pico de ressonância (Fig. 3.11b), a distribuição do campo se concentra no lado esquerdo da NPO, onde a onda plana incide, e no lado direito, ou seja, nos planos das faces superior e inferior da NPO. Isso explica porque a NPT3P105LE possui intensidade do campo próximo no seu primeiro pico de ressonância mais alta que no segundo pico. No caso da NPT138LE (Fig. 3.11c), há maior concentração do campo próximo nos planos das faces superior e inferior da NPO, porém esta concentração é um pouco mais distribuída ao longo da sua espessura (eixo  $z$ ).

A Fig. 3.12 mostra a distribuição espacial do campo próximo observada na Fig. 3.10 em outro plano. É possível então concluir que a NPT3P105LE possui a característica de apresentar campo próximo mais intenso no plano onde  $z = 0$ .

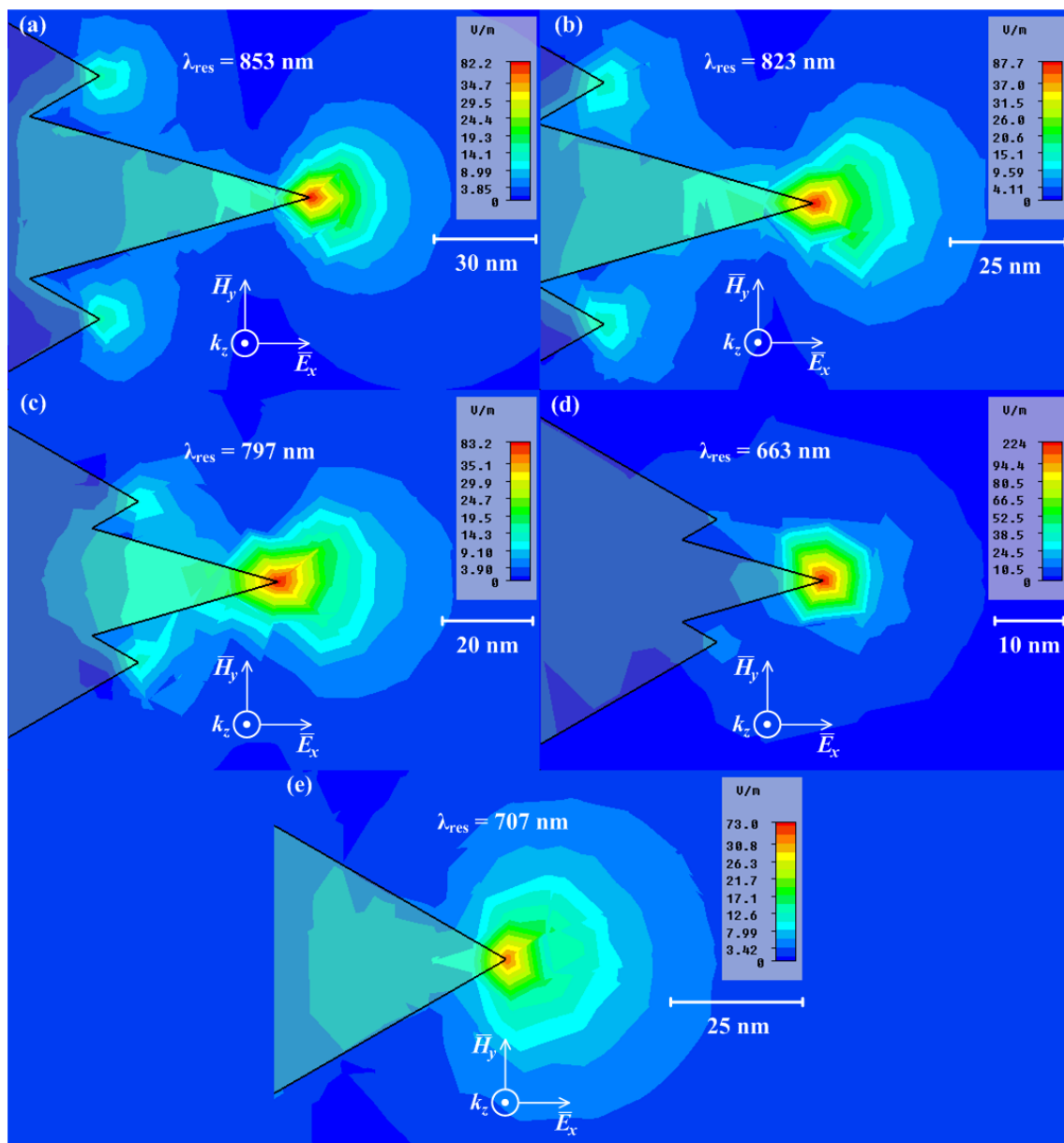


Figura 3.10. Distribuição espacial do campo elétrico  $|E_x|$  no plano  $xy$  ( $z = 0$ ) para (a) NPT3P60LE, (b) NPT3P75LE, (c) NPT3P90LE, (d) NPT3P105LE, (e) NPT138LE.

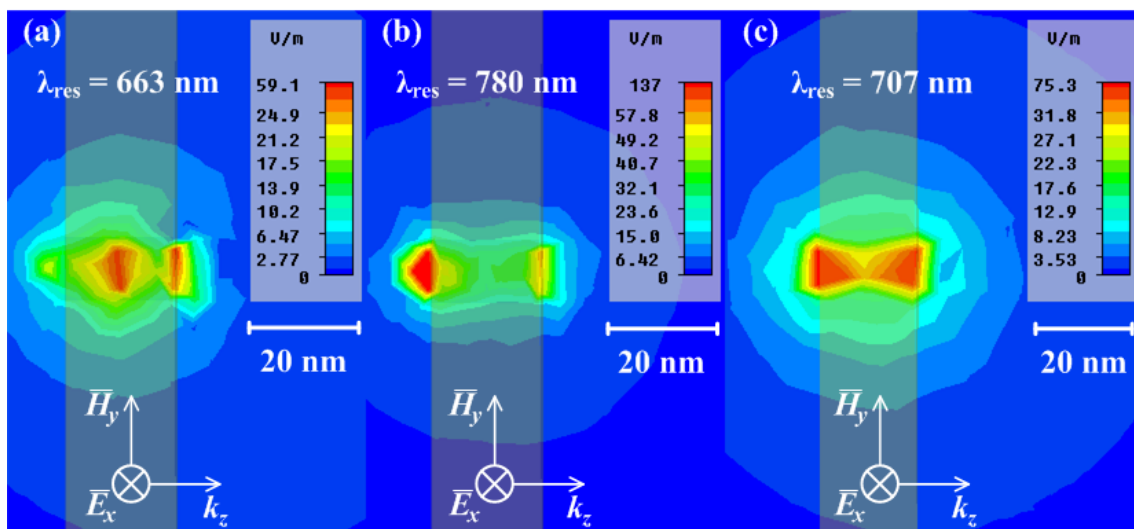


Figura 3.11. Distribuição espacial do campo elétrico  $|E_x|$  no plano  $yz$  ( $x = 74,3$  nm) para (a) NPT3P105LE (1º pico), (b) NPT3P105LE (2º pico) e (c) NPT138LE.

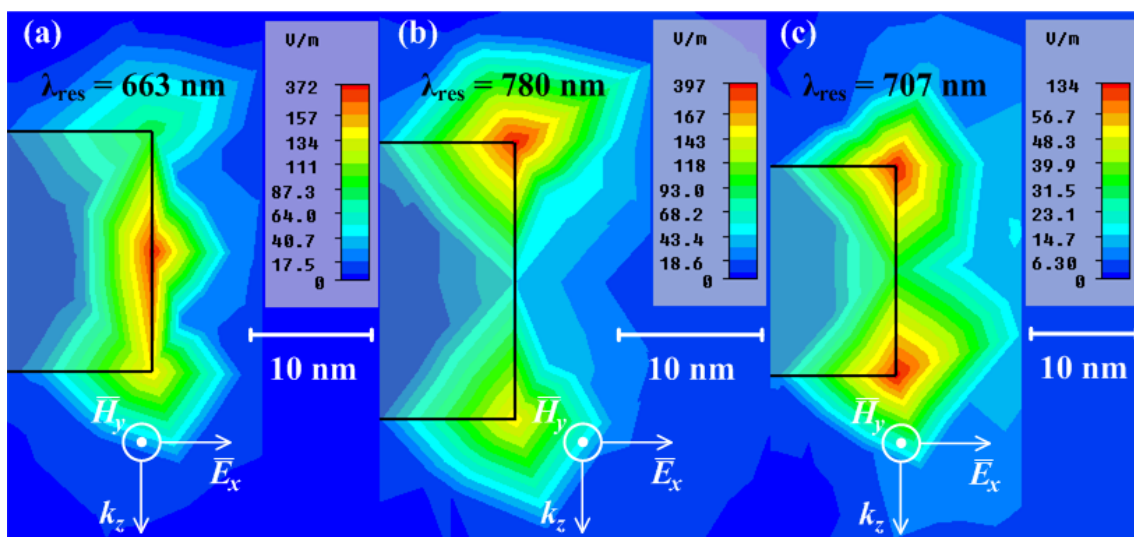


Figura 3.12. Distribuição espacial do campo elétrico  $|E_x|$  no plano  $xz$  ( $y = 0$ ) para (a) NPT3P105LE (1º pico), (b) NPT3P105LE (2º pico) e (c) NPT138LE.

### 3.5.1.3 Densidade de Corrente

Para um entendimento mais completo do comportamento ressonante da NPT3P105LE e da NPT138LE, analisou-se também a densidade de corrente dentro dessas duas NPOs no plano  $xy$  ( $z = 0$ ). As setas da densidade de corrente são ilustradas na Fig. 3.13.

A Fig. 3.13a representa a densidade de corrente para o primeiro pico de ressonância da NPT3P105LE. A Fig. 3.13b representa o *zoom* da ponta da NPT3P105LE. Pode-se observar nessas figuras que as setas da densidade de corrente deslocam-se para a ponta do meio posicionada no eixo  $x$  ( $y = 0$ ). Ao contrário da NPT138LE (Fig. 3.13c), com *zoom* da sua ponta ilustrado na Fig. 3.13d, cujas setas da densidade de corrente deslocam-se da direita para esquerda.



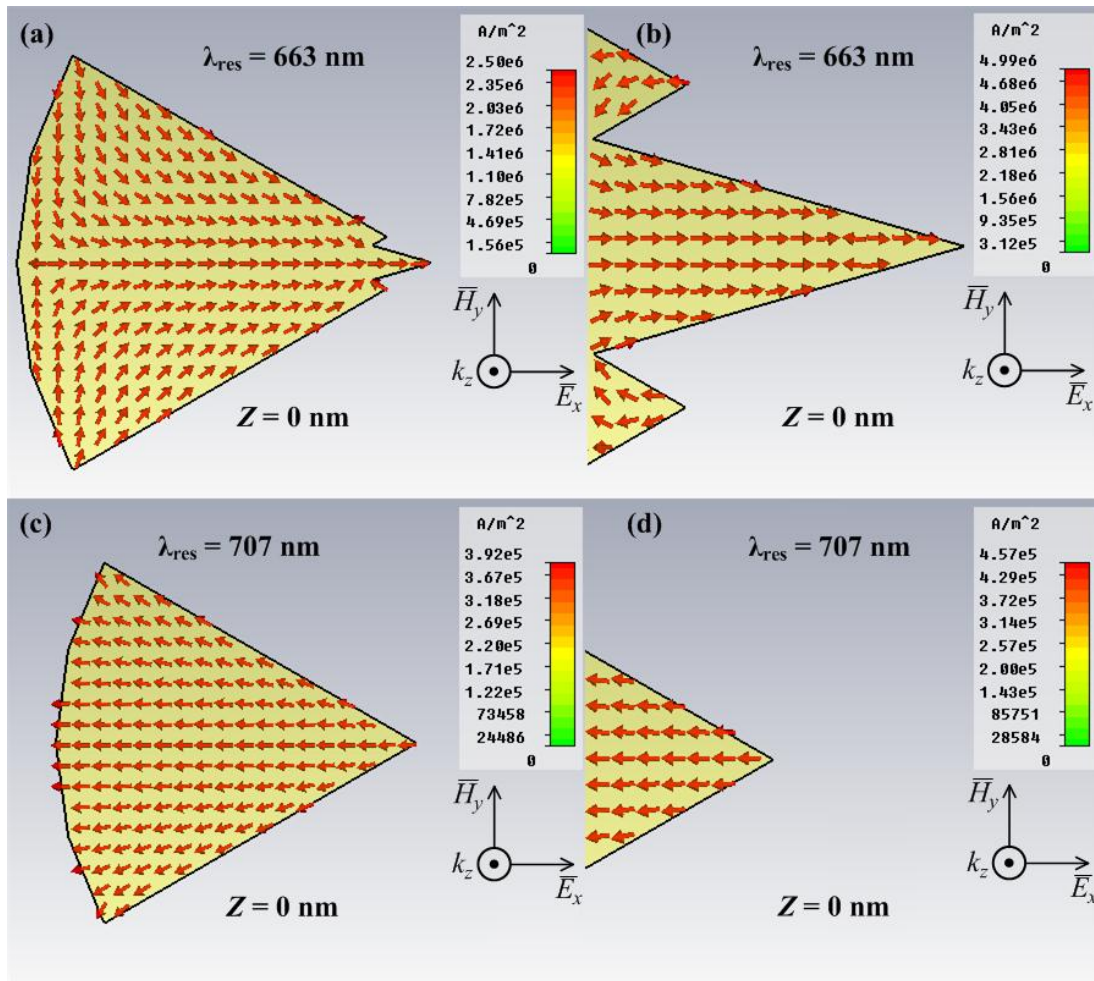


Figura 3.13. Densidade de corrente no plano  $xy$  ( $z = 0$ ): (a) NPT3P105LE, (b) ponta de NPT3P105LE, (c) NPT138LE, (d) ponta de NPT138LE.

### 3.6 Terceiro Grupo de Geometrias Analisadas

A Fig. 3.14 mostra o terceiro grupo de geometrias das NPOs analisadas neste trabalho.

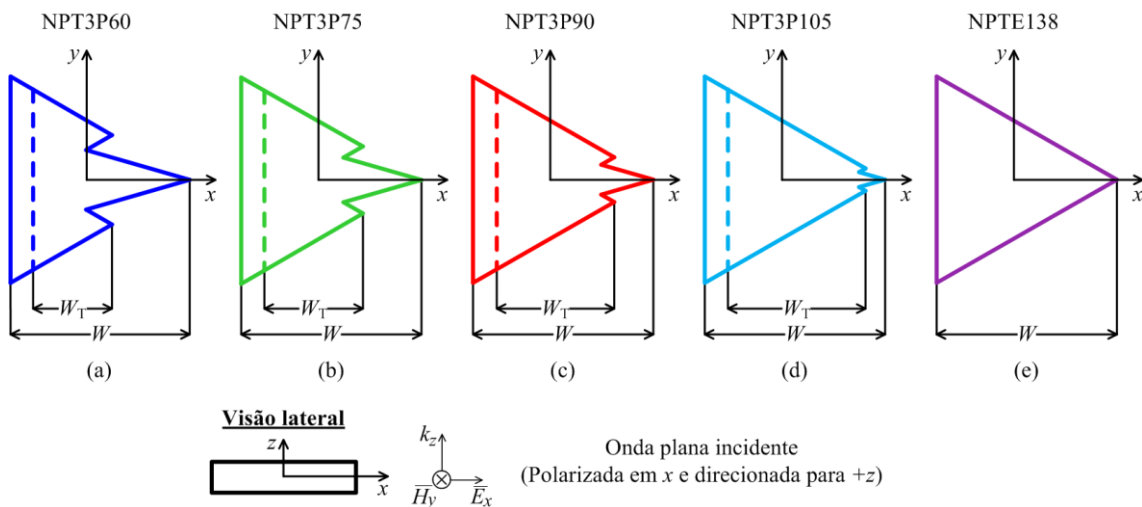


Figura 3.14. Terceiro grupo de geometrias analisadas: (a) NPT3P60, (b) NPT3P75, (c) NPT3P90, (d) NPT3P105 e (e) NPTE138:  $W = 138,6$  nm,  $H = 20$  nm; Para (a), (b), (c) e (d),  $W_T = 60$  nm,  $75$  nm,  $90$  nm e  $105$  nm, respectivamente.



As quatro primeiras NPOs da Fig. 3.14 representam as quatro primeiras NPOs ilustradas na Fig. 3.8, porém o lado, que antes era encurvado, agora é reto (NPT3Ps). O tamanho da sua largura  $W$  permanece o mesmo. A Fig. 3.14a corresponde a NPT3P60 ( $W_T = 60$  nm), a Fig. 3.14b mostra a NPT3P75 ( $W_T = 75$  nm), a Fig. 3.14c apresenta a NPT3P90 ( $W_T = 90$  nm) e a Fig. 3.14d é a NPT3P105 ( $W_T = 105$  nm). A NPO apresentada na Fig. 3.14e corresponde a mesma NPO ilustrada na Fig. 3.1e (NPTE138).

### 3.6.1 Resultados Numéricos

#### 3.6.1.1 Respostas Ressonantes do Campo Elétrico Próximo

O objetivo de calcular as respostas ressonantes das NPOs de geometrias triangulares com três pontas sem o lado encurvado é analisar a influência que essa curvatura exerce sobre as propriedades ressonantes dessas NPOs. Na Fig.3.15, no caso da NPTE138, observa-se que a ausência do lado encurvado faz com que a sua intensidade máxima do campo elétrico próximo diminua e seu comprimento de onda ressonante aumente. No caso das NPT3PLEs, o primeiro pico de ressonância da NPT3P60, da NPT3P75 e da NPT3P105 diminui e o da NPT3P90 aumenta, enquanto que, para todas elas, o comprimento ressonante deste primeiro pico aumenta, com exceção da NPT3P60, cujo comprimento de onda ressonante permanece constante. Já o segundo pico da NPT3P60 e da NPT3P90 diminui e o da NPT3P75 e da NPT3P105 aumenta e, para todas elas, o comprimento de onda desse segundo pico aumenta.

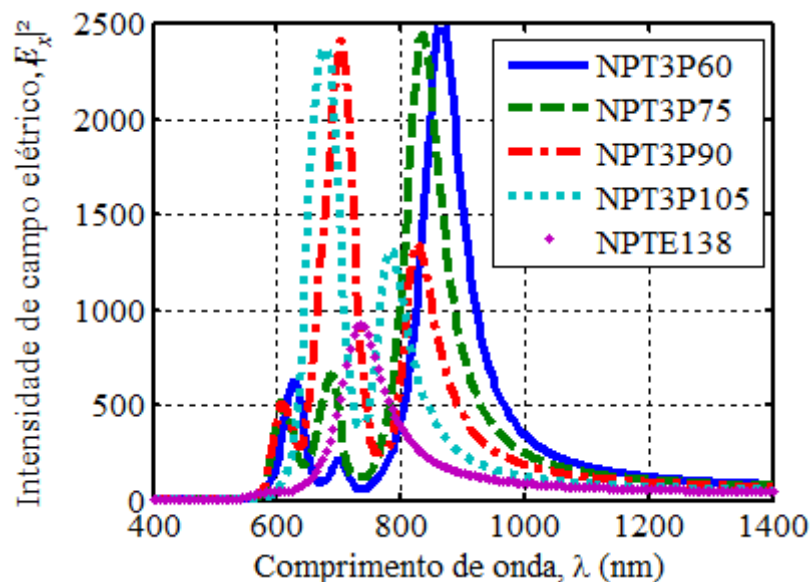


Figura 3.15. Intensidade do campo elétrico  $|E_x|^2$  no ponto  $d = 5$  nm para as NPOs ilustradas na Fig. 3.14.

As NPOs da Fig. 3.14 com um vértice formado por três pontas apresentam mais de um pico de ressonância, o que enfatiza a ideia de que estas três pontas possuem tal

característica. Comparando os resultados das NPT3Ps com a NPTE138, o segundo pico de ressonância da NPT3P60 é 174% mais alto que o pico apresentado pela NPTE138. No caso da NPTE105, seu primeiro pico de ressonância é 157% maior que o pico apresentado pela NPTE138, e sua intensidade máxima de campo elétrico diminui em 7%, na ausência do lado encurvado (NPT3P105). Já seu comprimento de onda aumenta em 2%. O que chama atenção nas NPOs sem o lado encurvado é o caso da NPT3P90, que agora apresentou seu primeiro pico de ressonância 79% mais alto que o segundo pico e é 162% mais alto que o pico de ressonância da NPTE138.

Os valores máximos da intensidade do campo elétrico  $|E_{\max}|^2$  e os comprimentos de onda ressonantes  $\lambda_{\text{res}}$  das NPOs ilustradas na Fig. 3.14 são mostrados na Tabela 3.5, enquanto que a Tabela 3.6 mostra o percentual da diferença entre esses valores em relação aqueles apresentados pela NPTE138.

Tabela 3.5. Valores máximos da intensidade do campo elétrico  $|E_{x\max}|^2$  e comprimentos de onda ressonantes  $\lambda_{\text{res}}$  para as NPOs ilustradas na Fig. 3.14

Nanopartículas	Primeiro pico		Segundo pico	
	$ E_{x\max} ^2$	$\lambda_{\text{res}}$ (nm)	$ E_{x\max} ^2$	$\lambda_{\text{res}}$ (nm)
NPT3P60	626	629	2537	864
NPT3P75	664	685	2457	836
NPT3P90	2424	702	1357	825
NPT3P105	2377	679	1318	785
NPTE138	926	735	926	735

Tabela 3.6. Percentual da diferença entre os valores máximos da intensidade do campo elétrico e comprimentos de onda ressonantes das NPOs ilustradas na Fig. 3.14 em relação aos valores apresentados pela NPTE138 (Fig. 3.14e)

Nanopartículas	Diferença em relação a NPTE138			
	Primeiro pico		Segundo pico	
	$ E_{x\max} ^2$	$\lambda_{\text{res}}$	$ E_{x\max} ^2$	$\lambda_{\text{res}}$
NPT3P60	32% <	14% <	174% >	18% >
NPT3P75	28% <	7% <	165% >	14% >
NPT3P90	162% >	4% <	47% >	12% >
NPT3P105	157% >	8% <	42% >	7% >

### 3.6.1.2 Distribuições Espaciais do Campo Elétrico Próximo

Para melhor entendimento do comportamento ressonante das NPOs da Fig. 3.14, também foi investigada a distribuição espacial do campo elétrico próximo da sua ponta do meio, posicionada no eixo  $x$ . Nota-se nas Fig. 3.16, Fig. 3.17 e Fig. 3.18 que estas NPOs possuem distribuições espaciais do campo próximo com as mesmas

características descritas para das distribuições das NPOs da Fig. 3.8, ilustradas na Fig. 3.10, na Fig. 3.11 e na Fig. 3.12. A ausência do lado encurvado não causou diferença na distribuição do campo próximo dessas NPOs.

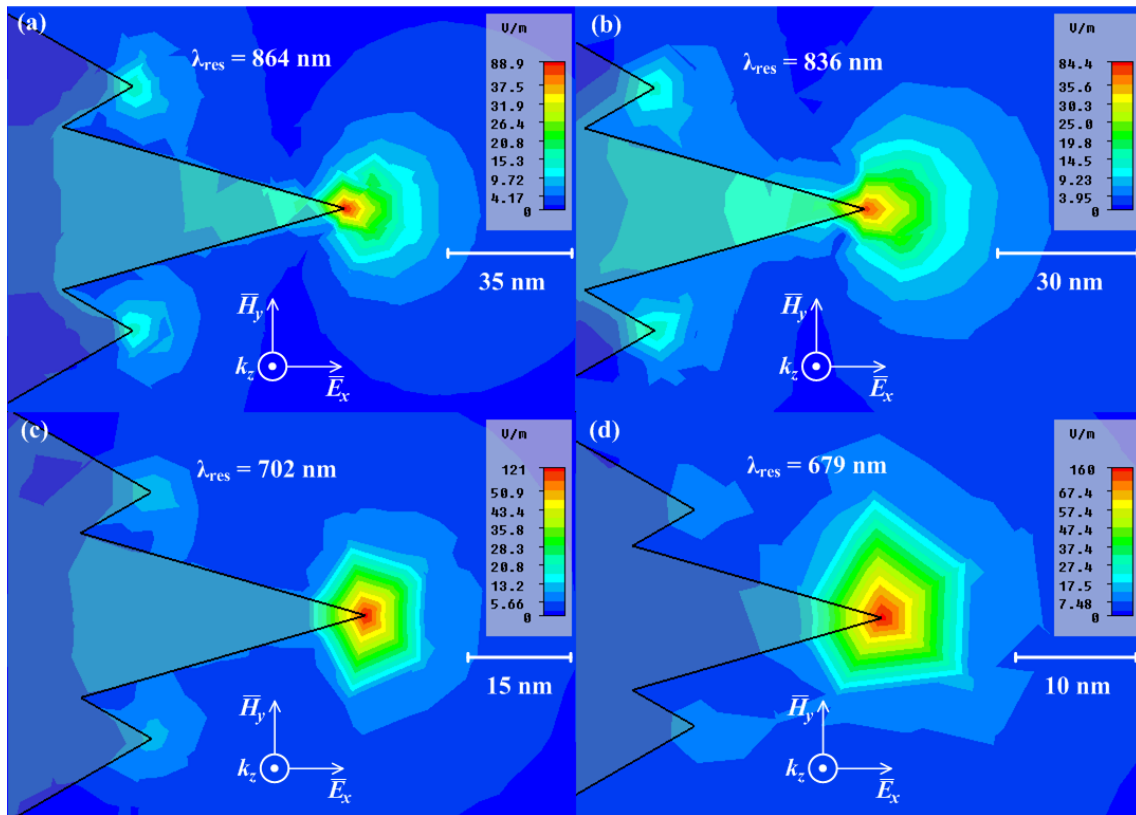


Figura 3.16. Distribuição espacial do campo elétrico  $|E_x|$  no plano  $xy$  ( $z = 0$ ) para (a) NPT3P60, (b) NPT3P75, (c) NPT3P90, (d) NPT3P105LE.

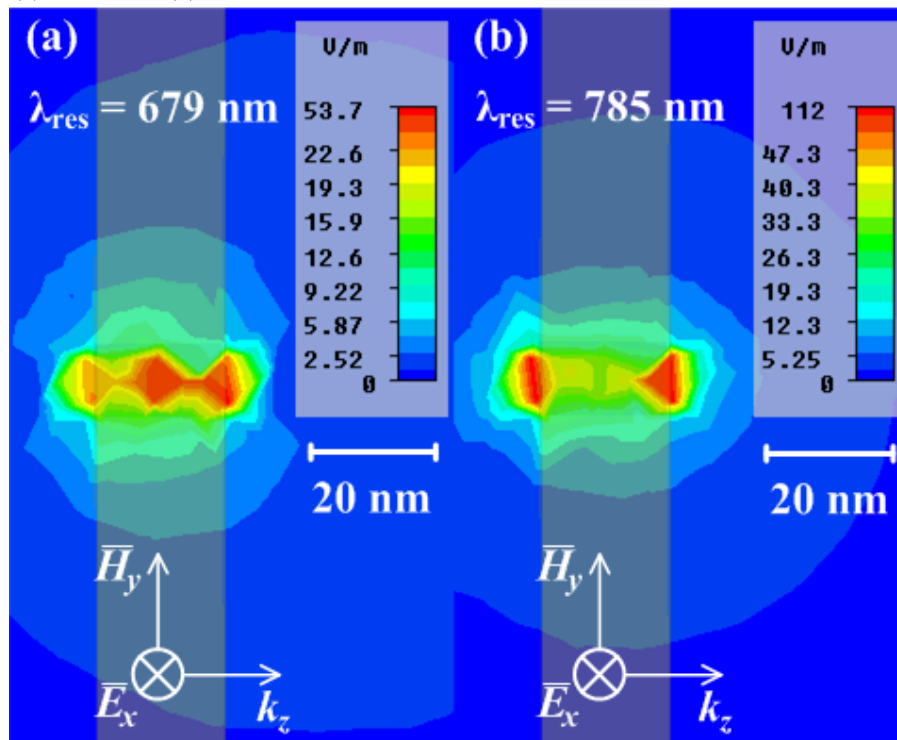


Figura 3.17. Distribuição espacial do campo elétrico  $|E_x|$  no plano  $yz$  ( $x = 74,3$  nm) para (a) NPT3P105 ( $1^\circ$  pico), (b) NPT3P105 ( $2^\circ$  pico).

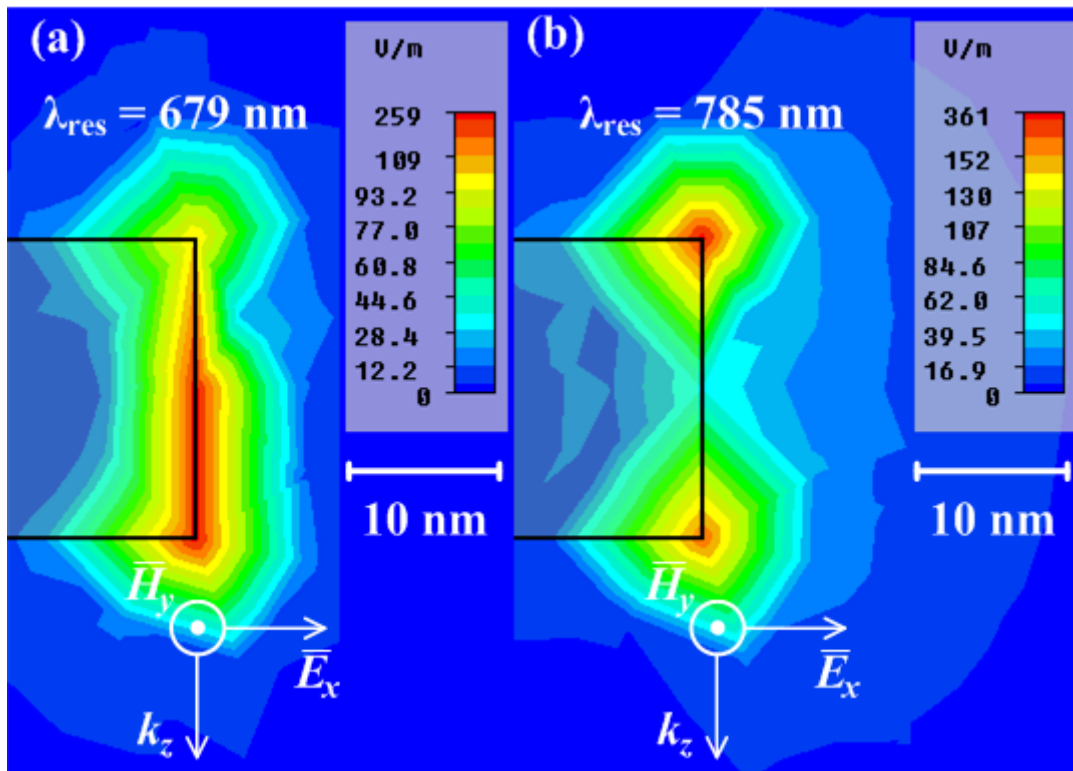


Figura 3.18. Distribuição espacial do campo elétrico  $|E_x|$  no plano  $xz$  ( $y = 0$ ) para (a) NPT3P105 (1° pico), (b) NPT3P105 (2° pico).

### 3.6.1.3 Densidade de Corrente

A densidade de corrente dentro da NPT3P105 também foi investigada.

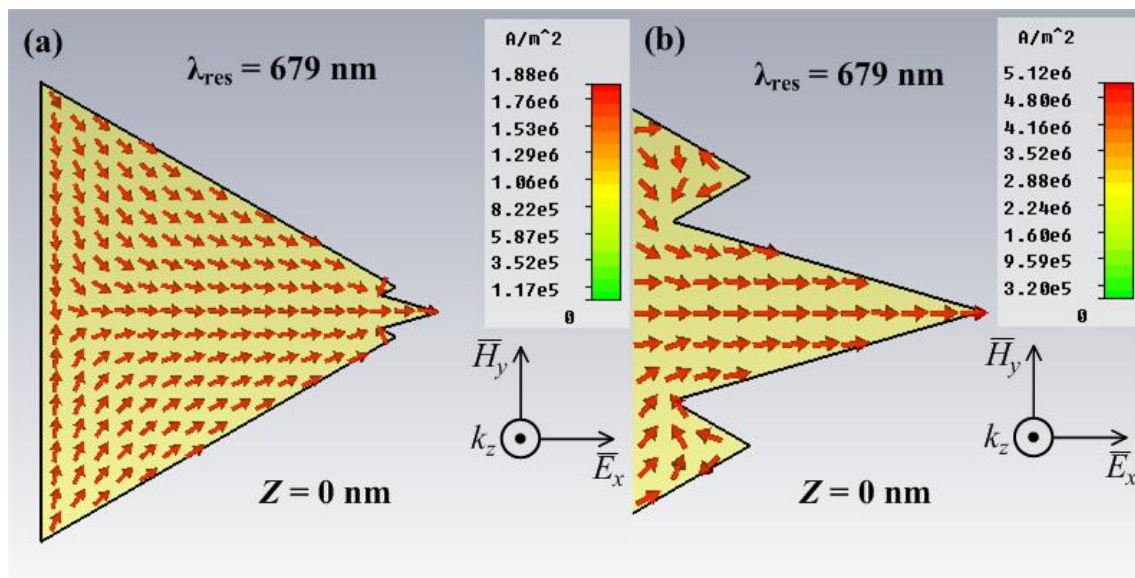


Figura 3.19. Densidade de corrente no plano  $xy$  ( $z = 0$ ): (a) NPT3P105, (b) ponta de NPT3P105.

De acordo com a Fig. 3.19, o sentido das setas da densidade de corrente no plano  $xy$  ( $z = 0$ ) também foi o mesmo observado para sua NPO equivalente com lado encurvado (NPT3P105LE (Fig. 3.13a e Fig. 3.13b)).

### 3.7 Análise Comparativa dos Resultados Numéricos

Para analisar comparativamente as propriedades ressonantes das NPOs de diferentes geometrias apresentadas neste Capítulo, três das novas geometrias triangulares propostas foram selecionadas, mais a geometria triangular equilátera (convencional). Essas geometrias são ilustradas na Fig. 3.20. A Fig. 3.20a corresponde a NPTE138 (Fig. 3.1e), a Fig. 3.20b mostra a NPTCv160 (Fig. 3.1g), a Fig. 3.20c apresenta a NPT138LE (Fig. 3.8e) e a Fig. 3.20d é a NPT3P105LE (Fig. 3.8d).

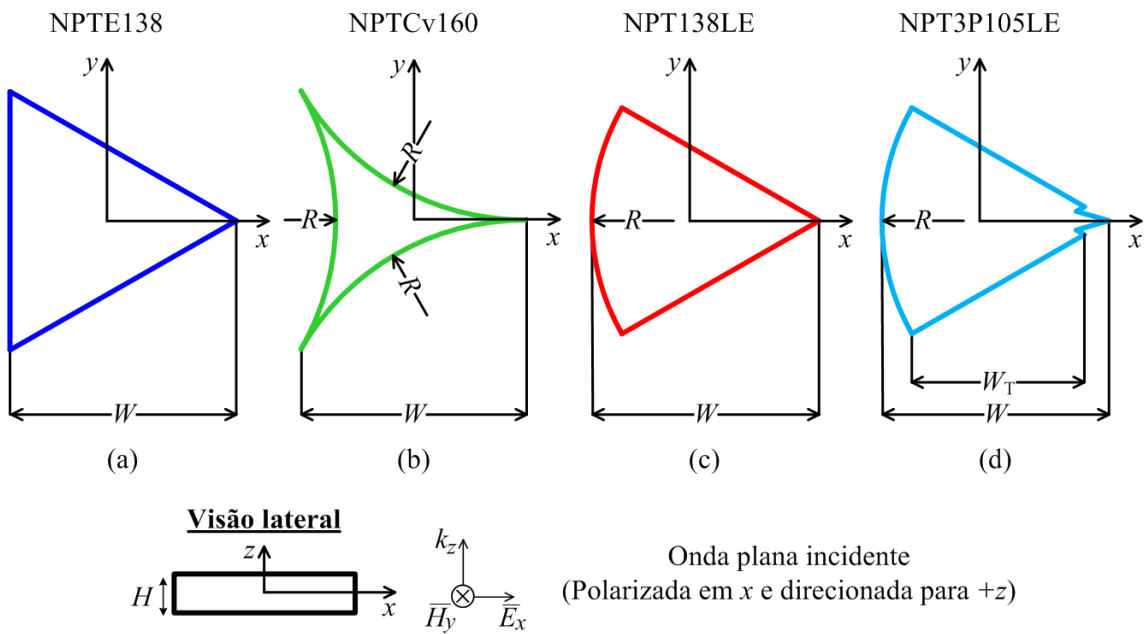


Figura 3.20. Geometrias triangulares modificadas: (a) NPTE138, (b) NPTCv160, (c) NPT138LE e (d) NPT3P105LE:  $W = 138,6$  nm,  $H = 20$  nm; para (b), (c) e (d),  $R = 138,6$  nm; para (d),  $W_T = 105$  nm.

Os resultados apresentados na Fig. 3.21 mostram que a NPT3P105LE é a NPO que possui a mais alta intensidade de campo elétrico próximo no ponto com  $d = 5$  nm, sendo 176% mais alta que aquela apresentada pela NPTE138. Por outro lado, seu comprimento de onda ressonante é 10% menor que o da NPTE138.

Os valores máximos da intensidade do campo elétrico  $|E_{\max}|^2$  e os comprimentos de onda ressonantes  $\lambda_{\text{res}}$  das NPOs ilustradas na Fig. 3.21 são mostrados na Tabela 3.7, enquanto que a Tabela 3.8 mostra o percentual da diferença entre esses valores em relação aqueles apresentados pela NPTE138.

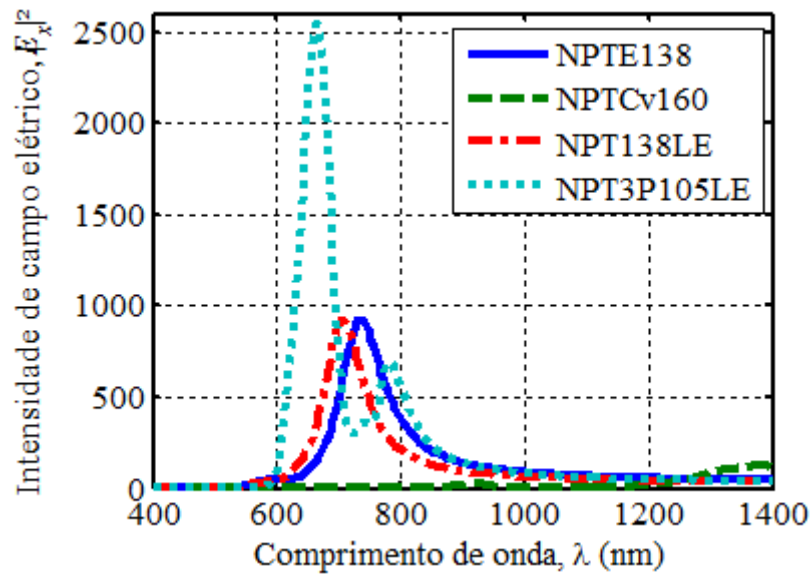


Figura 3.21. Intensidade do campo elétrico  $|E_x|^2$  no ponto  $d = 5$  nm para as NPOs ilustradas na Fig. 3.20.

Tabela 3.7. Valores máximos da intensidade do campo elétrico  $|E_{x\max}|^2$  e comprimentos de onda ressonantes  $\lambda_{\text{res}}$  para as NPOs ilustradas na Fig. 3.20

Nanopartículas	$ E_{x\max} ^2$	$\lambda_{\text{res}}$ (nm)
NPTE138	926	735
NPTCv160	127	1378
NPT138LE	929	707
NPT3P105LE	(1° pico) 2554	(1° pico) 663
	(2° pico) 696	(2° pico) 780

Tabela 3.8. Percentual da diferença entre os valores máximos da intensidade do campo elétrico e comprimentos de onda ressonantes das NPOs ilustradas na Fig. 3.20 em relação aos valores apresentados pela NPTE138 (Fig. 3.20d)

Nanopartículas	Diferença em relação a NPTE138	
	$ E_{x\max} ^2$	$\lambda_{\text{res}}$
NPTCv160	86% <	87% >
NPT138LE	0,3% >	4% <
NPT3P105LE	(1° pico) 176% >	(1° pico) 10% <
	(2° pico) 25% <	(2° pico) 6% >

De acordo com o que foi apresentado neste Capítulo, pode-se concluir que essas novas geometrias triangulares possuem melhor intensidade de campo elétrico próximo em relação à geometria triangular equilátera (convencional). No Capítulo 4 são apresentadas as nanoantenas *bowtie* modeladas de acordo com as novas geometrias propostas neste trabalho.

### 3.8 Referências

- [1] L. Novotny and B. Hecht, *Principles of Nano-Optics*.: Cambridge University Press, 2006.

- [2] P. Biagioni, J.-S. Huang, and B. Hecht, "Nanoantennas for visible and infrared," *Reports on Progress in Physics*, vol. 75, pp. 1-40, 2012.
- [3] (2012) CST MWS®. [Online]. <http://www.cst.com/>
- [4] T. Weiland, "A discretization model for the solution of Maxwell's equations for six-component fields," *Archiv fuer Elektronik und Uebertragungstechnik*, vol. 31, pp. 116-120, Mar. 1977.
- [5] J.-P. Berenger, *Perfectly Matched Layer (PML) for Computational Electromagnetics*. New Jersey, USA: Morgan & Claypool Publishers, 2007.
- [6] (2012) Microsoft Corporation. [Online]. <http://www.microsoft.com>
- [7] J. A. Stratton, *Electromagnetic Theory*. New York, USA: New York: McGraw-Hill, 1941.
- [8] T. L. T. dos Santos, K. Q. da Costa, and V. Dmitriev, "Comparative Analysis of Gold Nanoparticles of Different Triangular Geometries with Higher Near-Field Enhancements," in *IEEE 3rd Latin-American Conference on Communications*, Belém, PA, Brazil, 2011, pp. 1-4.
- [9] J. Aizpurua, G. W. Bryant, L. J. Richter, and F. J. G. Abajo, "Optical properties of coupled metallic nanorods for field-enhanced spectroscopy," *Physical Review B*, vol. 71, pp. 235420 - 235420-13, Jun. 2005.

## CAPÍTULO 4

### NANOANTENAS *BOWTIE* DE OURO COM NOVAS GEOMETRIAS TRIANGULARES E RESULTADOS NUMÉRICOS

#### 4.1 Conteúdo do Capítulo

Este Capítulo apresenta uma análise comparativa das propriedades ressonantes de nanoantenas *bowtie* de ouro (NBOs) com novas geometrias triangulares. Tais propriedades e geometrias são as mesmas analisadas para as NPOs apresentadas no Capítulo 3. Porém, no caso das NBOs, também foi analisada a influência de um substrato de dióxido de silício nas suas propriedades ressonantes e os diagramas de campo distante.

#### 4.2 Introdução

Neste trabalho foram analisados dois grupos diferentes de NBOs. O primeiro grupo corresponde às NBOs formadas pelas NPOs ilustradas na Fig 3.20 e o segundo grupo corresponde às NBOs formadas pelas NPOs ilustradas na Fig. 3.8.

Da mesma forma para as NPOs, todas as NBOs apresentadas neste trabalho são iluminadas por uma onda plana polarizada em  $x$ , propagando-se na direção  $+z$ . Todas têm espessura  $H = 20$  nm, ao longo do eixo  $z$ , e largura  $W = 138,6$  nm, ao longo do eixo  $x$ . O meio circundante é o vácuo.

Também, da mesma forma para as NPOs, a permissividade complexa do ouro  $\varepsilon = \varepsilon_0 \varepsilon_r$  foi descrita aplicando-se o modelo de Lorentz-Drude, com um termo de interbanda, para calcular a permissividade relativa  $\varepsilon_r$  [1], [2], tal como apresentado na seção 2.2.3 do Capítulo 2, e as simulações computacionais foram feitas através do *software* comercial CST MWS® [3].

#### 4.3 Nanoantenas *Bowtie* com Novas Geometrias Triangulares

A Fig. 4.1 mostra as geometrias das NBOs analisadas neste trabalho. A Fig. 4.1a corresponde a uma NBO triangular equilátera (NBTE), a Fig. 4.1b mostra uma NBO triangular côncava (NBTC), a Fig. 4.1c apresenta uma NBO triangular com um de seus lados encurvado (NBTLE) e a Fig. 4.1d é uma NBTLE com um de seus vértices formado por três pontas (NBT3PLE). O lado encurvado da NBTLE e da NBT3PLE tem raio de curvatura  $R$  igual a 138,6 nm.



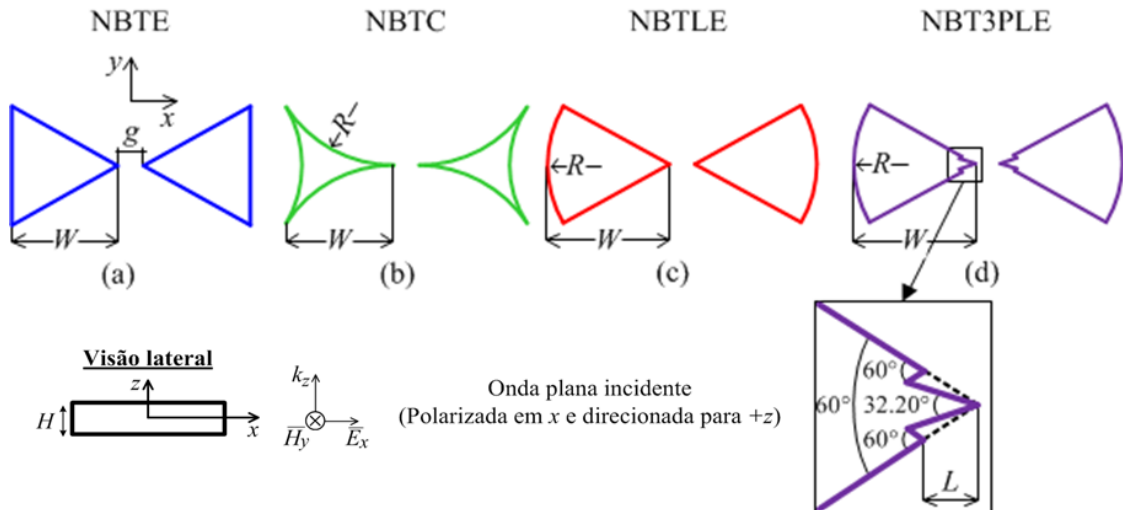


Figura 4.1. NBOs analisadas: (a) NBTE, (b) NBTC, (c) NBTLE e (d) NBT3PLE:  $W = 138,6$  nm,  $g = 10$  nm,  $H = 20$  nm; para (c) e (d),  $R = 138,6$  nm; para (d),  $L = 33,6$  nm.

### 4.3.1 Resultados Numéricos

#### 4.3.1.1 Respostas Ressonantes do Campo Elétrico Próximo

Na Fig. 4.1, o *gap*  $g$  das NBOs é igual a 10 nm. As respostas ressonantes do campo elétrico próximo foram calculadas no ponto no meio do *gap*, onde a coordenada é (0,0,0). A Fig. 4.2 mostra a resposta ressonante do campo elétrico neste ponto para as NBOs ilustradas na Fig. 4.1. Examinando os resultados na Fig. 4.2, é possível observar diferenças nas intensidades do campo elétrico  $|E|^2$  e nos comprimentos de onda ressonantes. Na região nanoescalar das ondas plasmônicas, deve-se analisar cada caso separadamente, pois escalar a frequência dos resultados no geral é impossível, diferente de como pode ser feito na região de micro-ondas.

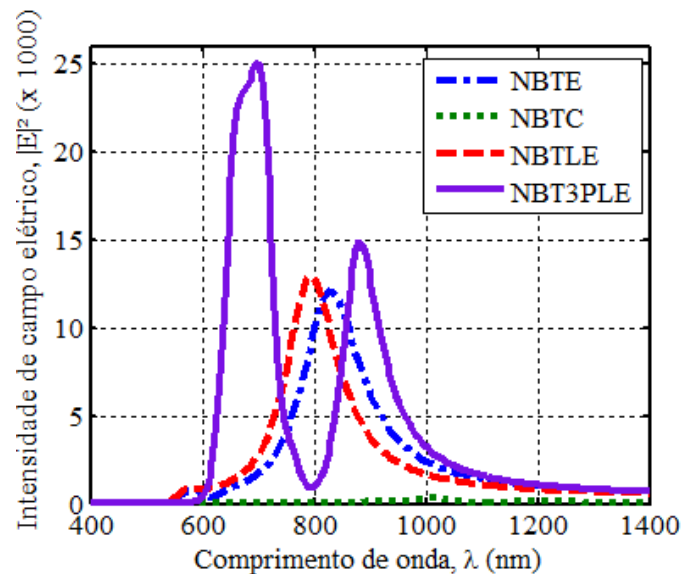


Figura 4.2. Intensidade do campo elétrico  $|E|^2$  no meio do *gap* para as NBOs ilustradas na Fig. 4.1.

A NBT3PLE apresenta dois picos de ressonância, a mais alta intensidade de

campo elétrico e o menor comprimento de onda ressonante, comparada com as outras NBOs da Fig. 4.1. Para esta NBO, no primeiro pico de ressonância, a intensidade máxima do campo elétrico próximo é 106% mais alta e o comprimento de onda ressonante é 15% menor que os apresentados pela NBTE. No segundo pico, a intensidade do campo elétrico é 23% mais alta e o comprimento de onda ressonante é 6% maior que aqueles apresentados pela NBTE. Os valores máximos de intensidade de campo elétrico  $|E_{\max}|^2$  e os comprimentos de onda ressonantes  $\lambda_{\text{res}}$  das NBOs ilustradas na Fig. 4.1 são mostrados na Tabela 4.1, enquanto que a Tabela 4.2 mostra o percentual da diferença entre esses valores em relação aos apresentados pela NBTE.

Tabela 4.1. Valores máximos da intensidade do campo elétrico  $|E_{\max}|^2$  e comprimentos de onda ressonantes  $\lambda_{\text{res}}$  para as NBOs ilustradas na Fig. 4.1

Nanoantena <i>bowtie</i>	$ E_{\max} ^2$	$\lambda_{\text{res}}$ (nm)
NBTE	12133	830
NBTC	332	1015
NBTLE	12996	797
NBTLE3P	(1° pico) 24964 (2° pico) 14884	(1° pico) 702 (2° pico) 880

Tabela 4.2. Percentual da diferença entre os valores máximos da intensidade do campo elétrico e comprimentos de onda ressonantes das NPOs ilustradas na Fig. 4.1 em relação aos valores apresentados pela NBTE (Fig. 4.1a)

Nanoantena <i>bowtie</i>	Diferença em relação a NBTE	
	$ E_{\max} ^2$	$\lambda_{\text{res}}$
NBTC	97% <	22% >
NBTLE	7% >	4% <
NBTLE3P	(1° pico) 106% > (2° pico) 23% >	(1° pico) 15% < (2° pico) 6% >

Nesta pesquisa também foi investigada a resposta ressonante do campo elétrico em dois pontos ( $d = 5$  e  $20$  nm, respectivamente) próximos de uma das duas pontas laterais da NBT3PLE, ao longo do eixo  $x$ , como ilustrado na Fig. 4.3.

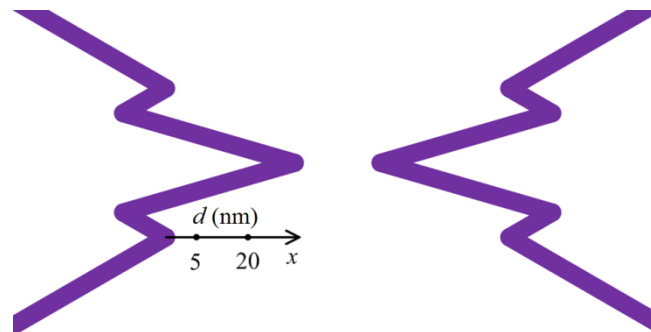


Figura 4.3. Intensidade do campo elétrico  $|E|^2$  em dois pontos ( $d = 5$  e  $20$  nm) próximos de uma das duas pontas laterais de NBT3PLE (Fig. 4.1d).

Esta análise foi feita com o intuito de analisar a intensidade do campo elétrico próximo nesta região que interage com o campo elétrico próximo da ponta do meio.

Examinando os resultados da Fig. 4.4, é possível observar três picos de ressonância no ponto  $d = 5$  nm. A intensidade máxima do campo elétrico próximo é 287% mais baixa que aquela no ponto  $d = 20$  nm. Isso pode ser explicado devido ao fato de o ponto  $d = 20$  nm ser o ponto mais próximo da ponta do meio, onde o campo elétrico próximo é mais intenso. Já o comprimento de onda ressonante é quase o mesmo nos pontos  $d = 5$  nm e  $d = 20$  nm.

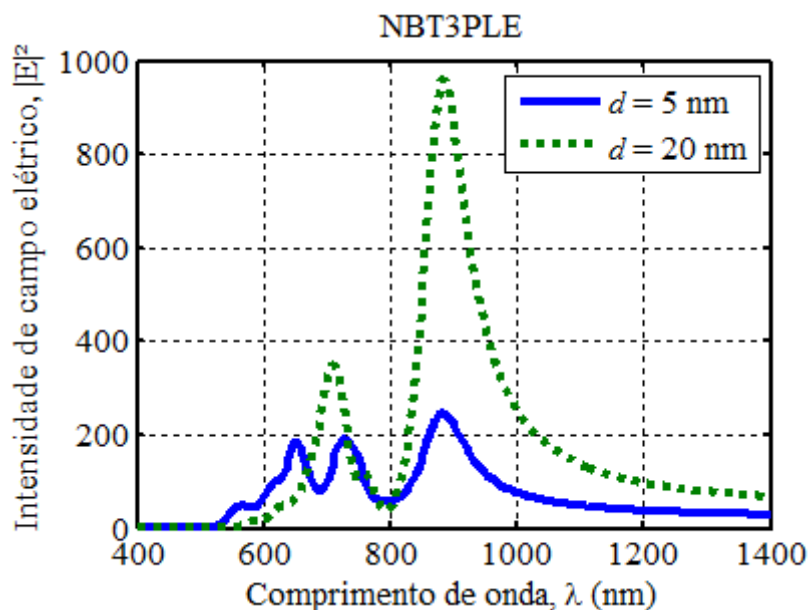


Figura 4.4. Intensidade do campo elétrico  $|E|^2$  em dois pontos ao longo do eixo  $x$  ( $d = 5$  e  $20$  nm) próximos de uma das pontas laterais da NBT3PLE.

Os valores máximos da intensidade do campo elétrico  $|E_{\max}|^2$  e os comprimentos de onda ressonantes  $\lambda_{\text{res}}$  observados na Fig. 4.4 são mostrados na Tabela 4.3, enquanto que a Tabela 4.4 mostra o percentual da diferença dos valores do ponto  $d = 5$  nm em relação aos valores do ponto  $d = 20$  nm.

Tabela 4.3. Valores máximos do campo elétrico  $|E_{\max}|^2$  e comprimentos de onda ressonantes  $\lambda_{\text{res}}$  em dois pontos ao longo do eixo  $x$  ( $d = 5$  e  $20$  nm) próximos de uma das duas pontas laterais da NBT3PLE

Nanoantena <i>bowtie</i>	$d = 5$ nm		$d = 20$ nm	
	$ E_{\max} ^2$	$\lambda_{\text{res}}$ (nm)	$ E_{\max} ^2$	$\lambda_{\text{res}}$ (nm)
NBT3PLE	248	880	959	886

Tabela 4.4. Percentual da diferença entre os valores máximos da intensidade do campo elétrico e comprimentos de onda ressonantes da NBT3PLE no ponto  $d = 5$  nm em relação aos valores no ponto  $d = 20$  nm

Nanoantena <i>bowtie</i>	Diferença em relação à $d = 20$ nm	
	$d = 5$ nm	
	$ E_{\max} ^2$	$\lambda_{\text{res}}$
NBT3PLE	287% <	0,7% <

Sabe-se que a intensidade do campo elétrico próximo depende do tamanho do *gap* das NBOs e da presença de um substrato em sua estrutura. Portanto, é importante investigar a influência desses dois parâmetros nas suas propriedades ressonantes.

#### 4.3.1.1 Influência do Tamanho do *Gap*

A resposta ressonante do campo elétrico próximo foi analisada no meio do *gap* com três tamanhos diferentes ( $g = 10, 15$  e  $20$  nm, respectivamente) para a NBTE e para a NBT3PLE. A Fig. 4.5 mostra essa resposta ressonante.

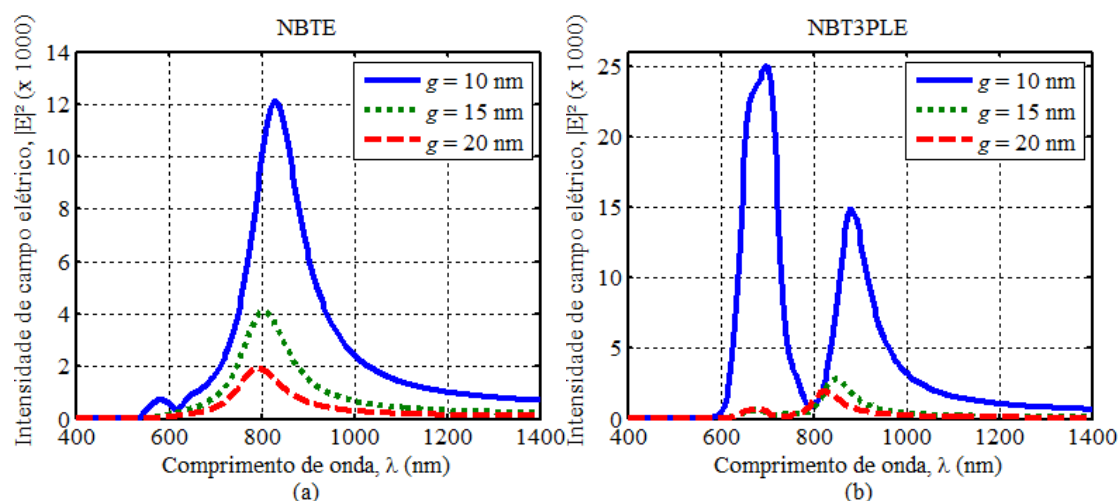


Figura 4.5. Intensidade do campo elétrico  $|E|^2$  no meio dos três *gaps* ( $g = 10, 15$  e  $20$  nm), para a (a) NBTE e para a (b) NBT3PLE.

Examinando os resultados da Fig. 4.5, pode-se observar que a intensidade do campo elétrico diminui quando o tamanho do *gap* aumenta, já que as NBOs com *gaps* menores têm intensidade mais alta de campo elétrico, comparadas com as NBOs com *gaps* maiores. Quando se aumenta o tamanho do *gap*, o comprimento de onda ressonante permanece quase constante para a NBTE, mas para a NBT3PLE, o comprimento de onda ressonante diminui no seu segundo pico de ressonância, já a intensidade do campo elétrica deste segundo pico fica mais alta que a do primeiro pico. Os valores máximos da intensidade do campo elétrico  $|E_{\max}|^2$  e os comprimentos de onda ressonantes  $\lambda_{\text{res}}$  observados na Fig. 4.5 são mostrados na Tabela 4.5. Já a Tabela 4.6 mostra o percentual

da diferença dos valores nos *gaps*  $g = 15$  nm e  $g = 20$  nm em relação aos valores no *gap*  $g = 10$  nm.

Tabela 4.5. Valores máximos do campo elétrico  $|E_{\max}|^2$  e comprimentos de onda ressonantes  $\lambda_{\text{res}}$  no meio dos três *gaps* ( $g = 10, 15$  e  $20$  nm) para a NBTE e para a NBT3PLE

Nanoantena <i>bowtie</i>	$g = 10$ nm		$g = 15$ nm		$g = 20$ nm	
	$ E_{\max} ^2$	$\lambda_{\text{res}}$ (nm)	$ E_{\max} ^2$	$\lambda_{\text{res}}$ (nm)	$ E_{\max} ^2$	$\lambda_{\text{res}}$ (nm)
NBTE	12133	830	4129	802	1952	797
NBT3PLE	24964	702	2864	847	1998	825

Tabela 4.6. Percentual da diferença entre os valores máximos da intensidade do campo elétrico e comprimentos de onda ressonantes nos *gaps*  $g = 15$  nm e  $20$  nm em relação aos valores no *gap*  $g = 10$  nm

Nanoantena <i>bowtie</i>	Diferença em relação a $g = 10$ nm			
	$g = 15$ nm		$g = 20$ nm	
	$ E_{\max} ^2$	$\lambda_{\text{res}}$	$ E_{\max} ^2$	$\lambda_{\text{res}}$
NBTE	66% <	3% <	84% <	4% <
NBT3PLE	89% <	21% >	92% <	18% >

#### 4.3.1.1.2 Influência de um Substrato de SiO<sub>2</sub>

A intensidade do campo elétrico próximo foi analisada para a NBT3PLE sobre um substrato de dióxido de silício (SiO<sub>2</sub>) de espessura igual a 60 nm. Sabe-se que a presença de um dielétrico sempre desloca a resposta óptica das ressonâncias para o vermelho, mas esses resultados são discutidos a fim de apresentar uma análise quantitativa sobre o caso desta NBO com um vértice formado por três pontas. A Tabela 4.7 mostra as propriedades do SiO<sub>2</sub>.

Tabela 4.7. Propriedades do Dióxido de Silício (SiO<sub>2</sub>)

Propriedades do Dióxido de Silício (SiO <sub>2</sub> )	
Permissividade elétrica	4,2
Permeabilidade magnética	1
Densidade	2200 kg/m <sup>3</sup>
Condutividade térmica	1,4 W/K.m
Capacidade térmica	0,730 kJ/K.kg
Difusividade térmica	$8,71731 \times 10^{-7}$ m <sup>2</sup> /s

Na Fig. 4.6, pode-se ver que quando a NBT3PLE é colocada sobre o substrato, sua intensidade de campo elétrico diminui 48% e seu comprimento de onda ressonante aumenta 39%, comparados com aqueles apresentados pela NBT3PLE sem o substrato.

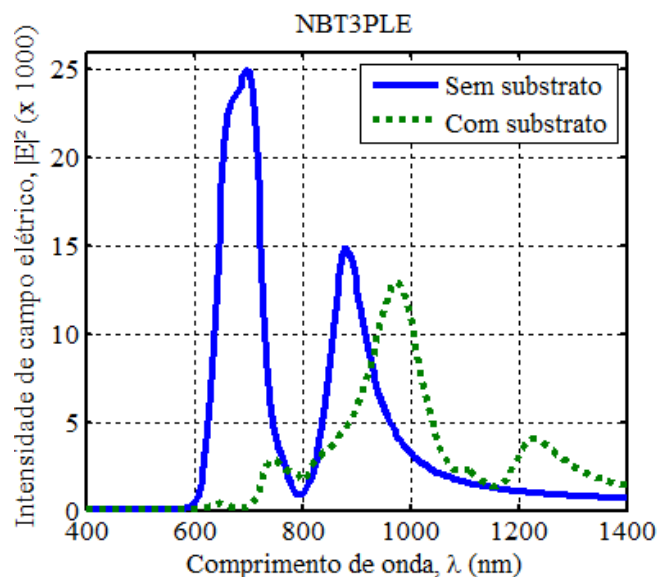


Figura 4.6. Intensidade do campo elétrico  $|E|^2$  no ponto no meio do *gap* para a NBT3PLE com e sem o substrato de  $\text{SiO}_2$ .

Os valores máximos da intensidade do campo elétrico  $|E_{\text{max}}|^2$  e os comprimentos de onda ressonantes  $\lambda_{\text{res}}$  observados na Fig. 4.6 são mostrados na Tabela 4.8, enquanto que a Tabela 4.9 mostra o percentual da diferença entre esses valores sem o substrato em relação aos valores com o substrato.

Tabela 4.8. Valores máximos da intensidade do campo elétrico  $|E_{\text{max}}|^2$  e comprimentos de onda ressonantes  $\lambda_{\text{res}}$  para a NBT3PLE com e sem o substrato de  $\text{SiO}_2$

Nanoantena <i>bowtie</i>	Sem substrato		Com substrato	
	$ E_{\text{max}} ^2$	$\lambda_{\text{res}}$ (nm)	$ E_{\text{max}} ^2$	$\lambda_{\text{res}}$ (nm)
NBT3PLE	24964	702	12998	975

Tabela 4.9. Percentual da diferença entre os valores máximos da intensidade do campo elétrico e comprimentos de onda ressonantes sem o substrato em relação aos valores no com o substrato de  $\text{SiO}_2$

Nanoantena <i>bowtie</i>	Diferença em relação ao “sem substrato”	
	Com substrato	
	$ E_{\text{max}} ^2$	$\lambda_{\text{res}}$
NBT3PLE	48% <	39% >

#### 4.3.1.2 Distribuições Espaciais do Campo Elétrico Próximo

Para analisar a concentração do campo elétrico próximo ao longo do *gap* das NBOs mostradas na Fig. 4.1, sua distribuição espacial no plano  $xy$  ( $z = 0$ ) é ilustrada na Fig. 4.7.

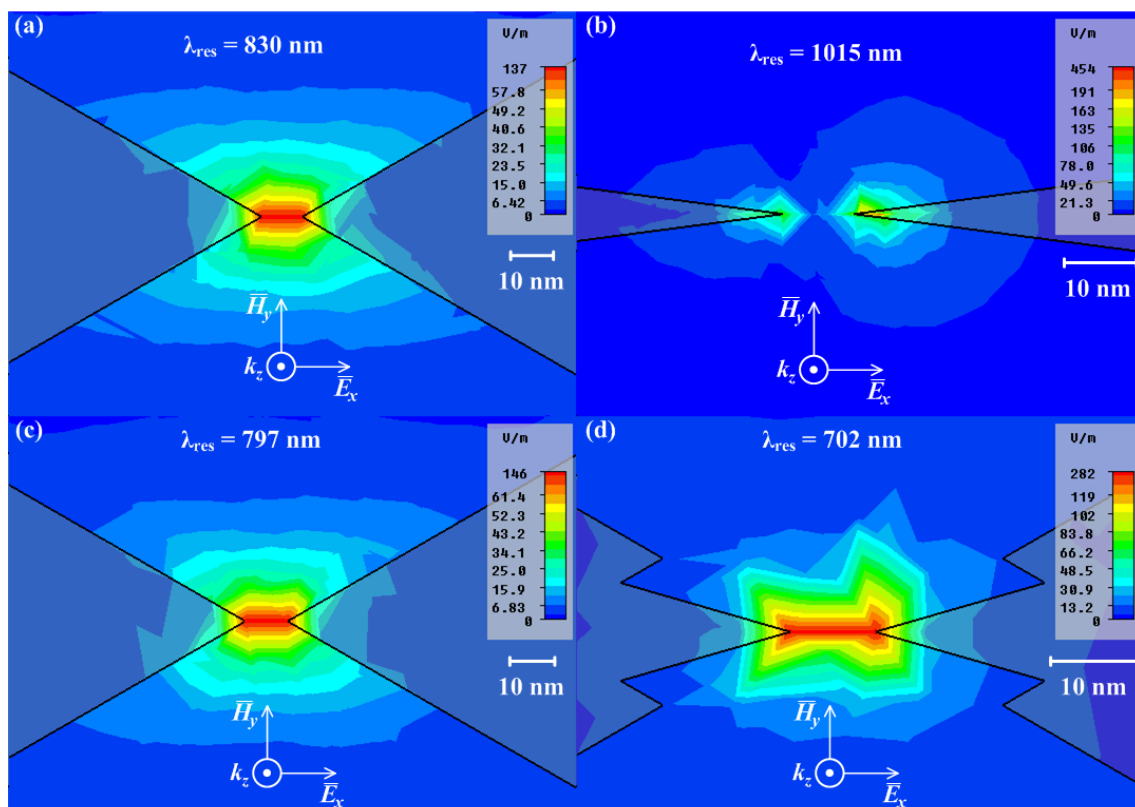


Figura 4.7. Distribuição espacial do campo elétrico  $|E|$  no plano  $xy$  ( $z = 0$ ) para (a) NBTE, (b) NBTC, (c) NBTLE e (d) NBT3PLE.

Pode-se ver que a NBTC (Fig. 4.7b) apresenta campo elétrico mais confinado em suas pontas posicionadas no eixo  $x$ , já que elas são mais acentuadas. Conseqüentemente, esta NBO tem concentração mais baixa de campo no meio do *gap*. Por outro lado, as outras NBOs analisadas tem campo elétrico mais distribuído uniformemente ao longo do *gap*. Analisou-se também a distribuição espacial do campo elétrico na NBTE e na NBT3PLE no plano  $yz$  ( $x = 0$ ) e no plano  $xz$  ( $y = 0$ ), ilustradas na Fig. 4.8 e na Fig. 4.9, respectivamente.

Na Fig. 4.8, para a NBTE e para a NBT3PLE, pode-se observar que a distribuição do campo elétrico é mais alta no lado esquerdo das NBOs, onde a onda plana incide. É possível observar também diferenças nessas distribuições, as quais estão mais evidentes na Fig. 4.9.

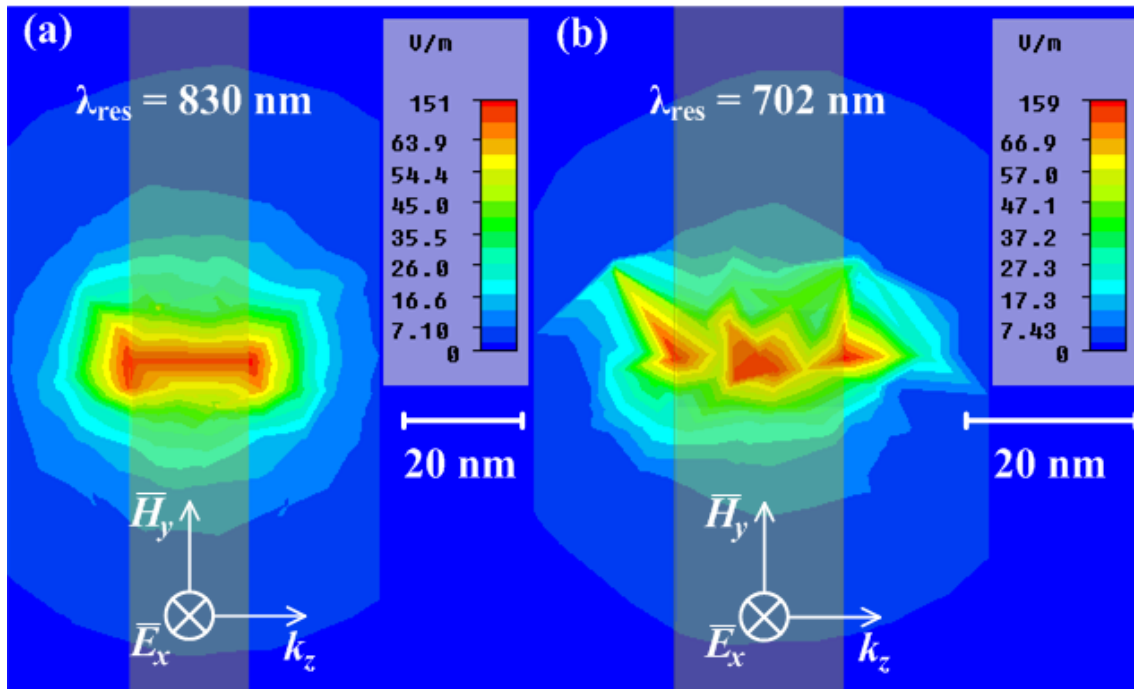


Figura 4.8. Distribuição espacial do campo elétrico  $|E|$  no plano  $yz$  ( $x = 0$ ) para (a) NBTE e (b) NBT3PLE.

Examinando a Fig. 4.9, para a NBTE, é visto uma distribuição uniforme de campo ao longo do *gap*. Para a NBT3PLE, essa distribuição é mais alta no meio do *gap*, onde  $z = 0$ , e nos cantos acima e abaixo do mesmo. Acredita-se que isso é devido à influência das duas pontas laterais próximas da ponta do meio e, conseqüentemente, esta NBO tem maior concentração de campo elétrico próximo.

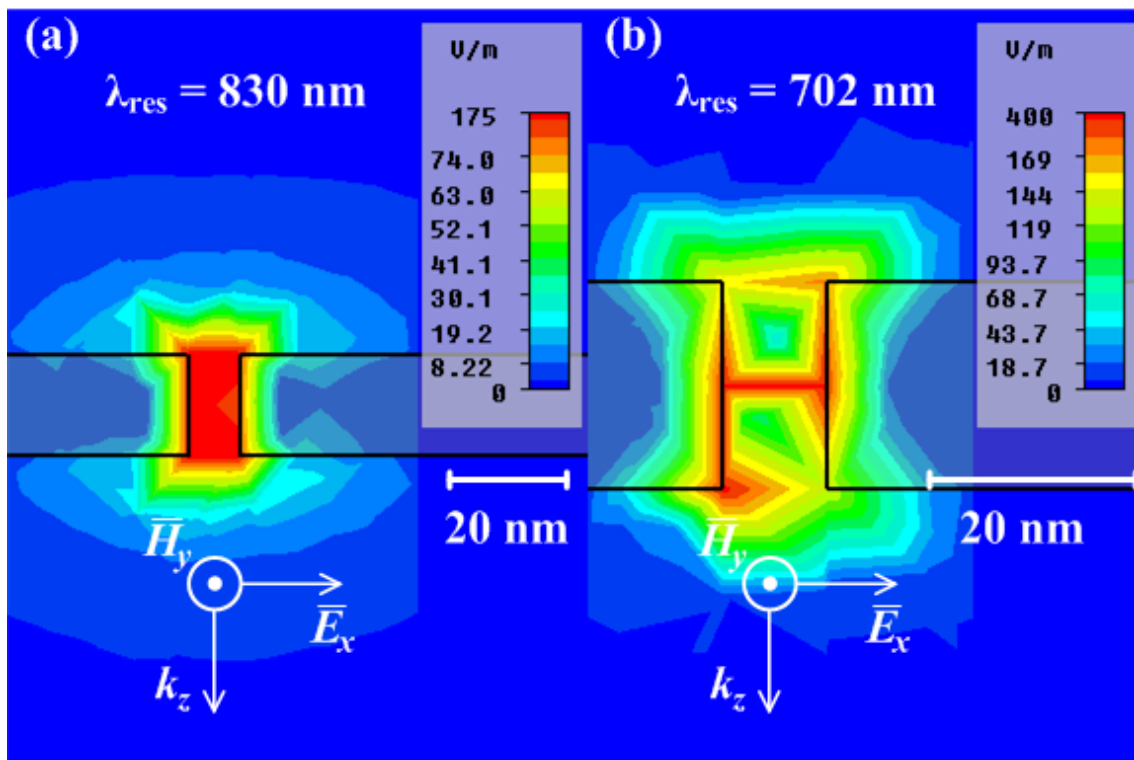


Figura 4.9. Distribuição espacial do campo elétrico  $|E|$  no plano  $xz$  ( $y = 0$ ) para (a) NBTE e (b) NBT3PLE.



### 4.3.1.3 Densidades de Corrente

A densidade de corrente dentro da NBTE e da NBT3PLE foi analisada no plano  $xy$  ( $z = 0$ ). Suas setas são ilustradas na Fig. 4.10.

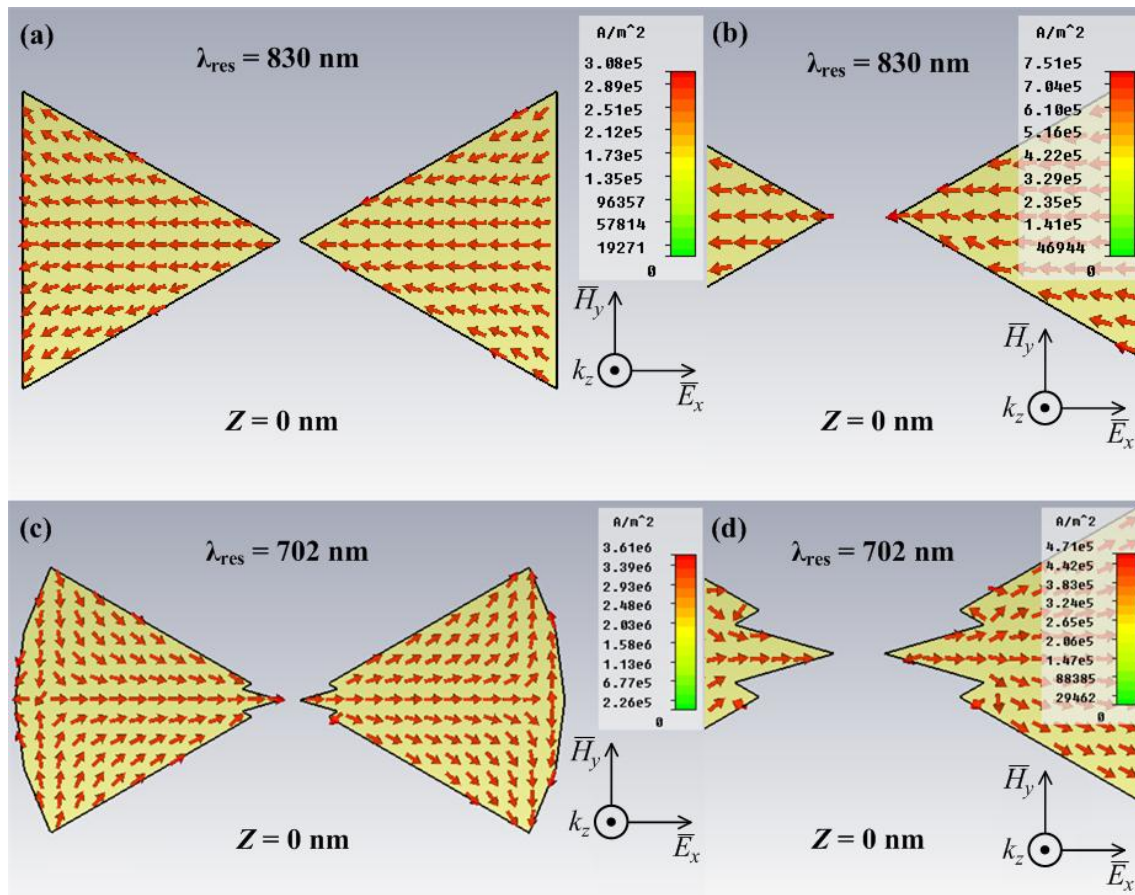


Figura 4.10. Densidade de corrente no plano  $xy$  ( $z = 0$ ): (a) NBTE, (b) ponta de NBTE, (c) NBT3P105LE, (d) ponta de NBT3P105LE.

Para o plano  $xy$  ( $z = 0$ ), para a NBTE (Fig. 4.10a), é visto que as setas da corrente na ponta de ambas as NPOs que a compõem têm o mesmo sentido da direita para a esquerda. Para o caso da NBT3PLE (Fig. 4.10c), é possível notar que as setas da corrente nas pontas de suas NPOs têm sentidos opostos, indo em direção ao centro do *gap* (Fig. 4.10d), intensificando o campo elétrico próximo nesse *gap*.

### 4.3.1.4 Diagramas de Campo Distante

Para analisar o comportamento das NBOs da Fig. 4.1 na região de campo distante, investigou-se a variação dos valores máximos da seção reta de espalhamento ( $SCS_{max}$ ) dessas NBOs. Este parâmetro tem a mesma definição da seção reta radar ( $RCS$ ), descrita em [4]. A Fig. 4.11a representa esta variação na direção  $+z$  *versus* comprimento de onda. O comportamento ressonante das NBOs na região de campo próximo e na região de campo distante é diferente. Na região de campo próximo, o campo evanescente é

predominante e no campo distante, existe apenas o campo de radiação [5]. Analisando a Fig. 4.11a, pode-se ver que a NBTE apresenta a maior  $SCS_{max}$  na ressonância, porque ela tem a maior área e a NBTC apresenta a menor  $SCS_{max}$ , porque ela tem a menor área. A NBTC também possui seu lóbulo principal suavemente deslocado para a esquerda (direção  $-x$ ).

Os diagramas de radiação das NBOs, onde  $U$  é a densidade de potência normalizada em dB [4], são mostrados na Fig. 4.11b. Estes diagramas, traçados no plano  $xz$ , foram calculados para os comprimentos de onda ressonantes apresentados na Tabela 4.1.

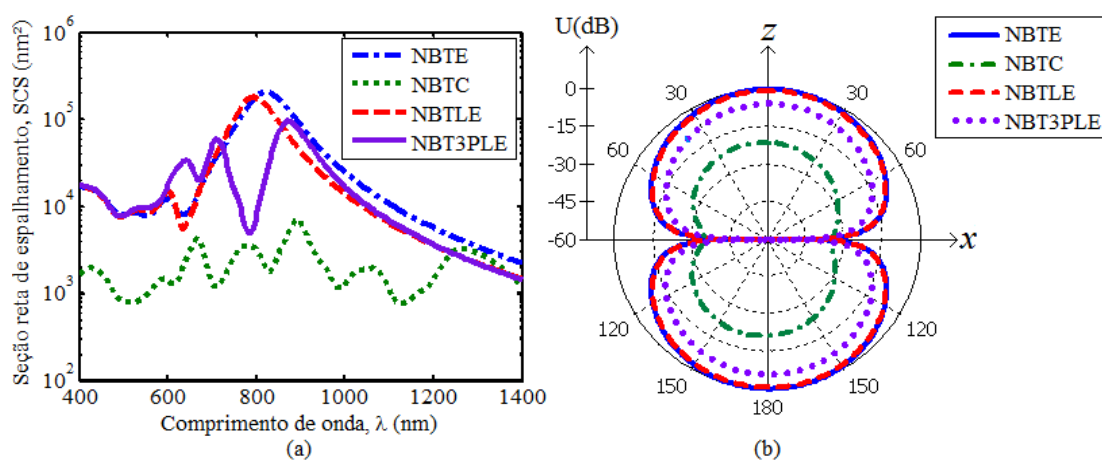


Figura 4.11. (a) Seções retas de espalhamento na direção  $+z$  versus comprimento de onda. (b) Diagramas de intensidade de radiação  $U(\theta, \phi)$  das NBOs no plano  $xz$ , em seus respectivos comprimentos de onda ressonantes apresentados na Tabela 4.1. Estes diagramas foram normalizados com a intensidade máxima de radiação da NBTE.

#### 4.4 Nanoantenas *Bowtie* Triangulares de Lado Encurvado e com Três Pontas

A Fig. 4.12 mostra as NBOs formadas pelas NPOs apresentadas nas Figs. 3.8a-d, cujas geometrias são formadas pela variação de  $W_T$ . A Fig. 4.12a corresponde a NBT3P60LE ( $W_T = 60$  nm), a Fig. 4.12b mostra a NBT3P75LE ( $W_T = 75$  nm), a Fig. 4.12c apresenta a NBT3P90LE ( $W_T = 90$  nm) e a Fig. 4.12d é a NBT3P105LE ( $W_T = 105$  nm). Esta última é a NBO mostrada na Fig. 4.1d. Todas as geometrias da Fig. 4.12 têm largura  $W$  e raio de curvatura  $R$  iguais a 138,6 nm.

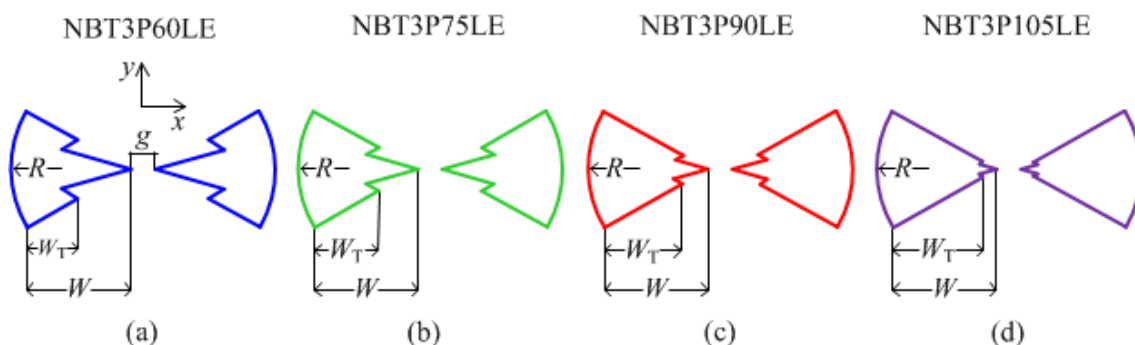


Figura 4.12. NBT3PLEs analisadas:  $g = 10$  nm,  $W = R = 138,6$  nm; (a) NBT3P60LE ( $W_T = 60$  nm), (b) NBT3P75LE ( $W_T = 75$  nm), (c) NBT3P90LE ( $W_T = 90$  nm) e (d) NBT3P105LE ( $W_T = 105$  nm).

#### 4.4.1 Resultados Numéricos

##### 4.4.1.1 Respostas Ressonantes do Campo Elétrico Próximo

Examinando os resultados na Fig. 4.13, é possível observar mais de um pico de ressonância para as NBOs mostradas na Fig. 4.12.

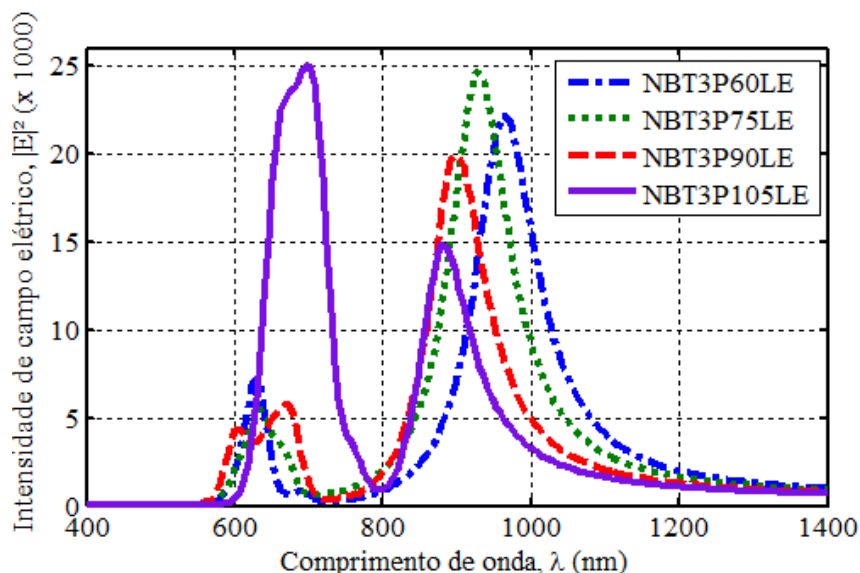


Figura 4.13. Intensidade do campo elétrico  $|E|^2$  no ponto no meio do *gap* para as NBOs ilustradas na Fig. 4.12.

Assim como acontece com as NPOs apresentadas no Capítulo 3, o pico de ressonância do lado esquerdo, entre  $600\text{nm} < \lambda < 700\text{nm}$ , se torna mais alto com o aumento de  $W_T$  e o pico de ressonância do lado direito, entre  $800\text{nm} < \lambda < 900\text{nm}$ , é gerado pela ponta do meio. A NBT3P105LE apresenta a maior intensidade de campo elétrico e o menor comprimento de onda ressonante, comparada com as outras NBOs da Fig. 4.12. Sua intensidade de campo elétrico é 106% mais alta e seu comprimento de onda é 15% menor que aqueles apresentados pela NBTE (Fig. 4.1a).

Os valores máximos da intensidade do campo elétrico  $|E_{\text{max}}|^2$  e os comprimentos de onda ressonantes  $\lambda_{\text{res}}$  vistos na Fig. 4.13 são mostrados na Tabela 4.10, enquanto que

a Tabela 4.11 mostra o percentual da diferença entre esses valores em relação aos apresentados pela NBTE.

Tabela 4.10. Valores máximos de intensidade do campo elétrico  $|E_{\max}|^2$  e comprimentos de onda ressonantes  $\lambda_{\text{res}}$  das NBOs ilustradas na Fig. 4.12

Nanoantena <i>bowtie</i>	Primeiro pico		Segundo pico	
	$ E_{\max} ^2$	$\lambda_{\text{res}}$ (nm)	$ E_{\max} ^2$	$\lambda_{\text{res}}$ (nm)
NBT3P60LE	7298	629	22156	964
NBT3P75LE	5491	635	24649	936
NBT3P90LE	5837	668	19881	903
NBT3P105LE	24964	702	14884	880

Tabela 4.11. Percentual da diferença entre os valores máximos da intensidade do campo elétrico e comprimentos de onda ressonantes das NPOs ilustradas na Fig. 4.12 em relação aos valores apresentados pela NBTE (Fig. 4.1a)

Nanoantena <i>bowtie</i>	Diferença em relação a NBTE			
	Primeiro pico		Segundo pico	
	$ E_{\max} ^2$	$\lambda_{\text{res}}$	$ E_{\max} ^2$	$\lambda_{\text{res}}$
NBT3P60LE	40% <	24% <	83% >	16% >
NBT3P75LE	55% <	23% <	103% >	13% >
NBT3P90LE	52% <	20% <	64% >	9% >
NBT3P105LE	106% >	15% <	23% >	6% >

#### 4.4.1.2 Distribuições Espaciais do Campo Elétrico Próximo

A Fig. 4.14 ilustra a distribuição espacial do campo elétrico próximo no plano  $xy$  ( $z = 0$ ), ao longo do *gap* das NBOs mostradas na Fig. 4.12.

Examinando a Fig. 4.14, pode-se observar que estas NBOs têm distribuição de campo mais uniforme ao longo do *gap*. A fim de confirmar esta observação, analisou-se também a distribuição espacial do campo elétrico nestas NBOs no plano  $yz$  ( $x = 0$ ) e no plano  $xz$  ( $y = 0$ ), ilustradas pelas Fig. 4.15 e Fig. 4.16, respectivamente.

Na Fig. 4.15, pode-se ver que a distribuição de campo elétrico é mais alta no lado esquerdo das NBOs, onde a onda plana incide. Também é possível observar diferenças entre essas distribuições, as quais estão mais evidentes na Fig. 4.16.

A Fig. 4.16 mostra uma distribuição uniforme do campo elétrico ao longo do *gap* no plano  $yz$ , para a NBT3P75LE (Fig. 4.16b). Para a NBT3P60LE (Fig. 4.16a) e para a NBT3P105LE (Fig. 4.16d), a distribuição do campo elétrico é uniforme no meio do *gap*, onde  $z = 0$ , e também nos cantos acima e abaixo desse meio. Porém, a intensidade do campo da NBT3P60LE é mais baixa que a da NBT3P105LE. Isso pode ser explicado devido às pontas laterais da NBT3P60LE não estarem tão próximas da

ponta do meio, como acontece na NBT3P105LE. Para a NBT3P90LE (Fig. 4.16c), a distribuição do campo elétrico é maior apenas nos cantos acima e abaixo de  $z = 0$  nm.

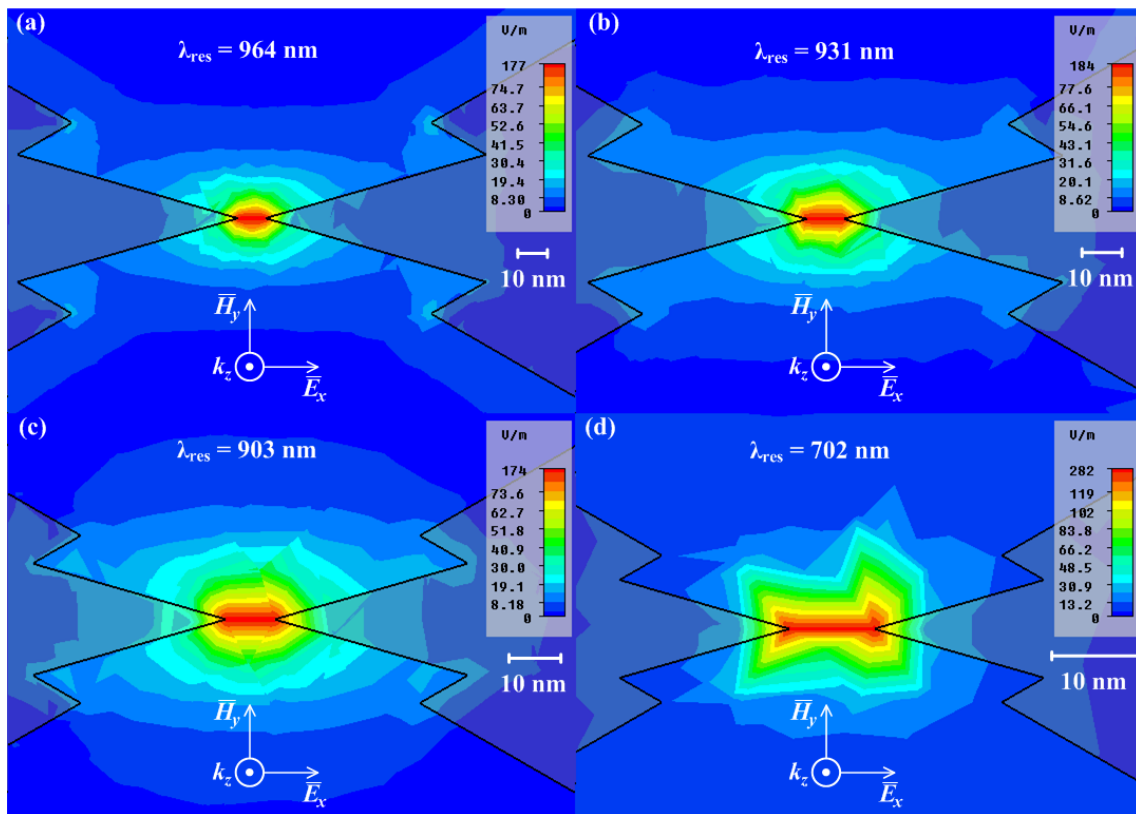


Figura 4.14. Distribuição espacial do campo elétrico  $|E|$  no plano  $xy$  ( $z = 0$ ) para (a) NBT3P60LE, (b) NBT3P75LE, (c) NBT3P90LE e (d) NBT3P105LE.

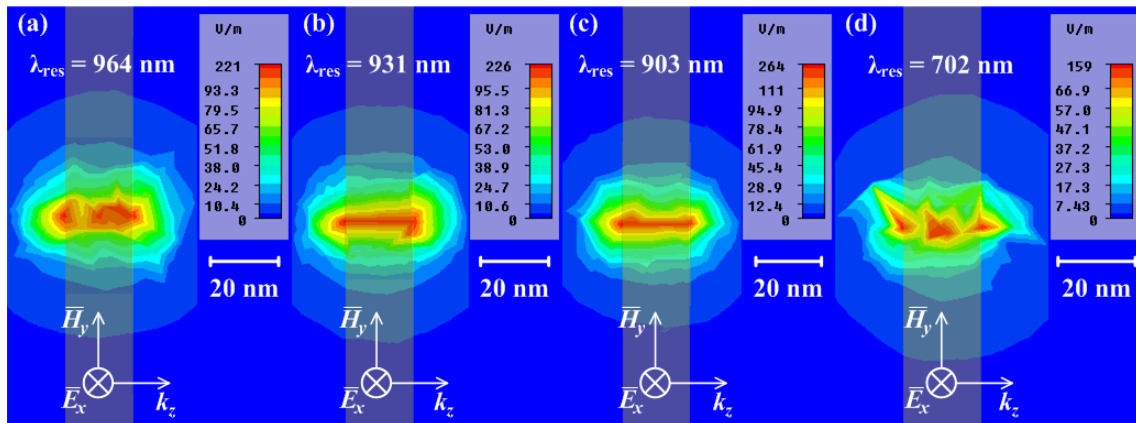


Figura 4.15. Distribuição espacial do campo elétrico  $|E|$  no plano  $yz$  ( $x = 0$ ) para (a) NBT3P60LE, (b) NBT3P75LE, (c) NBT3P90LE e (d) NBT3P105LE.

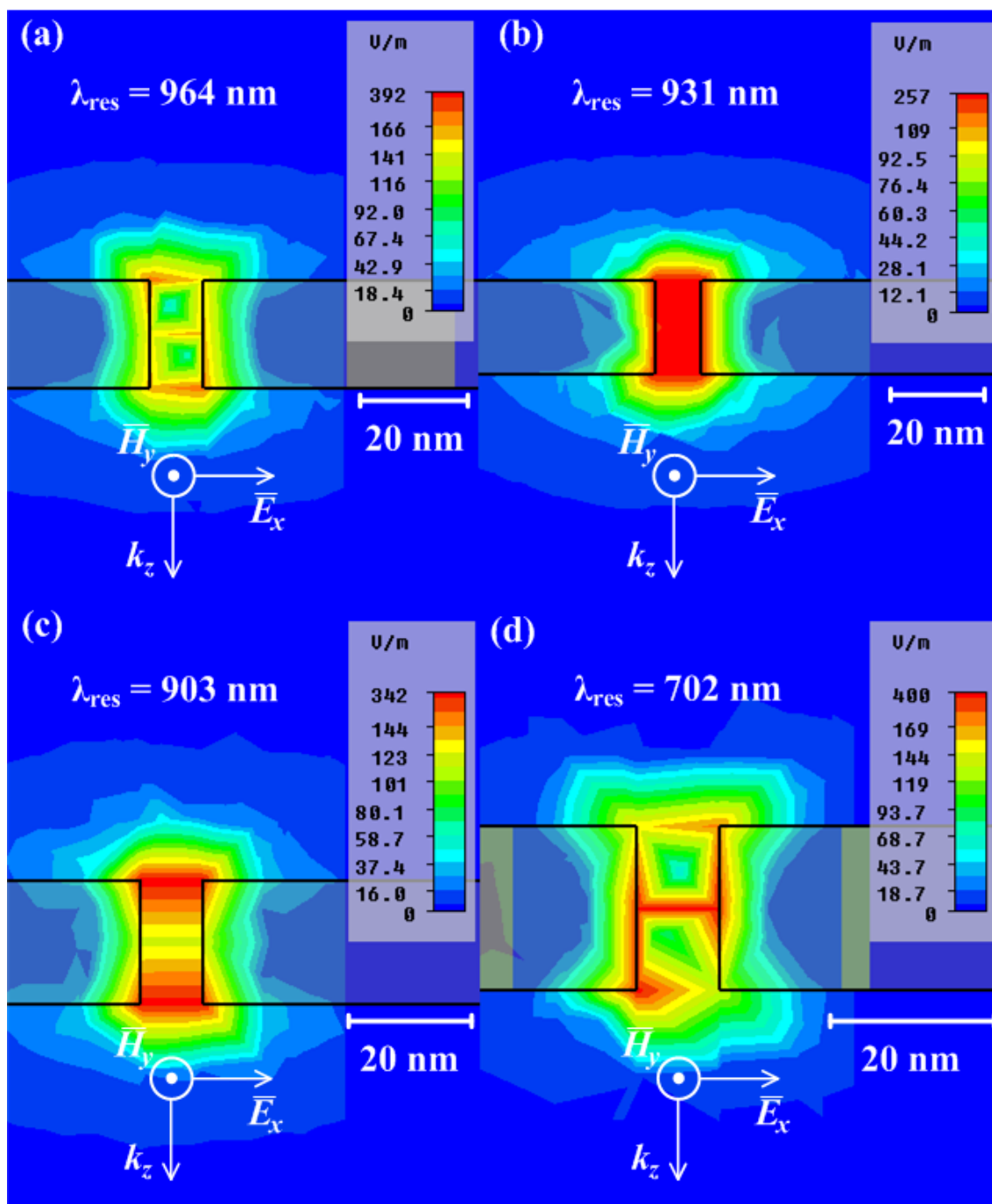


Figura 4.16. Distribuição espacial do campo elétrico  $|E|$  no plano  $xz$  ( $y = 0$ ) para (a) NBT3P60LE, (b) NBT3P75LE, (c) NBT3P90LE e (d) NBT3P105LE.

#### 4.4.1.3 Densidade de Corrente

A densidade de corrente também foi investigada dentro da NBT3P75LE (Fig. 4.17a) e da NBT3P90LE (Fig. 4.17c) no plano  $xy$  ( $z = 0$ ). No caso da NBT3P75LE, as setas da corrente na ponta de ambas as NPOs que a compõem tem sentido da esquerda para a direita (Fig. 4.17b).

Já no caso da NBT3P90LE, é possível notar que as setas da corrente na ponta de ambas as NPOs também tem sentido da direita para a esquerda (Fig. 4.17d).



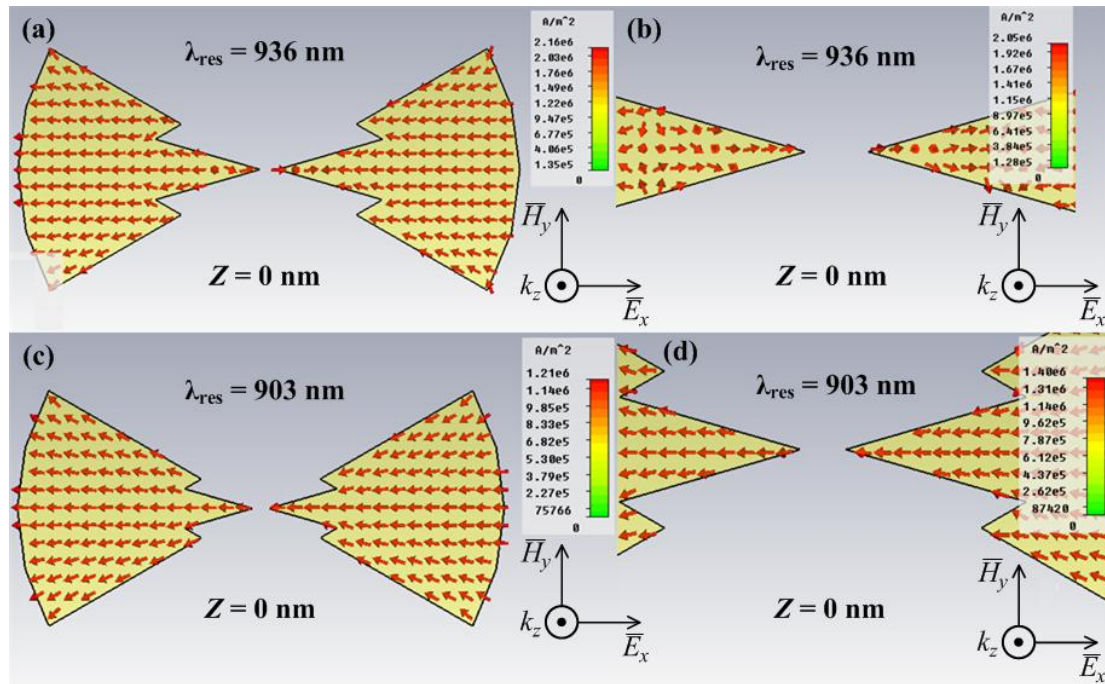


Figura 4.17. Densidade de corrente no plano  $xy$ : (a) NBT3P75LE ( $z = 0$ ), (b) ponta de NBT3P75LE ( $z = 0$ ), (c) NBT3P90LE ( $z = 0$ ), (d) ponta de NBT3P90LE ( $z = 0$ ).

#### 4.4.1.4 Diagramas de Campo Distante

A Fig. 4.18a representa a variação dos valores máximos de seção reta de espalhamento ( $SCS_{max}$ ) na direção  $+z$  versus comprimento de onda para NBOs ilustradas na Fig. 4.12. Analisando a Fig. 4.18a, pode-se ver que todas as NBOs têm a mesma forma de onda de  $SCS_{max}$ . A NBT3P105LE possui a maior  $SCS_{max}$  na ressonância porque ela tem a maior área e a NBT3P60LE possui a menor  $SCS_{max}$ , já que ela tem a menor área entre as NBOs da Fig. 4.12. Como na região de campo próximo, essas NBOs também possuem mais de um pico de ressonância na região de campo distante. A Fig. 4.18b representa os diagramas de radiação normalizados das NBOs da Fig. 4.12.

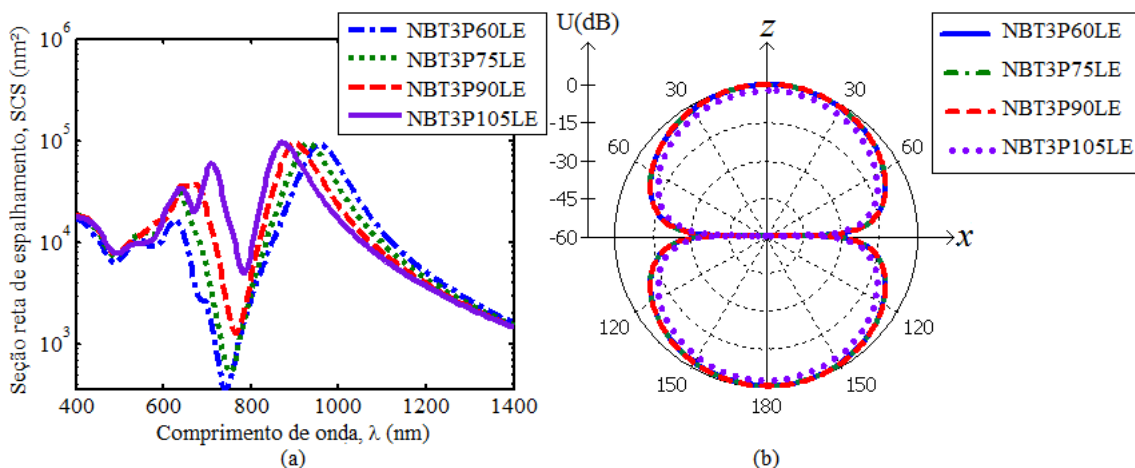


Figura 4.18. (a) Seções retas de espalhamento na direção  $+z$  versus comprimento de onda. (b) Diagramas de intensidade de radiação  $U(\theta, \phi)$  das NBOs no plano  $xz$ , em seus respectivos comprimentos de onda ressonantes apresentados na Tabela 4.10. Estes diagramas foram normalizados com a máxima intensidade de radiação da NBT3P90LE.

## 4.5 Referências

- [1] L. Novotny and B. Hecht, *Principles of Nano-Optics*.: Cambridge University Press, 2006.
- [2] P. Biagioni, J.-S. Huang, and B. Hecht, "Nanoantennas for visible and infrared," *Reports on Progress in Physics*, vol. 75, pp. 1-40, 2012.
- [3] (2012) CST MWS®. [Online]. <http://www.cst.com/>
- [4] C. A. Balanis, *Antenna Theory: Analysis and Design*, 3rd ed. New Jersey, USA: John Wiley, 2005.
- [5] J. Aizpurua, G. W. Bryant, L. J. Richter, and F. J. G. Abajo, "Optical properties of coupled metallic nanorods for field-enhanced spectroscopy," *Physical Review B*, vol. 71, pp. 235420 - 235420-13, Jun. 2005.



## CAPÍTULO 5

### CONCLUSÕES

#### 5.1 Considerações Finais

Neste trabalho foi apresentada uma análise comparativa das propriedades ressonantes de nanopartículas e de nanoantenas *bowtie* de ouro com novas geometrias triangulares. Os resultados numéricos foram obtidos nas regiões do visível e do infravermelho próximo do espectro eletromagnético, simulados pela técnica de integração finita.

No Capítulo 3 foram apresentadas as novas geometrias propostas para nanopartículas de ouro isoladas. Os resultados numéricos obtidos para cada uma delas foram comparados com os resultados obtidos para a nanopartícula triangular equilátera, muito explorada em diversos trabalhos encontrados na literatura. Essa comparação foi feita com o intuito de destacar a relevância de se adotar essas novas geometrias em projetos e aplicações envolvendo nanoestruturas. As novas geometrias triangulares com um vértice formado por três pontas e com um de seus lados encurvado apresentaram, em média, campo elétrico próximo três vezes mais intenso que o apresentado pela geometria triangular equilátera, além de mostrarem mais de um pico de ressonância.

No Capítulo 4 foram apresentadas as nanoantenas *bowtie* de ouro com as novas geometrias triangulares propostas. Essas nanoantenas possuem campo elétrico próximo duas vezes mais alto que os das nanoantenas triangulares equiláteras (convencionais). A presença de um substrato de dióxido de silício também foi analisada e os resultados mostraram que seu pico de ressonância diminuiu e se deslocou para o vermelho (*redshift*) em torno de 40 e 45%. As seções retas de espalhamento para essas novas nanoantenas também são maiores que as das nanoantenas triangulares equiláteras (convencionais), porém seu lóbulo principal no diagrama de radiação é menor.

A distribuição espacial do campo elétrico próximo e a densidade de corrente dentro das nanoestruturas de ouro apresentadas neste trabalho são bastante complexas. Os resultados mostraram diferentes distribuições de campo e de corrente dentro das novas geometrias triangulares, portanto, é preciso realizar um estudo mais completo a respeito dessas propriedades.

Entende-se que ainda existem limitações e custos de fabricação de nanopartículas com pontas agudas. Geralmente estas nanopartículas são fabricadas com pontas arredondadas cujo raio de curvatura é no mínimo igual a 2 nm, porém, acredita-se que, com o avanço das técnicas de fabricação, este problema será resolvido no

decorrer do tempo. Pode-se concluir, então, que as novas geometrias triangulares com campo elétrico próximo fortemente realçado podem servir para a modelagem, fabricação e projeto de nanopartículas e de nanoantenas *bowtie* de ouro para diferentes aplicações, tais como microscopia e sensores de fibra óptica. As propostas para trabalhos futuros são apresentadas na seção seguinte.

## 5.2 Trabalhos Futuros

A pesquisa desenvolvida e apresentada neste trabalho mostrou resultados que ainda precisam de uma análise mais aprofundada para o completo entendimento das propriedades ressonantes de nanoestruturas de ouro de geometrias complexas, já que tais propriedades dependem diretamente dessas geometrias. Portanto, a análise desenvolvida neste trabalho deve ser aprofundada em trabalhos futuros. As atividades propostas são:

- Investigar a densidade de corrente em diferentes fases de oscilação da onda eletromagnética incidente e, conseqüentemente, a concentração de carga dentro das nanopartículas;
- Fazer o cálculo de autovalores para estudar mais detalhadamente os diferentes modos presentes em nanoestruturas ressonantes propostas neste trabalho;
- Investigar as propriedades ressonantes destas geometrias utilizando nanopartículas compostas por outros metais, tais como a prata e o cobre;
- Modelar *nanoshells* metálicos com as mesmas geometrias das nanopartículas de ouro, ou seja, uma nanopartícula metálica com um dielétrico circundante.

## 5.3 Publicações

Os resultados numéricos apresentados neste trabalho para as NPOs e para as NBOs com as novas geometrias triangulares propostas foram publicados nos seguintes artigos científicos:

- **Thaís L. T. dos Santos** ; Karlo Q. da Costa ; Victor Dmitriev . Comparative Near Field Analysis of Gold Nanodisks of Different Shapes. In: Latin America Optics & Photonics Conference, LAOP, 2010, Recife, PE, Brazil. OSA Technical Digest (CD), paper ThC4. Washington, DC, USA: Optical Society of America, OSA, 2010. Referências adicionais: Classificação do evento: Internacional; Brasil/ Inglês; Meio de divulgação: Vários; Homepage: <http://www.osa.org/laop>; ISSN/ISBN: 9781557529039.
- **Thaís L. T. dos Santos** ; Karlo Q. da Costa ; Victor Dmitriev . Comparative Electric Near Field Analysis of Gold Nanoparticles of Different Shapes. In: VI

Workshop on Semiconductors and Micro & Nano Technology, 2011, Campinas. WS SEMINATEC 2011. p. 37. Referências adicionais: Classificação do evento: Internacional; Brasil/ Inglês; Meio de divulgação: Impresso.

- **Thaís L. T. dos Santos** ; Karlo Q. da Costa ; Victor Dmitriev . Comparative Analysis of Gold Nanoparticles of Different Triangular Geometries with Higher Near-Field Enhancements. In: IEEE 3rd Latin-American Conference on Communications, IEEE LATINCOM, 2011, Belém,PA,Brazil. IEEE LATINCOM 2011: Sustainable Communications for a Green World, 2011. p. 1-4. Referências adicionais: Classificação do evento: Internacional; Brasil/ Inglês; Meio de divulgação: Digital; ISSN/ISBN: 9781467302777.
- **Thaís L. T. dos Santos** ; Victor Dmitriev ; Karlo Q. da Costa . Effects of Geometry, Substrate and Angles of Incidence on Resonant Properties of Gold Nanoparticles. In: The 2nd International Conference on Frontiers of Plasmonics, FOP2, 2012, Chengdu, Sichuan, China. The 2nd International Conference on Frontiers of Plasmonics: Program & Abstract Book, 2012. p. 24. Referências adicionais: Classificação do evento: Internacional; China/ Inglês; Meio de divulgação: Impresso.
- **Thaís L. T. dos Santos** ; Karlo Q. da Costa ; Victor Dmitriev . Effects of Modified Triangular Geometries on Resonant Properties of Gold Bowtie Nanoantennas. In: 15º Simpósio Brasileiro de Microondas e Optoeletrônica/ 10º Congresso Brasileiro de Eletromagnetismo, MOMAG, 2012, João Pessoa,PB,Brazil. MOMAG 2012, 2012. Referências adicionais: Classificação do evento: Nacional; Brasil/ Inglês; Meio de divulgação: Digital; Homepage: <http://momag2012.com.br>.
- Victor Dmitriev ; **Thaís L. T. dos Santos** ; Karlo Q. da Costa . Resonant Properties of Gold Bowtie Nanoantennas of Modified Triangular Geometries for Optical Sensors Applications. Journal of Microwave, Optoelectronics and Electromagnetics Applications – Special Issue on Fiber Optic Sensors, JMOE FOS. Aceito para publicação.

As seguintes publicações foram obtidas por coautoria de artigos científicos de colegas pertencentes ao mesmo grupo de pesquisa na UFPA:

- Dionísio R. de S. Ribeiro ; Victor Dmitriev ; Bruno W. M. Lima ; **Thaís L. T. dos Santos** . Error Consideration Due to 2D Truncation of 3D FDTD Application to Indoor Environment in Microwave Region. In: 10th International Information and Telecommunication Technologies Conference, I2TS, 2011, Florianópolis, SC. 10th International Information and Telecommunication Technologies Conference, I2TS, 2011.
- Victor Dmitriev ; Fernando da S. Paixão ; Marcelo N. Kawaktsu ; **Thaís L. T. dos Santos** . Enhancement of Magneto-Optical Effect in Multilayer Heterostructures. In: The 2nd International Conference on Frontiers of Plasmonics, FOP2, 2012, Chengdu, Sichuan, China. The 2nd International Conference on Frontiers of Plasmonics: Program & Abstract Book, 2012. v. 2. p. 97.
- Karlo Q. da Costa ; Victor Dmitriev ; **Thaís L. T. dos Santos** ; Nadson W. P. de Souza ; Janílson L. de Souza ; Gustavo L. Silvano . Radiation and Absorption Properties of Gold Nanodipoles in Transmitting Mode. In: SBrT 2012 - XXX Simpósio Brasileiro de Telecomunicações, 2012, Brasília - DF. Anais do SBrT

2012 - XXX Simpósio Brasileiro de Telecomunicações, 2012. Referências adicionais: Classificação do evento: Nacional; Brasil/ Português; Meio de divulgação: Digital; Homepage: <http://www.sbirt.org.br/sbirt2012/>.

- Karlo Q. da Costa ; Victor Dmitriev ; **Thaís L. T. dos Santos** ; Nadson W. P. de Souza ; Janílson L. de Souza ; Gustavo L. Silvano . Simple and Efficient Computational Method to Analyze Cylindrical Plasmonic Nanoantennas. In: 15º Simpósio Brasileiro de Microondas e Optoeletrônica/ 10º Congresso Brasileiro de Eletromagnetismo, MOMAG, 2012, João Pessoa, PB, Brazil. MOMAG 2012, 2012.
- Karlo Q. da Costa ; Victor Dmitriev ; **Thaís L. T. dos Santos** ; Nadson W. P. de Souza ; Janílson L. de Souza ; Gustavo L. Silvano . Radiation and Absorption Properties of Gold Nanodipoles in Transmitting Mode. Journal of Communication and Information Systems, JCIS. Pré-selecionado para publicação.