

UNIVERSIDADE FEDERAL DE PERNAMBUCO  
CENTRO DE TECNOLOGIA E GEOCIÊNCIAS  
DEPARTAMENTO DE ELETRÔNICA E SISTEMAS  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA ELÉTRICA

ERNANDE FERREIRA DE MELO

OTIMIZAÇÃO DE SENSORES ÓPTICOS POR RESSONÂNCIA DE PLÁSMONS DE  
SUPERFÍCIE EM GRADES DE DIFRAÇÃO METALIZADAS

RECIFE

2013

ERNANDE FERREIRA DE MELO

OTIMIZAÇÃO DE SENSORES ÓPTICOS POR RESSONÂNCIA DE PLÁSMONS DE  
SUPERFÍCIE EM GRADES DE DIFRAÇÃO METALIZADAS

Tese submetida ao Programa de Pós-Graduação em  
ENGENHARIA ELÉTRICA da Universidade Federal de  
Pernambuco, como parte dos requisitos necessários à  
obtenção do grau de Doutor em ENGENHARIA  
ELÉTRICA.

Área de concentração: FOTÔNICA

Linha de pesquisa: SENSORES E INSTRUMENTAÇÃO  
ÓPTICA

Orientador: EDUARDO FONTANA, PhD

RECIFE

2013

Catálogo na fonte  
Bibliotecária Valdicéa Alves, CRB-4 / 1260

M528o      Melo, Ernande Ferreira de.  
                Otimização de sensores ópticos por ressonância de plásmons de superfície  
em grades de difração metalizadas / Ernande Ferreira de Melo - 2013.  
                88folhas, Il.; Tabs; Abr. e Sigl.  
  
                Orientador: Prof.º Dr. Eduardo Fontana.  
  
                Tese (Doutorado) – Universidade Federal de Pernambuco. CTG. Programa  
de Pós-Graduação em Engenharia Elétrica, 2013.  
                Inclui Referencias e Apêndices.  
  
                1. Engenharia Elétrica. 2. Sensor óptico. 3. Ressonância de Plásmons  
de superfície (RPS). 4. Grade de difração. 5. Otimização. I. Fontana, Eduardo  
(Orientador). II. Título.

UFPE

621.3 CDD (22. ed.)

BCTG/2017 - 349



Universidade Federal de Pernambuco  
*Pós-Graduação em Engenharia Elétrica*

PARECER DA COMISSÃO EXAMINADORA DE DEFESA DE  
TESE DE DOUTORADO

**ERNANDE FERREIRA DE MELO**

TÍTULO

**“OTIMIZAÇÃO DE SENSORES ÓPTICOS POR RESSONÂNCIA DE PLÁSMONS  
DE SUPERÍCIE EM GRADES DE DIFRAÇÃO METALIZADAS”**

A comissão examinadora composta pelos professores: EDUARDO FONTANA, DES/UFPE; FREDERICO DIAS NUNES, DES/UFPE; SERGIO CAMPELLO OLIVEIRA, POLI/UPE; MARCELO SAMPAIO DE ALENCAR, DEE/UFCG e EVANDRO CONFORTI, DMO/UNICAMP, sob a presidência do primeiro, consideram o candidato **ERNANDE FERREIRA DE MELO APROVADO.**

Recife, 26 de agosto de 2013.

---

**CECÍLIO JOSÉ LINS PIMENTEL**  
Coordenador do PPGE

---

**EDUARDO FONTANA**  
Orientador e Membro Titular Interno

---

**SERGIO CAMPELLO OLIVEIRA**  
Membro Titular Externo

---

**FREDERICO DIAS NUNES**  
Titular Interno

---

**MARCELO SAMPAIO DE ALENCAR**  
Membro Titular Externo

---

**EVANDRO CONFORTI**  
Membro Titular Externo

*Dedico este trabalho à memória de  
Francisco Pedro de Melo.  
"pai, você foi meu herói"*

*Francisca Ferreira de Melo  
"mãe, você foi mãe até o final".*

## **AGRADECIMENTOS**

Agradecemos a todos que, direta ou indiretamente, ao longo destes cinco anos, ajudaram a manter-nos erguidos para que pudéssemos caminhar e chegar ao final deste projeto. Nominar a todos, parentes, amigos, suporte administrativo e professores, não caberia nesta página. Entretanto não poderíamos deixar de agradecer à Fundação Centro de Análise Pesquisa e Inovação Tecnológica - FUCAPI pelo apoio e suporte que nos foram prestados desde o início deste Projeto. Em especial, agradecemos ao professor Dr.Eduardo Fontana, que acreditou em nosso trabalho, tendo sido mais que um orientador, um amigo. Ao querido amigo e irmão Richard Douglas Dantas Costa que sempre esteve conosco desde o início, nos erguendo nas quedas. Também agradeço a José Eduardo Thomé Lopes (Dado), com quem aprendemos a simplicidade da vida e da engenharia e a amada esposa Solange Monteiro de Souza, um presente de Deus em nossa vida.

## RESUMO

Nesta tese é apresentada uma formulação para a análise das propriedades ópticas de estruturas multicamadas com interfaces de perfil periódico. Essa formulação é empregada no desenvolvimento de metodologia e algoritmos para projeto de sensores de máxima sensibilidade, baseados no efeito de Ressonância de Plásmons de Superfície (RPS) em grades metálicas. Para isso, foi desenvolvido um aplicativo *web* de projeto de grades metálicas otimizadas que pode ser executado remotamente. O aplicativo foi então utilizado para projetar novas configurações de sensores. Um dos projetos é dirigido à otimização de grades metálicas de forma a se observar o efeito de RPS sob incidência normal, com aplicações no desenvolvimento de biossensores ópticos com substratos descartáveis e de fácil leitura óptica. Além disso, biossensores ópticos em fibra óptica com incidência frontal interna podem também ser desenvolvidos. Em outra aplicação, utiliza-se a metodologia de otimização para determinar as condições ideais de operação para utilização de CDs e DVDs comerciais, metalizados, para sensoriamento óptico de larga escala, baseado em RPS.

**PALAVRAS-CHAVE:** Sensor Óptico, Ressonância de Plásmons de Superfície (RPS), Grade de Difração, Otimização.

## **ABSTRACT**

In this thesis a formulation is presented for the analysis of the optical properties of multilayer grating structures. This formulation is then used in the development of methods and algorithms for the design of surface plasmon resonance (SPR) sensors on metal gratings having maximum sensitivity. To accomplish this, a web application was developed for the project of optimized metal gratings that can be run remotely. The application was then used to design new sensor configurations. One of the projects is directed to the optimization of metal gratings to allow observing the SPR effect under normal incidence. This configuration finds applications in the development of SPR based biosensors using disposable substrates and simple reading optics. In addition, fiber optic sensors, having butt end metal surfaces, may also be developed. In another application, the optimization methodology was used to determine the ideal operating conditions for using commercial, metallized, CDs and DVDs, for SPR based, large scale optical sensing.

**KEY WORDS:** Optical sensor, Surface Plasmon Resonance (SPR), Diffraction Grating, Optimization.



## LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 2.1 -	Representação esquemática da estrutura de um sensor RPS .....	18
Figura 2.2 -	Configuração de prisma de acoplamento proposta por Andreas Otto .....	20
Figura 2.3 -	Configuração de prisma de acoplamento proposta por Kretschmann .....	23
Figura 2.4 -	Ilustração do processo de geração de ordens de difração em uma grade metálica de periodicidade, amplitude $h$ e espessura $d$ .....	24
Figura 2.5 -	Números de artigos publicados anualmente, no intervalo de 1960 a 2008, cujos títulos contêm as palavras “ <i>surface plasmon</i> ” .....	25
Figura 2.6 -	Representação esquemática de um biossensor baseado em RPS. Referência [25] .....	26
Figura 2.7 -	Configuração de sensor SPR em fibra ótica similar ao proposto por Jorgenson e Yee. Referência [10] .....	27
Figura 3.1 -	Esquema para uma grade unidimensional com uma interface dielétrico/metal tendo um perfil periódico de forma arbitrária .....	30
Figura 3.2 -	Análise Comparativa do modelo desenvolvido neste trabalho com os Métodos RCWA e Integral .....	42
Figura 4.1 -	Curva de RPS e parâmetros representativos na aproximação lorentziana .....	44
Figura 4.2 -	Aproximação lorentziana da curva de RPS na configuração de Kretschmann com o aumento do comprimento de onda	45
Figura 4.3 -	Configuração de interface simples para grade senoidal .....	47
Figura 4.4 -	Interface inicial do SPRinG .....	53
Figura 4.5 -	Opções do SPRinG para otimização do efeito RPS em grades de difração .....	53
Figura 4.6 -	Comparativo entre curvas de reflectância com e sem otimização .....	54
Figura 4.7 -	Variação da Sensibilidade $S$ com o comprimento de onda em grades otimizadas em interface simples Ar-Au, com incidência normal .....	55
Figura 4.8 -	Dependência com o comprimento de onda dos parâmetros ótimos de grade senoidal para interface Ar-Au .....	55
Figura 5.1 -	Representação esquemática da estrutura e geometria do CD-R utilizada no experimento. Referência [21] .....	58

Figura 5.2 -	Curva de reflectâncias do CD obtidas de modo experimental [21] .....	58
Figura 5.3 -	Curva experimental e curva teórica baseadas no modelo senoidal para reflectância de ordem zero, em CDs. ....	59
Figura 5.4 -	Modelo de grade poligonal proposto para estudo do efeito PRS em CDs .....	60
Figura 5.5 -	Comparativo entre curva teórica e experimental, do modelo poligonal proposto .....	62
Figura 5.6 -	Convergência da curva para $L = 2, 5, 10$ e $20$ .....	63
Figura 5.7 -	Sensibilidade espectral dos modelos de grades (a) senoidal (b) poligonal .....	64
Figura 6.1 -	Exemplo curva de reflectância otimizada para máxima sensibilidade em interface Ar-Au, para $\lambda = 850\text{nm}$ .....	66
Figura 6.2 -	Configurações propostas para RPS com incidência normal (a) externa e (b) interna .....	67
Figura 6.3 -	Variação da reflectância em função do índice de refração para incidência normal externa e $\lambda = 1000\text{nm}$ , em interface (a) Ar-Au. (b) Água-Au .....	68
Figura 6.4 -	Variação da reflectância para interface (a) Ar-Au (b), água/Na em incidência externa .....	69
Figura 6.5 -	Dependências espectrais (a) dos parâmetros ótimos e (b) da sensibilidade em grade de ouro para aplicações em meios aquosos .....	69
Figura 6.6 -	Dependências espectrais para incidência interna em meio gasoso (a) para a Sensibilidade (b) para os parâmetros ótimos $d$ e $h$ .....	70
Figura 6.7 -	Curva de reflectância em incidência normal interna com faixa dinâmica reduzida (a) meio gasoso (b) meio aquoso .....	71
Figura A1-	Grade com estrutura de multicamadas.....	75
Figura A2-	Descrição dos campos em meios adjacentes que têm a $i$ -ésima interface	76

## LISTA DE TABELAS

Tabela 3.1 -	Parâmetros utilizados na análise comparativa dos modelos [6] .....	42
Tabela 4.1 -	Parâmetros utilizados na aproximação lorentziana .....	45
Tabela 4.2 -	Procedimento de Otimização para um interface .....	51
Tabela 4.3 -	Procedimento de Otimização para duas interface .....	52
Tabela 4.4 -	Parâmetros utilizados na comparação entre as curvas com e sem otimização .....	54
Tabela 5.1 -	Parâmetros para obtenção da curva de reflectância mais próxima à curva experimental no modelo de grade poligonal .....	58
Tabela 6.1 -	Parâmetros de entrada e saída do SPRinG, referentes às curvas geradas e mostradas nas Figuras 6.3 e 6.4 .....	68

## LISTA DE SIGLAS

CD	Disco Compacto l
CD-R	Disco Compacto Gravável
CD-RW	Disco Compacto ReGravável
DVD	Disco de Vídeo Digital
KPS	Vetor de onda K do Plasmon de Superfície
PHP	Processador de Hipertexto
PS	Plasmon de Superfície
RPS	Ressonância de Plasmons de Superfície
RCWA	Análise Rigorosa de Ondas Acopladas
SPRinG	Surface Plasmon Resonance in Gratings
TE	Polarização Transverso Elétrico
TM	Polarização Transverso Magnético

## SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO .....	15
2	RESSONÂNCIA DE PLÁSMONS DE SUPERFÍCIE E APLICAÇÕES .....	17
2.1	<b>Fundamentos sobre Ressonância de Plasmons de Superfície .....</b>	<b>17</b>
2.2	<b>Técnicas de excitação de plásmons de superfície .....</b>	<b>20</b>
2.2.1	Técnicas de excitação por prisma .....	20
2.2.2	Técnicas de excitação por grade metálica .....	22
2.3	<b>Aplicações de sensores ópticos baseados em RPS .....</b>	<b>24</b>
2.3.1	Sensores baseados na configuração de Kretschmann .....	25
2.3.2	Sensores em fibra óptica .....	26
2.3.3	Sensores RPS em grade difração .....	27
3	MODELAGEM DO EFEITO DE RPS EM GRADES DE DIFRAÇÃO .....	29
3.1	<b>Modelagem de RPS em grade de difração .....</b>	<b>29</b>
3.2	<b>Reflexão e transmissão em uma interface de perfil periódico .....</b>	<b>30</b>
3.3	<b>Solução com truncamento para o sistema de equações .....</b>	<b>38</b>
3.4	<b>Análise da implementação da solução com truncamento para o sistema de equações .....</b>	<b>41</b>
4	METODOLOGIA DE OTIMIZAÇÃO DE GRADES METÁLICAS PARA SENSORES RPS .....	43
4.1	<b>Otimização na configuração de Kretschmann .....</b>	<b>43</b>
4.2	<b>Otimização em grades metálicas .....</b>	<b>46</b>
4.2.1	Curva de reflectância em interface senoidal simples .....	46
4.2.2	Determinação da periodicidade da grade ótima .....	48
4.2.3	Determinação da amplitude ótima .....	49
4.2.4	Medida da sensibilidade .....	49
4.3	<b>SPRinG .....</b>	<b>50</b>
4.3.1	Geração de curva de reflectância .....	50
4.3.2	Geração de grades otimizadas .....	51
4.3.3	Implementação .....	52
4.4	<b>Avaliação do processo de otimização .....</b>	<b>54</b>
5	GRADES POLIGONAIS .....	57
5.1	<b>Estrutura do CD. ....</b>	<b>57</b>

5.2	<b>Resultados experimentais .....</b>	<b>57</b>
5.3	<b>Modelagem de estrutura de CD como grade senoidal .....</b>	<b>59</b>
5.4	<b>Modelagem de estrutura de CD como grade poligonal .....</b>	<b>60</b>
5.5	<b>Resultado as implementação do modelo poligonal .....</b>	<b>61</b>
5.6	<b>Análise dos resultados .....</b>	<b>62</b>
5.7	<b>Determinação do comprimento de onda ótimo para o CD .....</b>	<b>63</b>
6	<b>PROPOSTA DE SENSORES OTIMIZADOS BASEADOS EM RPS COM INCIDÊNCIA NORMAL .....</b>	<b>65</b>
6.1	<b>RPS sob incidência normal .....</b>	<b>65</b>
6.2	<b>Possíveis configurações .....</b>	<b>66</b>
6.2.1	Efeito de RPS em filmes de ouro para incidência normal externa .....	67
6.2.2	Efeito de RPS em filmes de ouro para incidência normal interna .....	70
7	<b>CONCLUSÕES E PROPOSTA DE TRABALHOS FUTUROS .....</b>	<b>72</b>
	<b>REFERÊNCIAS .....</b>	<b>75</b>
	<b>APÊNDICES .....</b>	<b>78</b>
	<b>A - CÁLCULO DO MODELO PARA MÚLTIPLAS INTERFACES PERIÓDICAS .....</b>	<b>78</b>
	<b>B – PUBLICAÇÕES .....</b>	<b>89</b>

## 1 INTRODUÇÃO

Sensores ópticos baseados em RPS (Ressonância de Plásmons de Superfície)[1-3] são amplamente utilizados na detecção qualitativa e quantitativa de interações químicas e biomoleculares, com aplicações em ciências da saúde, na descoberta de drogas, no diagnóstico médico[4-6] e no monitoramento ambiental[7]. O efeito de RPS também tem aplicações em dispositivos de chaveamento óptico[8-9], em dispositivos sensores baseados em fibra óptica[10-15], entre outros usos[16].

O efeito de RPS pode ser observado em uma interface metal-dielétrico com o emprego de um prisma de acoplamento[17-19], para o caso de uma interface planar ou em superfícies não planares como, por exemplo, em grades de difração metálicas[19]. Sensores RPS baseados em acoplamento por prisma, na configuração de Kretschmann[18-19], são os mais encontrados nas aplicações práticas, possivelmente devido à complexidade do processo de fabricação de grades de difração, quando comparado ao uso de prisma de acoplamento, além de questões relacionadas ao desempenho, em termos de sensibilidade<sup>1</sup>.

Para o caso de interfaces planares, na configuração de Kretschmann, Fontana[20] obteve os parâmetros de desempenho que definem um sensor RPS com máxima sensibilidade perante variações no índice de refração do meio sob teste. Com o ângulo de incidência do feixe de luz sintonizado no ponto de máxima declividade da curva de ressonância, de forma a se obter máxima sensibilidade, o autor determinou a dependência espectral da espessura do filme que fornece a maior sensibilidade do efeito de RPS. Os resultados obtidos em[20] podem ser estendidos para a configuração de Otto[17-19].

Por outro lado, determinar parâmetros estruturais de grades metálicas, como periodicidade, amplitude e espessura, em um dado comprimento de onda, que permitam o desenvolvimento de sensores RPS com máxima sensibilidade, é um problema de otimização, para o qual não há estudos na literatura. A solução desse problema é uma das propostas desta tese de doutorado.

Outra proposta da tese é o projeto de grades metálicas otimizadas que permitam o acoplamento de um feixe de luz com plásmons de superfície com incidência normal à interface. Nessa configuração, o feixe de luz acopla parcialmente com dois plásmons de superfície contra-propagantes, o que permite a obtenção de máxima sensibilidade do efeito de RPS em um ponto de declividade nula da função reflectância.

Os benefícios desse tipo de configuração incluem a possibilidade de detecção harmônica do efeito de RPS, o desenvolvimento de sensores RPS em substratos descartáveis de leitura óptica simplificada e também possibilita novas configurações de sensores RPS baseados em fibra óptica.

Investiga-se também os resultados experimentais obtidos na literatura para a excitação de plásmons de superfície em grades naturais presentes em CDs (Disco Compacto) e DVDs (Disco de Vídeo Digital) comerciais[21]. Essas estruturas são de baixo custo e possuem grande área de superfície o que poderia permitir a multiplexação de milhares de transdutores em um único substrato. Nesse contexto, uma questão importante investigada nesta tese é a determinação do comprimento de onda de operação, em uma dada estrutura comercial de CD ou DVD, para obtenção do efeito de RPS com máxima sensibilidade.

Para simular as configurações exploradas nesta tese foi desenvolvido um *software* aplicativo, para acesso via *web*, podendo ser acessado e executado através da Internet, para otimização do efeito de RPS em grades metálicas.

O desenvolvimento da tese inicia-se no Capítulo 2 com a apresentação dos fundamentos sobre RPS e suas aplicações e o contexto da tese em relação ao estágio atual de pesquisa na área. Em seguida, no Capítulo 3 descreve-se o desenvolvimento de um modelo para o cálculo das propriedades de reflexão e transmissão em estruturas de múltiplas camadas separadas por interfaces periódicas com perfil arbitrário.

No Capítulo 4 é descrito o processo de otimização de grades de difração metálicas pela maximização da sensibilidade da curva de RPS, para aplicações em sensores ópticos, com base nos parâmetros de desempenho em interfaces planares definidos por Fontana [20]. Ainda neste capítulo é descrito o desenvolvimento do software aplicativo denominado SPRinG (*Surface Plasmon Resonance in Grating*), que permite não só a geração de curvas de reflectância de grades de difração, como também o projeto de grades otimizadas para sensores RPS através da Internet.

No Capítulo 5 são abordadas as grades poligonais, com uma nova modelagem para o efeito de RPS em CDs. [21]. No Capítulo 6 é apresentado o projeto de grades otimizadas para o desenvolvimento de sensores RPS com incidência normal, para aplicações diversas. No Capítulo 7 são discutidas as implicações das contribuições desta tese e propostas para trabalhos futuros.



## 2 RESSONÂNCIA DE PLÁSMONS DE SUPERFÍCIE E APLICAÇÕES

Neste capítulo são apresentados os fundamentos sobre RPS, suas aplicações e a relação desta tese com o estágio atual de desenvolvimento da área. Os fundamentos incluem a descrição dos conceitos básicos associados à excitação de PS (Plásmons de Superfície) em interfaces planares e não-planares. Também são mostrados alguns trabalhos relevantes, relacionados com esta tese, além de uma breve descrição do que há na literatura em relação ao uso de RPS no desenvolvimento de sensores ópticos.

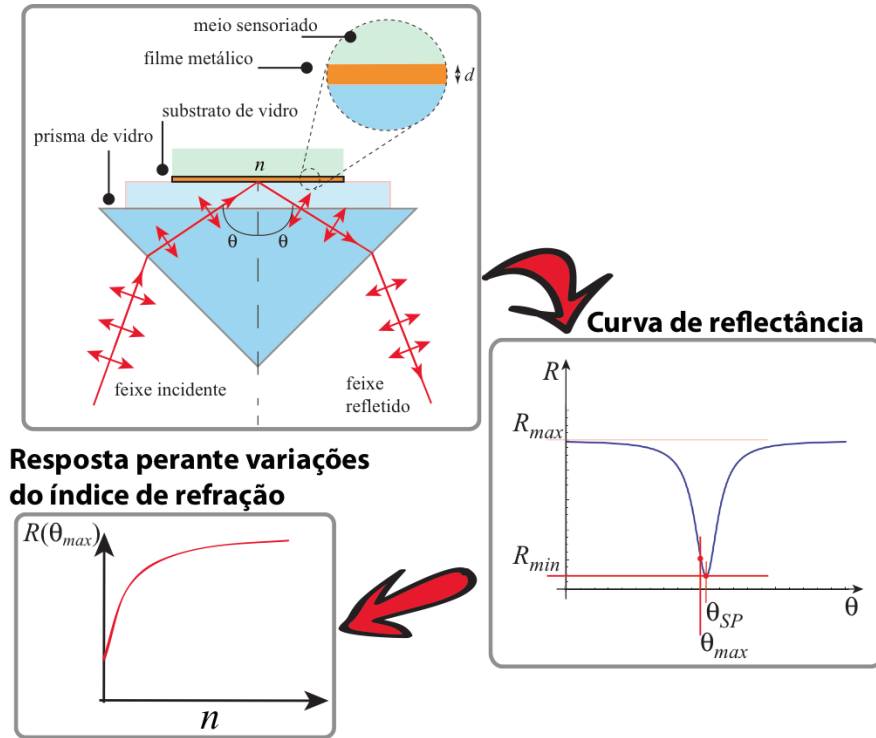
### 2.1 FUNDAMENTOS SOBRE RESSONÂNCIA DE PLÁSMONS DE SUPERFÍCIE

O princípio básico de um sensor RPS consiste na detecção óptica das variações de intensidade da luz refletida de uma interface metal-dielétrico, produzidas por variações nas propriedades materiais da interface como, por exemplo, aquelas que podem ocorrer no índice de refração do meio dielétrico, se este for líquido, em resposta a variações de temperatura, ou mesmo devido ao acúmulo de macromoléculas de um fluido biológico, que nesse caso desempenha o papel do dielétrico na vizinhança da interface, como em biossensores[4-6].

PS são modos oscilantes longitudinais de elétrons livres localizado na superfície de um metal interfaceado com um meio dielétrico, essa oscilação se propaga com forte absorção, ao longo da interface, permanecendo a ela confinada.

Uma condição de ressonância ocorre quando luz polarizada com o campo elétrico no plano de incidência ilumina a interface em um ângulo tal que a componente do vetor de onda na direção paralela ao plano da interface iguala aquela do PS.

Dessa forma, parte da energia do feixe de luz incidente é subtraída parcial ou totalmente pelo PS[1-3]. A Figura 2.1 mostra a representação esquemática do sensor RPS com os principais elementos do sistema: o filme metálico interfaceando os meios dielétricos de incidência e sensoriado, o feixe de luz polarizado incidente e refletido, a curva de reflectância na região de ressonância e a variação da reflectância com o índice de refração, do meio sensoriado, na região de máxima sensibilidade.



**Figura 2.1 - Representação esquemática da estrutura de um sensor RPS**

O fenômeno de RPS ocorre mediante as seguintes condições:

- (i) Um dos meios deve ser metálico: os metais exibem, na faixa de comprimentos de onda maiores do que o comprimento de onda de plasma, uma permissividade complexa, cuja parte real é negativa, que é uma condição necessária para a existência de PS[2-3];
- (ii) para uma interface metal-dielétrico, com ambos considerados semi-infinitos, a constante de propagação do PS,  $k_{PS}$ , é dada por

$$k_{PS} = k_0 \sqrt{\frac{\epsilon_m \epsilon_d}{\epsilon_m + \epsilon_d}}, \quad (2.1)$$

em que  $\epsilon_m$  é a permissividade complexa do metal,  $\epsilon_d$  é a permissividade do meio sensoriado e  $k_0$  é o número de onda no vácuo. Se pelo menos um dos meios é finito, a expressão para a constante de propagação fica dependente das espessuras dos meios de dimensão finita[1,3];

- (iii) No regime de pequenas perdas e assumindo válida a aproximação de meios semi-infinitos, as condições necessárias e suficientes para existência de PS na interface podem ser obtidas impondo

$$\text{Re}(k_{PS}) > 0. \quad (2.2)$$

Sendo um dos meios metálico e o outro transparente, e para comprimentos de onda superiores ao comprimento de onda de plasma e, com base em (2.1), a Condição (2.2), é satisfeita se

$$\varepsilon_d \text{Re}(\varepsilon_m) < 0 \quad (2.3)$$

$$\varepsilon_d < -\text{Re}(\varepsilon_m). \quad (2.4)$$

O acoplamento máximo com o PS ocorre quando a componente  $k_x$  do vetor de onda do feixe de luz incidente, paralela à interface satisfaz a condição de ressonância

$$k_x = \text{Re}(k_{PS}). \quad (2.5)$$

É importante observar que, em vista de (2.3) e (2.4), a constante de propagação do PS satisfaz a propriedade

$$|k_{PS}| > k_0. \quad (2.6)$$

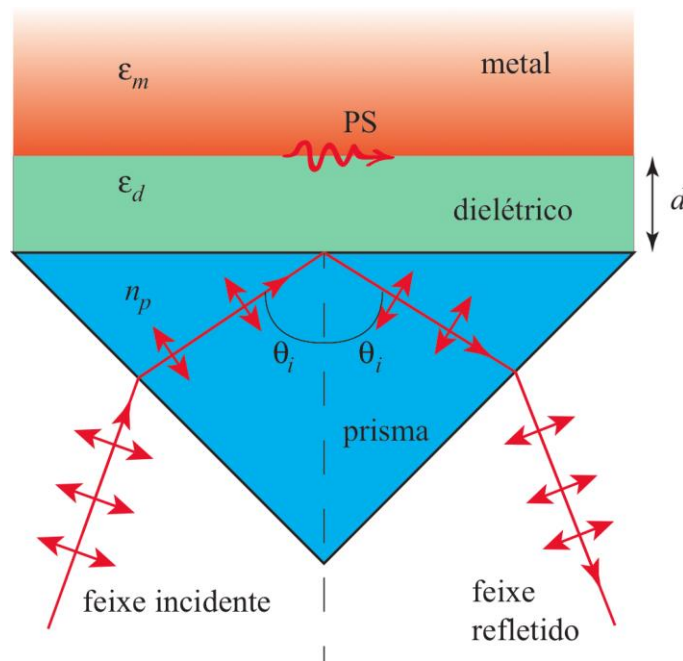
A condição 2.6 indica que em uma interface planar metal-vácuo não se pode excitar plásmons de superfície pela iluminação direta do metal. Por outro lado, se a interface for não planar, os PS podem ser excitados por iluminação direta, conforme descrito na seção 2.2, a seguir.

## 2.2 TÉCNICAS DE EXCITAÇÃO DE PLÁSMONS DE SUPERFÍCIE

Técnicas de excitação de PS por prisma de acoplamento e por grade metálica são comumente utilizadas na construção de sensores ópticos RPS. Em ambos os casos a excitação do PS ocorre devido à presença do campo elétrico, no plano de incidência da luz, sobre a interface metal-dielétrico. Esta configuração é chamada de TM (Polarização Transversa Magnética)[3]. Na TE (Polarização Transversa Elétrica), o campo magnético está no plano de incidência e, neste caso, não ocorre excitação do PS[3], para as técnicas que são descritas a seguir.

### 2.2.1 Técnicas de excitação por prisma

A primeira técnica controlada de excitação de PS foi proposta por Andreas Otto, em 1968, também denominada de configuração de Otto[17,19]. Nessa configuração, ilustrada na Figura 2.2, a onda incidente vinda do espaço livre, com polarização TM, atravessa o prisma de vidro com índice de refração  $n_p$ . Em seguida, penetra no meio dielétrico de permissividade relativa  $\epsilon_d$  e incide na interface metálica de permissividade relativa  $\epsilon_m$ .



**Figura 2.2 - Configuração de prisma de acoplamento proposta por Andreas Otto.**

Para

$$n_p > \sqrt{\epsilon_d}, \quad (2.7)$$

e na faixa de ângulos de incidência satisfazendo a condição

$$\theta_i > \theta_c = \text{sen}^{-1} \left( \frac{\sqrt{\epsilon_d}}{n_p} \right), \quad (2.8)$$

em que  $\theta_c$  representa o ângulo crítico de reflexão interna total[2-3], uma onda evanescente é produzida no meio dielétrico. O prisma, portanto, é utilizado para aumentar o número de onda do campo incidente ou o momento total dos fótons, que no exterior do prisma, é um vetor de onda que vale  $k_0$  para

$$k = n_p k_0. \quad (2.9)$$

Assim, a componente do vetor de onda na direção  $x$  da Figura 2.2 é dada por

$$k_x = n_p k_0 \text{sen } \theta_i. \quad (2.10)$$

O acoplamento máximo com o PS na interface metal-dielétrico da Figura 2.2 pode, portanto, ocorrer se a condição (2.5) for satisfeita. Assumindo válida a aproximação de meios semi-infinitos para  $K_{PS}$  dada por (2.1), e utilizando (2.10) em (2.5), fornece

$$\text{sen } \theta_{PS} = \frac{1}{n_p} \sqrt{\frac{|\text{Re}(\epsilon_m)| \epsilon_d}{|\text{Re}(\epsilon_m)| - \epsilon_d}}, \quad (2.11)$$

com  $\theta_{PS}$  representando o ângulo de incidência na condição de acoplamento ressonante com o PS. É importante notar que a oscilação será observada desde que o índice de refração do prisma seja tal que

$$n_p > \sqrt{\frac{|\text{Re}(\epsilon_m)| \epsilon_d}{|\text{Re}(\epsilon_m)| - \epsilon_d}}. \quad (2.12)$$

Na configuração de Otto, o metal é espesso o suficiente para que sua interface externa não influencie a função reflectância. Por outro lado, a espessura do dielétrico afeta a eficiência da transferência de energia para o PS. Essa espessura tem de ser ajustada para que a onda evanescente tenha amplitude adequada na interface metal-dielétrico para acoplamento eficiente com o PS. A dependência com a espessura pode ser obtida calculando a reflectância do sistema de duas interfaces da Figura 2.2, dada por<sup>22</sup>

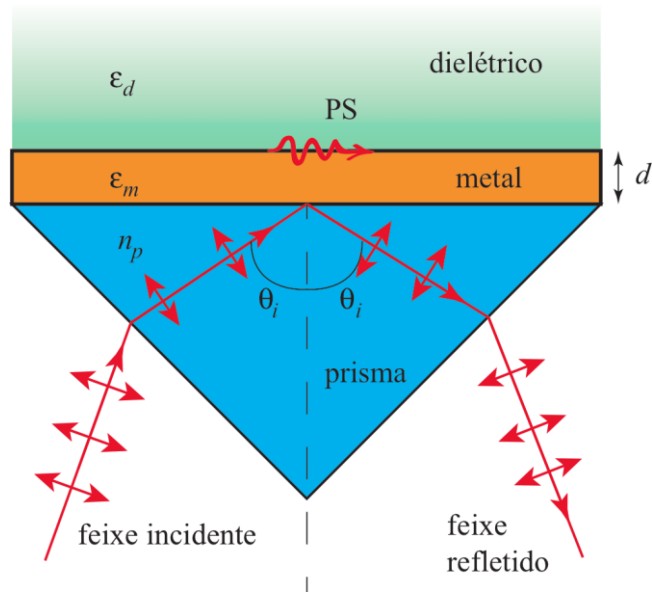
$$R(\theta_i) = \left| \frac{r_{12} + r_{23} \exp(-j2k_2d)}{1 + r_{12}r_{23} \exp(-j2k_2d)} \right|^2, \quad (2.13)$$

em que  $r_{i,i+1}$  é o coeficiente de reflexão de Fresnel [22], para ondas TM, associado à interface entre os meios  $i$  e  $i+1$  com  $i=1,2,\dots$ . O parâmetro  $k_2$  que aparece na equação (2.13) é a componente  $z$  do vetor de onda no meio dielétrico de espessura  $d$ . A dependência no ângulo de incidência está implícita nos parâmetros  $r_{i,i+1}$  e  $k_2$ . A configuração de Otto requer um delicado ajuste da espessura do dielétrico, que muitas vezes é simplesmente um espaço vazio de separação entre o prisma e o metal. Valores típicos de espessura do dielétrico, para  $\varepsilon_d = 1$ , são da ordem do comprimento de onda da fonte de excitação. Dada essa dificuldade de controle da separação entre prisma e metal, a configuração de Otto não é muito utilizada na prática para o desenvolvimento de sensores.

Sensores baseados em acoplamento por prisma, na configuração proposta por Kretschmann, em 1971[18-19], são os mais utilizados na prática. Nessa configuração, ilustrada na Figura 2.3, um filme fino metálico, com uma dada espessura, é interposto entre o prisma e o dielétrico. A condição de ressonância é a mesma da configuração Otto apresentada em 2.10. A espessura do filme metálico é de algumas dezenas de nanômetros[18-20,23] e nessa configuração o meio sob teste é acessível externamente. A dependência da reflectância com a espessura é calculada com o emprego de 2.13.

## 2.2.2 Técnicas de excitação por grade metálica

A Figura 2.4 mostra uma representação esquemática do método de excitação de PS em uma grade metálica, com seus principais componentes. A grade ilustrada na Figura 2.4 tem perfil senoidal de periodicidade  $\Lambda$ , amplitude  $h$  e espessura  $d$ .



**Figura 2.3 - Configuração de prisma de acoplamento proposta por Kretschmann.**

Devido à periodicidade da interface, a luz incidente interage com a superfície gerando um conjunto discreto de ordens de difração [3,21].

$$k_m = k_x + mk_g, \quad (2.14)$$

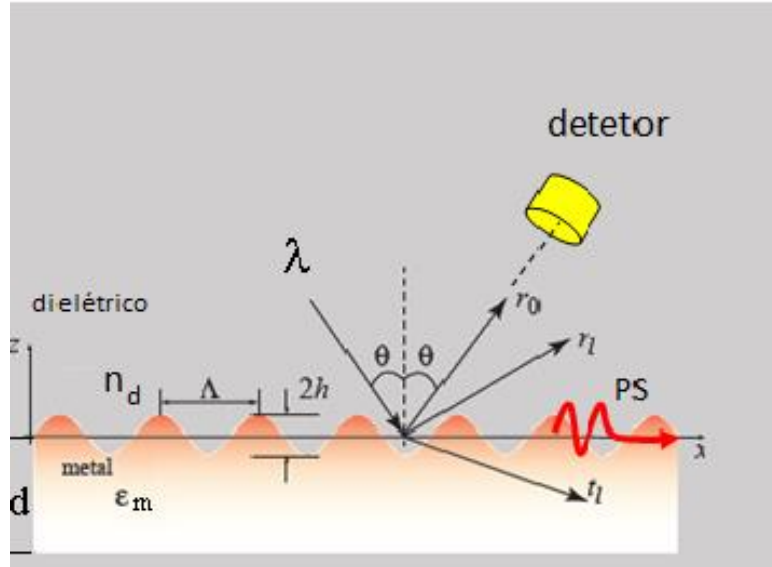
com

$$k_x = n_d k_0 \sin(\theta), \quad (2.15)$$

e

$$k_g = 2\pi / \Lambda, \quad (2.16)$$

representando o número de onda da grade. Da equação (2.14), percebe-se que a grade exerce o mesmo papel que o prisma em 2.9. Em 2.15,  $n_d$  é o índice de refração do meio dielétrico mostrado na Figura 2.4.



**Figura 2.4 - Ilustração do processo de geração de ordens de difração em uma grade metálica de periodicidades, amplitude  $h$  e espessura  $d$ .**

Na configuração da Figura 2.4 é possível obter acoplamento com PS para uma dada ordem de difração, uma vez que a componente  $x$  do vetor de onda da  $m$ -ésima ordem não é mais igual àquele do campo incidente, como seria no caso de uma interface planar. Para obter a condição de ressonância, utiliza-se 2.14 e 2.15 e a condição 2.5 com o auxílio de 2.11 assumindo o regime de pequenas perdas, o que fornece

$$\sin(\theta_{PS}) = -\frac{m\lambda}{n_d\Lambda} \pm \sqrt{\frac{|\text{Re}(\epsilon_m)|}{|\text{Re}(\epsilon_m)| - n_d^2}}. \quad (2.17)$$

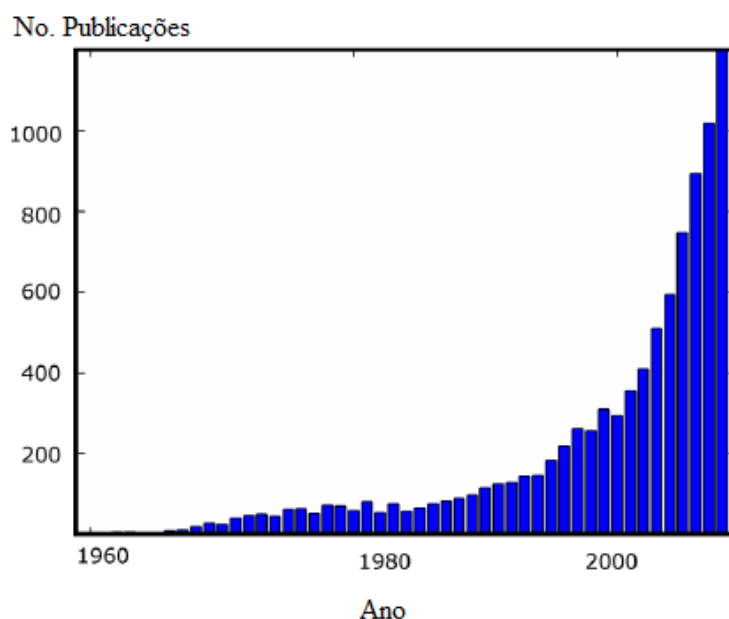
Para uma dada relação entre o comprimento de onda e a periodicidade da grade, alguns valores do inteiro  $m$  podem ser obtidos tal que o módulo do termo à direita da igualdade em (2.17) seja inferior a 1. Se o termo satisfaz essa condição com um valor negativo, o PS excitado se propaga no sentido  $-x$ . Caso contrário a propagação se dá no sentido  $+x$ .

### 2.3 APLICAÇÕES DE SENSORES ÓPTICOS BASEADOS EM RPS

Sensores ópticos baseados em RPS são amplamente utilizados na detecção qualitativa e quantitativa de interações químicas e biomoleculares. Nessas aplicações são geralmente denominados sensores químicos e biossensores, com aplicações em estudos biológicos, em pesquisas em ciências da saúde, na descoberta de drogas, no diagnóstico



médico e no monitoramento ambiental[4-7]. O efeito de RPS também encontra aplicações em dispositivos de chaveamento óptico[8-9], em dispositivos a fibra óptica[10-15], entre outras aplicações[16]. O gráfico da Figura 2.5, extraído de[24], mostra o número de artigos publicados anualmente, no intervalo de 1960 a 2008, cujos títulos contêm as palavras “*surface plasmon*”. Isto reflete o crescimento das aplicações de sensores baseados em RPS até o início da última década. A seguir, são descritas mais especificamente algumas configurações de sensores ópticos baseados em RPS.



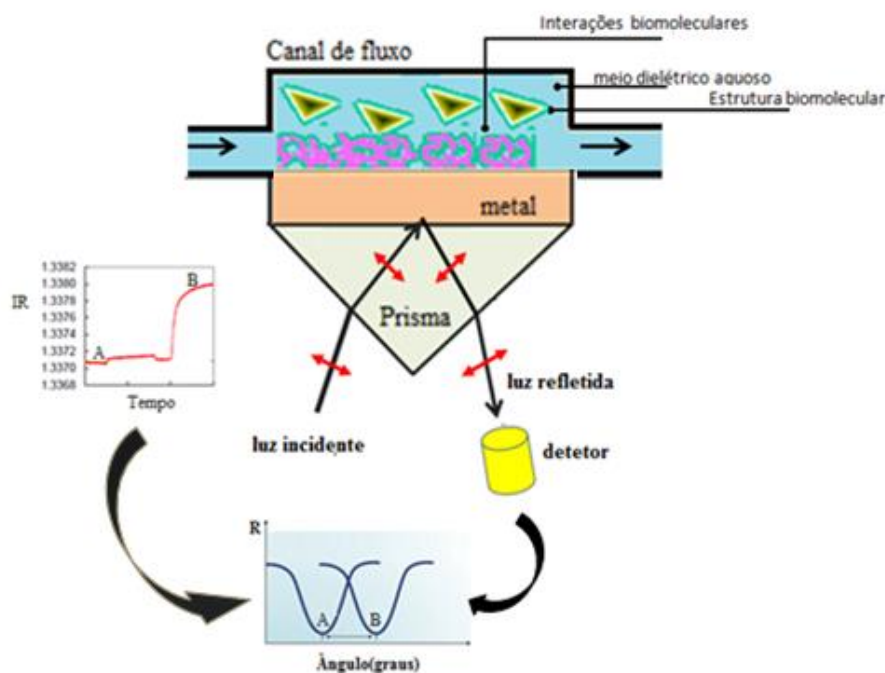
**Figura 2.5 - Números de artigos publicados anualmente, no intervalo de 1960 a 2008, cujos títulos contêm as palavras “*surface plasmon*”.**

### 2.3.1 Sensores baseados na configuração de Kretschmann

A configuração de Kretschmann é amplamente utilizada em biossensores[4-7]. O princípio básico consiste na detecção de interações biológicas, monitorando as mudanças do índice de refração devidas, por exemplo, à ligação de uma camada orgânica à superfície do metal. A miniaturização de estruturas na configuração de Kretschmann permitiu o desenvolvimento de *chips* que propiciam um maior desempenho dos biossensores RPS atualmente disponíveis comercialmente.

A Figura 2.6 mostra a representação esquemática de um típico sistema biossensor RPS como produto comercializado[25]. Na figura são identificados os elementos da configuração de Kretschmann, tais como as interfaces prisma-metal e metal-meio sensoriado. O índice de refração do meio dielétrico aquoso é alterado pelo fluxo e

interação das biomoléculas que atravessam o canal de fluxo. A variação temporal do índice de refração e o deslocamento angular produzido são mostrados nos gráficos que compõem o cenário da Figura 2.6.



**Figura 2.6 - Representação esquemática de um biossensor baseado em RPS[25].**

Sistemas biossensores RPS comercialmente disponíveis, como o Biacore 3000 SPR da *General Electric*, utilizam configurações de Kretschmann, similares ao mostrado na Figura 2.6.

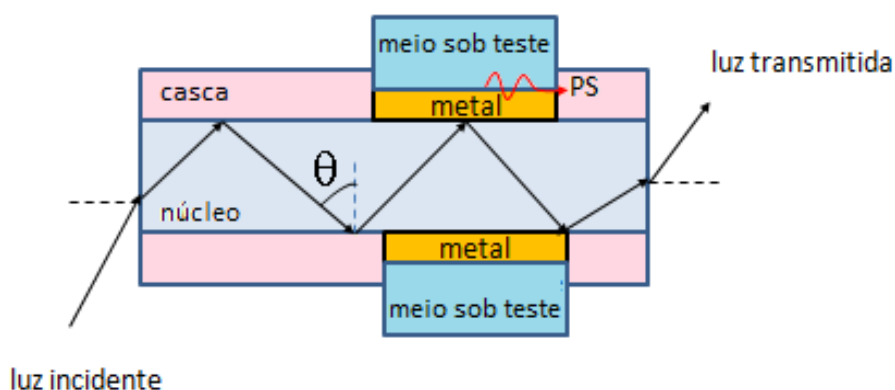
### 2.3.2 Sensores em fibra óptica

A propriedade de operar no regime de reflexão interna total faz das fibras ópticas um meio natural para se desenvolver dispositivos baseados em RPS. As aplicações podem ser diversas e vão desde o monitoramento em ambientes hostis até aplicações em dispositivos para redes ópticas, tais como chaveadores e demultiplexadores que trabalham com seletividade de comprimento de onda.

Em relação a sensores em fibra óptica baseados em RPS, diversas configurações têm sido testadas na literatura, incluindo remoção da casca da fibra e metalização do núcleo[10-11], para o caso de fibras multimodo, fabricação de microprismas metalizados em pontas de fibras monomodo[12-14]. No caso de fibras monomodo, o emprego de

grades de Bragg inscritas no núcleo da fibra monomodo para permitir o acoplamento de modos vazados com plásmons de superfície em um filme metálico depositado diretamente na casca da fibra<sup>15</sup>. Nessas configurações, a fibra é especialmente adaptada de forma a permitir que o feixe de luz atinja a superfície metálica com uma faixa angular que inclua o ângulo de ressonância no metal.

A Figura 2.7 mostra um esquema típico de sensor SPR, em fibra óptica, proposto por Jorgenson e Yee[10] e cujas propriedades de distribuição da luz transmitida foram analisadas por Fontana[11]. O sensor é construído removendo-se a casca de um pequeno segmento longitudinal da fibra e em seu lugar é feito um revestimento com o filme metálico.



**Figura 2.7 - Configuração de sensor SPR em fibra óptica similar ao proposto por Jorgenson e Yee [10].**

### 2.3.3 Sensores RPS em grade de difração

Embora sejam encontrados alguns trabalhos que relatam a aplicação comercial de grades de difração elas não exploram o efeito RPS. No caso[26], a grade é utilizada como guia de onda.

Questões como complexidade do processo de fabricação de grades de difração, quando comparado ao uso de prisma de acoplamento, podem explicar parcialmente a pequena quantidade de versões comerciais em grade. No entanto, a possibilidade de exploração de CDs metalizados já tendo grades de difração naturais, em conjunção com a otimização dos parâmetros de operação desses componentes, conforme explorado nesta tese, pode facilitar o desenvolvimento dessa tecnologia para sensores RPS.

No próximo capítulo é mostrado o desenvolvimento de um modelo para geração de curvas de reflectância para o efeito RPS em grades de difração. O modelo é aplicado em geometrias de interesse do desenvolvimento desta tese, a saber, geometrias senoidais e poligonais.

### 3 MODELAGEM DO EFEITO DE RPS EM GRADES DE DIFRAÇÃO

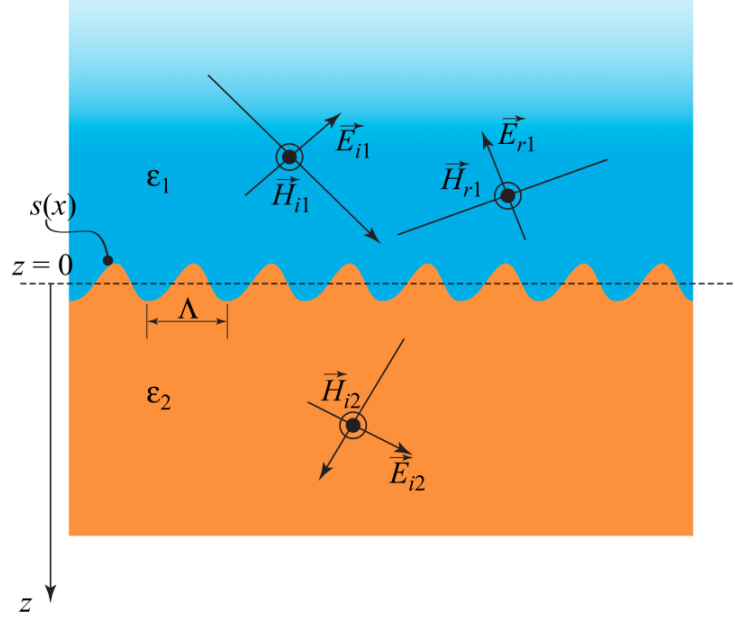
Neste capítulo, desenvolve-se o modelo de cálculo das propriedades de transmissão e reflexão em uma interface simples tendo perfil periódico. O modelo é aplicado na geração de curvas de reflectância para grades com perfil senoidal e poligonal. A formulação matricial detalhada para determinação das propriedades de transmissão e reflexão em estruturas compostas de múltiplas interfaces periódicas é feita no Apêndice A. Essa formulação é utilizada ao longo desta tese para o projeto de sensores RPS otimizados baseados em grades de difração.

#### 3.1 MODELAGEM DE RPS EM GRADE DE DIFRAÇÃO

A modelagem do efeito de RPS em grade de difração é amplamente tratada na literatura. A Figura 3.1 mostra um esquema para uma grade unidimensional com uma interface entre dois meios tendo perfil de forma arbitrária  $s(x)$  com periodicidade  $\Lambda$ . A figura também mostra os campos incidente, refletidos e transmitidos. Assume-se que a polarização da onda incidente seja TM, na qual o campo elétrico está no plano de incidência e o magnético paralelo à superfície [3]. A análise se limita à polarização TM dado que o acoplamento com PS na interface requer que o campo de excitação tenha componente normal ao plano médio da interface.

Nas abordagens mais frequentemente utilizadas na literatura a geometria da grade é dividida em duas regiões, uma exterior à região situada entre os planos tangentes aos pontos de máximo e mínimo da grade e a outra complementar à primeira. Na região exterior os campos refletidos e transmitidos são descritos como ondas planas expandidas, em séries de Fourier, com base no Teorema de Floquet [27]. Na região interior, em que a onda incidente é difratada, os campos são descritos por meio de uma variedade de métodos numéricos, tais como RCWA (Análise Rigorosa de Ondas Acopladas) [27, 28], Método Integral [29] e Método de Elementos Finitos [27].

A abordagem desenvolvida neste trabalho utiliza um modelo simplificado baseado na expansão de Rayleigh [27], tanto na região exterior quando na interior. Este modelo se aplica bem a interfaces com geometria senoidal como é mostrado na Seção 3.3, embora não apresente bons resultados para geometrias poligonais, principalmente devido a problemas de convergência. Isso pode ser contornado para obtenção de uma solução que converge aproximadamente para a solução final, representando o perfil como uma expansão truncada de Fourier [30].



**Figura 3.1 - Esquema para uma grade unidimensional com uma interface dielétrico-metal tendo um perfil periódico de forma arbitrária.**

Uma motivação para o desenvolvimento da formulação, para o caso de múltiplas interfaces periódicas, é a necessidade de se modelar o efeito de RPS em estruturas mais complexas envolvendo filmes metálicos de duas interfaces periódicas ou estruturas de múltiplas camadas capazes de exibir o efeito de RPS. Além disso, foi necessário desenvolver a formulação completa nesse caso, tendo em vista não haver na literatura expressões para o sistema de equações lineares que governa as amplitudes de campo para múltiplas interfaces de perfil arbitrário. A derivação detalhada das expressões para os coeficientes de reflexão e transmissão associados a esse problema é apresentada separadamente no Apêndice A.

### 3.2 REFLEXÃO E TRANSMISSÃO EM UMA INTERFACE DE PERFIL PERIÓDICO

Esta seção apresenta o desenvolvimento do modelo para o cálculo dos coeficientes de reflexão e transmissão para uma interface com perfil arbitrário  $s(x)$ . Assume-se uma grade unidimensional e a onda incidente plana com polarização TM, vinda de um meio dielétrico mostrado na Figura 3.1.

Representando um vetor  $\vec{V}$  em coordenadas cartesianas na forma  $\vec{V} = (V_x, V_y, V_z)$ , os campos da onda incidente podem ser escritos como [21, 27]

$$\vec{E}_{i1} = \frac{Z}{\varepsilon_1 K_v} (p_{10}, 0, -k_0) e^{-jk_0 x} e^{-jp_{10} z}, \quad (3.1)$$

$$\vec{H}_{i1} = (0, 1, 0) e^{-jk_0 x} e^{-jp_{10} z}, \quad (3.2)$$

com o vetor de onda do campo incidente dado por

$$\vec{K}_0 = (k_0, 0, p_{10}). \quad (3.3)$$

Nesta notação, o subscrito 1 na variável  $p$  é usado para denotar o índice do meio e o subscrito zero em 3.1 e 3.3 denota a ordem zero de difração.

$Z = (\mu_0 / \varepsilon_0)^{1/2} = 120\pi\Omega$  é a impedância do espaço livre [2] e

$$K_v = 2\pi / \lambda = \omega / c, \quad (3.4)$$

é o número de onda no espaço livre,  $\omega$  a frequência angular e  $\lambda$  o comprimento de onda no espaço livre. Note que

$$|\vec{K}_0| = \sqrt{\varepsilon_1} K_v, \quad (3.5)$$

e, portanto,

$$k_0^2 + p_{10}^2 = \varepsilon_1 K_v^2. \quad (3.6)$$

Alternativamente uma notação matricial pode ser usada para os vetores de onda e campos, assumindo que todos os vetores estejam representados em um sistema de coordenadas retangular. Assim, a forma matricial para (3.1) e (3.3) pode ser escrita como

$$\tilde{E}_{i1} = \frac{Z}{\varepsilon_1 K_v} (p_{10} \ 0 \ -k_0)^T e^{-j\tilde{K}_0^T \tilde{X}}, \quad (3.7)$$

$$\tilde{H}_{i1} = (0 \ 1 \ 0)^T e^{-j\tilde{K}_0^T \tilde{X}}, \quad (3.8)$$

$$\tilde{K}_0 = \begin{pmatrix} k_0 & 0 & p_{10} \end{pmatrix}^T, \quad (3.9)$$

$$\tilde{X} = \begin{pmatrix} x & y & z \end{pmatrix}^T. \quad (3.10)$$

O símbolo *til* ( $\sim$ ) é usado para denotar uma matriz e o sobrescrito  $T$  denota a operação de transposição de matriz.

Considerando que a superfície tenha um perfil descrito pela função periódica  $s(x)$ , com periodicidade  $\Lambda$ , então, devido ao perfil periódico da interface, é gerado um conjunto discreto de harmônicos espaciais. Os campos das ondas refletidas e refratadas podem ser escritos nas formas a seguir:

Campos Refletidos:

$$\vec{E}_{r1} = \frac{Z}{\varepsilon_1 K_v} \sum_l r(k_l) (-p_{1l}, 0, -k_l) e^{-jk_l x} e^{jp_{1l} z}, \quad (3.11)$$

$$\vec{H}_{r1} = \sum_l r(k_l) (0, 1, 0) e^{-jk_l x} e^{jp_{1l} z}. \quad (3.12)$$

Campos Transmitidos:

$$\vec{E}_{i2} = \frac{Z}{\varepsilon_2 K_v} \sum_l t(k_l) (p_{2l}, 0, -k_l) e^{-jk_l x} e^{-jp_{2l} z}, \quad (3.13)$$

$$\vec{H}_{i2} = \sum_l t(k_l) (0, 1, 0) e^{-jk_l x} e^{-jp_{2l} z}, \quad (3.14)$$

em que

$$k_l^2 + p_{1l}^2 = \varepsilon_1 K_v^2, \quad (3.15)$$

$$k_l^2 + p_{2l}^2 = \varepsilon_2 K_v^2. \quad (3.16)$$



Assume-se que a interface metal-vácuo tenha um perfil de forma arbitrária  $s(x)$  com periodicidade  $\Lambda = 2\pi/Kg$  e  $l$  é a  $l$ -ésima ordem de difração. Para aplicar as condições de contorno, os campos, que em princípio são expansões válidas para as regiões externas  $|z| > |h|$ , em que  $h$  é a amplitude da função periódica  $s(x)$ , são assumidas também válidas na região  $|z| < |h|$ . Esta é a bem conhecida hipótese de Rayleigh [27] e, nessa condição, uma solução que converge pode ser obtida para as amplitudes das ordens refletidas e refratadas. Então, as condições de contorno podem ser escritas na forma

$$\vec{N} \times \Delta \vec{E} = \vec{0}, \quad (3.17)$$

$$\vec{N} \times \Delta \vec{H} = \vec{0}, \quad (3.18)$$

com,

$$\Delta \vec{H} = (\vec{H}_{i1} + \vec{H}_r) - \vec{H}_{i2},$$

$$\Delta \vec{E} = (\vec{E}_{i1} + \vec{E}_{r1}) - \vec{E}_{i2},$$

em que  $\Delta$  representa a diferença entre os vetores de campo em cada lado da interface e  $\vec{N}$  é um vetor normal a ela. O vetor  $\vec{N}$  pode ser obtido do gradiente

$$\vec{N} = \vec{\nabla} [s(x) - z] \Big|_{z=s(x)}, \quad (3.19)$$

ou equivalentemente

$$\vec{N} = (ds/dx, 0, -1). \quad (3.20)$$

Para os campos  $H$  a aplicação da condição de contorno é simplificada, pois eles já são tangentes à superfície. Inserindo (3.2), (3.12) e (3.14) em (3.18) e utilizando (3.20) vem

$$e^{-jk_0 x} e^{-jp_{10} s(x)} + \sum_k r(k) e^{-jkx} e^{jp_1 s(x)} = \sum_k t(k) e^{-jkx} e^{-jp_2 s(x)}. \quad (3.21)$$

Fazendo a expansão em Fourier

$$s(x) = \sum_n S_n e^{-jnk_g x}, \quad (3.22)$$

com

$$S_n = \frac{1}{\Lambda} \int_{-\Lambda/2}^{\Lambda/2} s(x) e^{jnk_g x} dx, \quad (3.23)$$

e

$$\exp[-jas(x)] = \sum_n C_n(a) e^{-jnk_g x}, \quad (3.24)$$

com

$$C_n(a) = \frac{1}{\Lambda} \int_{-\Lambda/2}^{\Lambda/2} e^{j[nk_g x - as(x)]} dx, \quad (3.25)$$

obtém-se

$$\begin{aligned} & e^{-jk_0 x} \sum_m C_m(p_{10}) e^{-jmk_g x} + \sum_l r(k_l) e^{-jk_l x} \sum_n C_m(-p_{1l}) e^{-jnk_g x} \\ & = \sum_l t(k_l) e^{-jk_l x} \sum_n C_n(p_{2l}) e^{-jnk_g x} \end{aligned} \quad (3.26)$$

A Equação (3.26) é não nula para os valores de  $r$  e  $t$  tal que  $k$  satisfaça a condição

$$k_l = k_0 + lk_g, \quad (3.27)$$

com  $l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ . Se  $k$  não satisfaz (3.27), pode ser mostrado que os valores correspondentes de  $r$  e  $t$  são todos nulos. Portanto, a condição de contorno para o campo  $H$  pode ser escrita como

$$\sum_m C_m(p_{10}) e^{-jmk_g x} = \sum_{l,n} [t(k_l) C_n(p_{2l}) - r(k_l) C_n(-p_{1l})] e^{-j(l+n)k_g x} . \quad (3.28)$$

No lado direito da equação (3.28) os termos podem ser agrupados tal que  $n + l = m$ , e, portanto,

$$\sum_l [t(k_l) C_{m-l}(p_{2l}) - r(k_l) C_{m-l}(-p_{1l})] = C_m(p_{10}) . \quad (3.29)$$

Aplicando as condições de contorno para o campo elétrico resulta em

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\varepsilon_1} (ds/dx, 0, -1) \times (p_{10}, 0, -k_0) e^{-jp_{10}s(x)} \\ &= (ds/dx, 0, -1) \times \frac{1}{\varepsilon_2} \sum_l t(k_l) (p_{2l}, 0, -k_l) e^{-jlk_g x} e^{-jp_{2l}s(x)} \\ & - (ds/dx, 0, -1) \times \frac{1}{\varepsilon_1} \sum_l r(k_l) (-p_{1l}, 0, -k_l) e^{-jlk_g x} e^{jp_{2l}s(x)} , \end{aligned}$$

que após o cálculos dos produtos vetoriais fornece

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\varepsilon_1} (k_0 ds/dx - p_{10}) e^{-jp_{10}s(x)} \\ &= \frac{1}{\varepsilon_2} \sum_l t(k_l) (k_l ds/dx - p_{2l}) e^{-jlk_g x} e^{-jp_{2l}s(x)} . \\ & - \frac{1}{\varepsilon_1} \sum_l r(k_l) (p_{1l} + k_l ds/dx) e^{-jlk_g x} e^{jp_{1l}s(x)} \end{aligned} \quad (3.30)$$

Nota-se em (3.30) a existência de termos do tipo  $e^{-jas(x)}$ ,  $e^{-jas(x)} \frac{ds}{dx}$ . O primeiro termo pode ser expandido a partir de (3.24). Para o segundo termo, tem-se que

$$e^{-jas(x)} \frac{ds}{dx} = \frac{j}{a} \frac{d}{dx} \left[ e^{-jas(x)} \right] . \quad (3.31)$$

A derivada do termo do lado direito da Equação (3.31) é calculada com o emprego de (3.24) e, portanto,

$$\frac{d}{dx} e^{-jas(x)} = -jk_g \sum_n n C_n(a) e^{-jnk_g x} . \quad (3.32)$$

Combinando os resultados (3.31) e (3.32) resulta em

$$e^{-jas(x)} \frac{ds}{dx} = \frac{k_g}{a} \sum_n n C_n(a) e^{-jnk_g x} . \quad (3.33)$$

Usando as expansões (3.24) e (3.33) em (3.30) fornece

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\epsilon_1} \sum_m \left( \frac{mk_0 k_g - p_{10}^2}{p_{10}} \right) C_m(p_{10}) e^{-jmk_g x} \\ &= \frac{1}{\epsilon_2} \sum_{l,n} t(k_l) \left( \frac{nk_g k_l - p_{2l}^2}{p_{2l}} \right) C_n(p_{2l}) e^{-j(l+n)k_g x} . \\ &+ \frac{1}{\epsilon_1} \sum_{l,n} r(k_l) \left( \frac{nk_l k_g - p_{1l}^2}{p_{1l}} \right) C_n(-p_{1l}) e^{-j(l+n)k_g x} \end{aligned} \quad (3.34)$$

Nos termos do lado direito da Equação (3.34) faz-se  $n + l = m$ , e, portanto,

$$\begin{aligned} & \left[ \frac{mk_0 k_g - p_{10}^2}{\epsilon_1 p_{1l}} \right] C_m(p_{10}) \\ &= \sum_l t(k_l) \left[ \frac{(m-l)k_l k_g - p_{2l}^2}{\epsilon_2 p_{2l}} \right] C_{m-l}(p_{2l}) . \\ &+ \sum_l r(k_l) \left[ \frac{(m-l)k_l k_g - p_{1l}^2}{\epsilon_1 p_{1l}} \right] C_{m-l}(-p_{1l}) \end{aligned} \quad (3.35)$$

Definindo a função

$$F_{ml}(u) = \frac{(m-l)k_l k_g - p_{ul}^2}{\varepsilon_u P_{ul}}, \quad (3.36)$$

a expressão (3.35) pode ser reescrita na forma

$$\sum_l \left[ F_{ml}(2) C_{m-l}(p_{2l}) t(k_l) + F_{ml}(1) C_{m-l}(-p_{1l}) r(k_l) \right] = F_{m0}(1) C_m(p_{10}) \quad (3.37)$$

Em resumo, para uma interface com perfil arbitrário os coeficientes de transmissão  $t(k_l)$  e reflexão  $r(k_l)$  gerados pela difração na grade, são determinados pela solução do conjunto infinito de equações:

$$\sum_l \left[ t(k_l) C_{m-l}(p_{2l}) - r(k_l) C_{m-l}(-p_{1l}) \right] = C_m(p_{10}), \quad (3.29)$$

$$\sum_l \left[ F_{ml}(2) C_{m-l}(p_{2l}) t(k_l) + F_{ml}(1) C_{m-l}(-p_{1l}) r(k_l) \right] = F_{m0}(1) C_m(p_{10}), \quad (3.37)$$

com

$$C_m(a) = \frac{1}{\Lambda} \int_{-\Lambda/2}^{\Lambda/2} e^{j[mk_g x - as(x)]} dx. \quad (3.38)$$

com  $l$  e  $m$  podendo assumir qualquer valor inteiro,  $k_0$  representando a componente  $x$  do vetor de onda do campo incidente e

$$k_l^2 + p_{1l}^2 = \varepsilon_1 K_v^2, \quad (3.39)$$

$$k_l^2 + p_{2l}^2 = \varepsilon_2 K_v^2, \quad (3.40)$$

$$k_l = k_0 + lk_g,$$

$$K_v = 2\pi / \lambda,$$

$$k_g = 2\pi / \Lambda,$$

em que  $\lambda$  é o comprimento de onda no espaço livre e  $\Lambda$  é o período da grade.

### 3.3 SOLUÇÃO COM TRUNCAMENTO PARA O SISTEMA DE EQUAÇÕES

Uma solução para o sistema infinito de equações dado por (3.29) e (3.37) requer truncamento para um número finito de equações. Assumindo que o truncamento seja feito para um índice máximo  $|l_{\max}| = |m_{\max}| = L$ , obtém-se um sistema de  $2(2L+1) \times 2(2L+1)$  equações. A partir de (3.29) e (3.37), pode-se definir uma matriz  $\tilde{C}(j)$  de  $(2L+1) \times (2L+1)$  elementos associada ao meio  $j$  ( $j=1, 2$ ), com a  $l$ -ésima coluna de  $(2L+1)$  elementos dada por

$$\tilde{C}_{\pm}(j)^{(l)} = \left( C_{-L-l}(\pm p_{jl}) \quad C_{-L-l+1}(\pm p_{jl}) \quad \cdots \quad C_{-l}(\pm p_{jl}) \quad C_{-l+1}(\pm p_{jl}) \quad \cdots \quad C_{L-l}(\pm p_{jl}) \right)^T. \quad (3.41)$$

Com o emprego de (3.41) os coeficientes  $C_{lm}$  que aparecem em (3.29) e (3.37) podem ser obtidos a partir dos elementos da matriz

$$\tilde{C}_{\pm}(j) = \left( \tilde{C}_{\pm}(j)^{(-L)} \quad \tilde{C}_{\pm}(j)^{(-L+1)} \quad \cdots \quad \tilde{C}_{\pm}(j)^{(0)} \quad \tilde{C}_{\pm}(j)^{(1)} \quad \cdots \quad \tilde{C}_{\pm}(j)^{(L)} \right). \quad (3.42)$$

De forma semelhante todos os parâmetros  $F_{lm}$  que aparecem em (3.29) e (3.37) podem ser obtidos a partir da matriz  $\tilde{F}(j)$  de dimensão  $(2L+1) \times (2L+1)$  associada ao meio  $j$ , tendo a  $l$ -ésima coluna dada por

$$\tilde{F}(j)^{(l)} = \left( F_{-L,l} \quad F_{-L+1,l} \quad \cdots \quad F_{0,l} \quad F_{1,l} \quad \cdots \quad F_{L,l} \right)^T. \quad (3.43)$$

De (3.43), a matriz  $\tilde{F}(j)$  é construída utilizando a expressão

$$\tilde{F}(j) = \left( \tilde{F}(j)^{\langle -L \rangle} \quad \tilde{F}(j)^{\langle -L+1 \rangle} \quad \dots \quad \tilde{F}(j)^{\langle 0 \rangle} \quad \tilde{F}(j)^{\langle 1 \rangle} \quad \dots \quad \tilde{F}(j)^{\langle L \rangle} \right). \quad (3.44)$$

Para a determinação dos coeficientes de transmissão e reflexão definem-se as matrizes de transmissão e reflexão

$$\tilde{T} = \begin{bmatrix} t(k_{-L}) & t(k_{-L+1}) & \dots & t(k_0) & t(k_1) & \dots & t(k_L) \end{bmatrix}^T, \quad (3.45)$$

$$\tilde{R} = \begin{bmatrix} r(k_{-L}) & r(k_{-L+1}) & \dots & r(k_0) & r(k_1) & \dots & r(k_L) \end{bmatrix}^T. \quad (3.46)$$

Com as definições (3.41), (3.45), (3.46) o sistema de equações (3.29) e (3.37) pode ser expresso, na forma

$$\tilde{C}_+(2)\tilde{T} - \tilde{C}_-(1)\tilde{R} = C_+(1)^{\langle 0 \rangle}, \quad (3.47)$$

$$\tilde{F}(2) \circ \tilde{C}_+(2)\tilde{T} + \tilde{F}(1) \circ \tilde{C}_-(1)\tilde{R} = \tilde{F}(1)^{\langle 0 \rangle} \circ C_+(1)^{\langle 0 \rangle}, \quad (3.48)$$

em que o símbolo  $\circ$  denota o produto de Hadamard [40], *i.e.*, cada elemento da matriz resultante é o produto entre matrizes elemento a elemento. Definindo

$$\tilde{D}_\pm(i) = \tilde{F}(i) \circ \tilde{C}_\pm(i), \quad (3.49)$$

a equação (3.48) pode ser escritas na forma

$$\tilde{D}_+(2)\tilde{T} + \tilde{D}_-(1)\tilde{R} = \tilde{D}_+(1)^{\langle 0 \rangle}. \quad (3.50)$$

As equações (3.47) e (3.51) podem ser resolvidas individualmente para obter as matrizes  $\tilde{T}$  e  $\tilde{R}$ . Para obter a matriz  $\tilde{R}$ , parte-se inicialmente da Equação (3.50),

$$\tilde{T} = [\tilde{C}_+(2)]^{-1} [\tilde{C}_-(1)\tilde{R} + \tilde{C}_+(1)^{\langle 0 \rangle}], \quad (3.51)$$

que, inserida em (3.47) produz

$$\tilde{D}_+(2)[\tilde{C}_+(2)]^{-1} [\tilde{C}_-(1)\tilde{R} + \tilde{C}_+(1)^{\langle 0 \rangle}] + \tilde{D}_-(1)\tilde{R} = \tilde{D}_+(1)^{\langle 0 \rangle}, \quad (3.52)$$

e, portanto,

$$\tilde{D}_+(2)[\tilde{C}_+(2)]^{-1} [\tilde{C}_-(1)\tilde{R} + \tilde{C}_+(1)^{\langle 0 \rangle}] + \tilde{D}_-(1)\tilde{R} = \tilde{D}_+(1)^{\langle 0 \rangle},$$

$$[\tilde{D}_+(2)[\tilde{C}_+(2)]^{-1} \tilde{C}_-(1) + \tilde{D}_-(1)] \tilde{R} = \tilde{D}_+(1)^{\langle 0 \rangle} - \tilde{D}_+(2)[\tilde{C}_+(2)]^{-1} \tilde{C}_+(1)^{\langle 0 \rangle}, \quad (3.52)$$

e, portanto,

$$\tilde{R} = \left\{ \tilde{D}_+(2)[\tilde{C}_+(2)]^{-1} \tilde{C}_-(1) + \tilde{D}_-(1) \right\}^{-1} \left\{ \tilde{D}_+(1)^{\langle 0 \rangle} - \tilde{D}_+(2)[\tilde{C}_+(2)]^{-1} \tilde{C}_+(1)^{\langle 0 \rangle} \right\}. \quad (3.53)$$

O coeficiente de reflexão de ordem zero é o elemento central da matriz coluna  $\tilde{R}$ . A matriz de transmissão pode ser obtida inserindo (3.53) em (3.52). Alternativamente pode-se construir uma única matriz de equações  $2(2L+1) \times 2(2L+1)$  para o sistema de equações completo, na forma

$$\tilde{M}\tilde{S} = \tilde{Y}, \quad (3.54)$$

com

$$\tilde{M} = \begin{pmatrix} \tilde{C}_+(2) & -\tilde{C}_-(1) \\ \tilde{D}_+(2) & \tilde{D}_+(1) \end{pmatrix}, \quad (3.55)$$

$$\tilde{S} = \begin{pmatrix} \tilde{T} \\ \tilde{R} \end{pmatrix}, \quad (3.56)$$



$$\tilde{Y} = \begin{pmatrix} \tilde{C}_+ (1)^{(0)} \\ \tilde{D}_+ (1)^{(0)} \end{pmatrix}, \quad (3.57)$$

e os coeficientes de transmissão e reflexão podem ser obtidos de

$$\tilde{S} = \tilde{M}^{-1} \tilde{Y}. \quad (3.58)$$

### 3.4 ANÁLISE DA IMPLEMENTAÇÃO DA SOLUÇÃO COM TRUNCAMENTO PARA O SISTEMA DE EQUAÇÕES

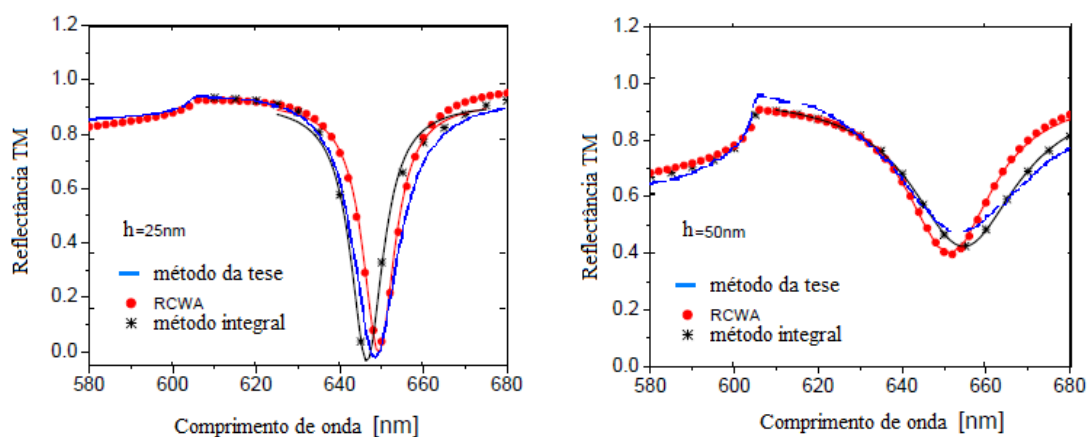
Para solução numérica do sistema de equações (3.47) e (3.51), o ponto de truncamento deve ser escolhido tal que os coeficientes de reflexão e transmissão converjam para um valor constante a partir de um dado valor de  $L$ . O valor de  $L$  está fortemente relacionado com o perfil da grade.

Simulações realizadas para solução do sistema de equações (3.47) e (3.51) do modelo mostram que para um perfil senoidal, obtém-se uma rápida convergência para a curva de reflectância para  $L=4$ . Mas, para um perfil poligonal como, por exemplo, o trapezoidal, as simulações com o modelo desenvolvido não são conclusivas sobre convergência. No Capítulo 5 é feita uma análise desse problema com grades poligonais [6].

O modelo pode ser validado quando comparado a outros reconhecidamente aceitos, tais como o modelo RCWA [27-28] e o Integral [29]. A Figura 3.2 mostra um comparativo dos resultados obtidos com o presente modelo com aqueles previstos pelos métodos RCWA e Integral para os parâmetros listados na Tabela 3.1 [6]. Observa-se que o modelo, apesar da simplicidade, quando comparado, apresenta previsão muito próxima àquela dos modelos mais complexos RCWA e Integral.

**Tabela 3.1 – Parâmetros utilizados na análise comparativa dos modelos [6]**

Parâmetro	Valor
Geometria da Grade	Senoidal: um interface
Periodicidade	$\Lambda = 455 \text{ nm}$
Amplitude	$h = (25; 50) \text{ nm}$
Metal	Ouro
Dielétrico	Água
Polarização	TM



**Figura 3.2 - Análise Comparativa do modelo desenvolvido neste trabalho com os métodos RCWA e Integral.**

O problema de convergência para a geometria poligonal pode ser contornado, para alguns casos, podendo-se obter uma solução que converge aproximadamente para a solução final, representando o perfil como uma expansão truncada de Fourier [30].

A extensão da formulação desenvolvida no presente capítulo para múltiplas interfaces periódicas é feita no Apêndice A. Essa formulação é então empregada para implementação do aplicativo SPRinG de otimização do efeito de RPS, em grades de difração, conforme detalhado no Capítulo 4.

## 4 METODOLOGIA DE OTIMIZAÇÃO DE GRADES METÁLICAS PARA SENSORES RPS

Em problemas de otimização procura-se pelos valores extremos de uma função. O ponto central desta tese é a busca pela otimização da função que define a curva de reflectância sob o efeito de RPS, em grades metálicas, de modo a maximizar a sensibilidade  $S=dR/dn$ . O Capítulo 3 descreve o sistema de equações que governa as amplitudes dos campos transmitidos e refletidos em grades. Neste capítulo propõe-se um procedimento de otimização, baseado nos parâmetros de desempenho obtidos para o caso de interfaces planares na configuração de Kretschmann [20], O procedimento é estendido para o projeto de grades metálicas com máxima sensibilidade a variações do índice de refração do meio externo. Os resultados desse estudo são, portanto, relevantes no projeto e construção de sensores baseados em RPS, configurados em grades metálicas. Ainda neste capítulo é descrito o desenvolvimento do aplicativo *web* denominado SPRinG utilizado nos cálculos e nas simulações desta tese.

### 4.1 OTIMIZAÇÃO NA CONFIGURAÇÃO DE KRETSCHMANN

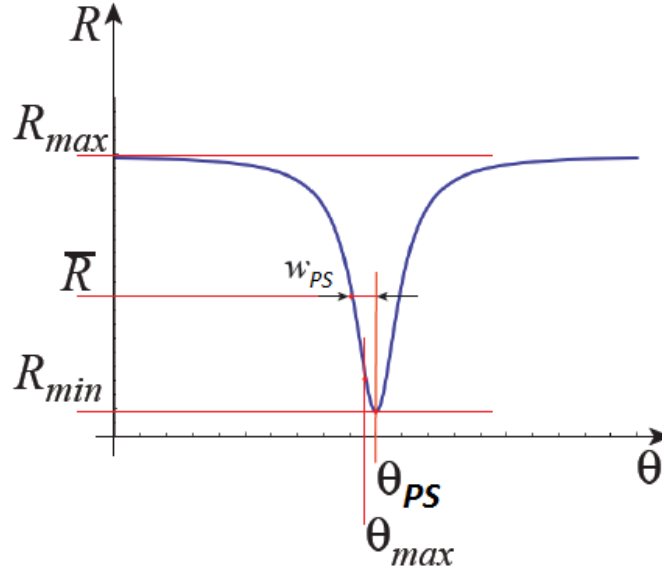
De acordo com Fontana [20], a curva de RPS é caracterizada pela reflectância mínima  $R_{\min}$ , pelo ângulo de ressonância  $\theta_{PS}$  e meia largura à meia altura  $w_{PS}$  ilustrados na Figura 4.1. Fontana mostrou que na configuração de Kretschmann, na aproximação lorentziana, ou seja, no regime de pequenas perdas

$$w_{PS} \ll \theta_{PS} , \quad (4.1)$$

o efeito de RPS de máxima sensibilidade deveria ser observado no ângulo de máxima declividade

$$\theta_{\max} = \theta_{PS} - \frac{4w_{op}}{3\sqrt{3}} , \quad (4.2)$$

com  $w_{op} = w_{SP}$  representando a meia largura à meia altura ótima da curva [20], obtida para uma espessura ótima do filme metálico.



**Figura 4.1 - Curva de RPS e parâmetros representativos na aproximação lorentziana.**

Nessas condições, foi demonstrado que a curva de RPS teria um valor de referência para a razão entre reflectâncias máxima e mínima, dado por

$$R_{\min} / R_{\max} = 1 / 9 , \quad (4.3)$$

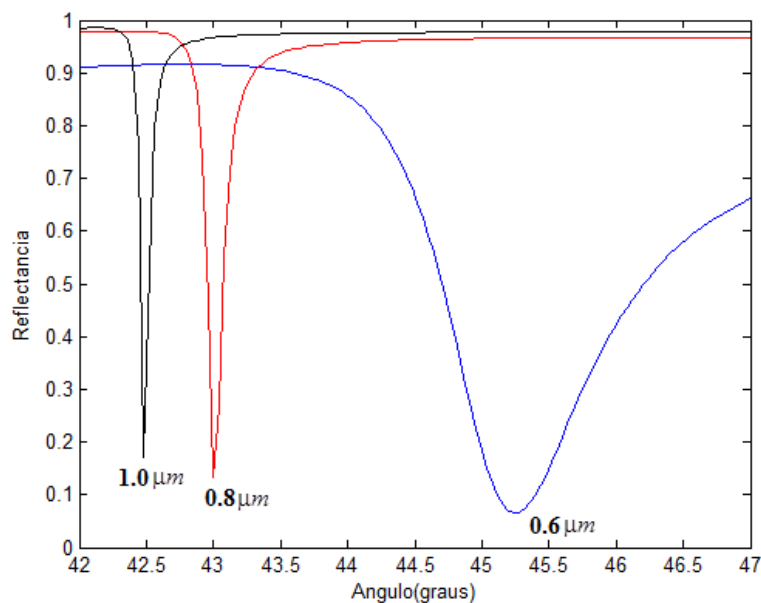
e o maior valor possível da declividade máxima dada por

$$S_{\max} = \left. \frac{dR}{d\theta} \right|_{\theta=\theta_{\max}} = \frac{1}{2\sqrt{3}w_{op}} . \quad (4.4)$$

A Figura 4.2 mostra uma avaliação qualitativa da aproximação lorentziana, ou seja, no regime de pequenas perdas, definido por (4.1), em função do comprimento de onda de excitação. Os parâmetros utilizados na avaliação são os parâmetros ótimos descritos por Fontana [20], para interface Au-vácuo para comprimentos de onda 0.6, 0.8 e 1  $\mu\text{m}$ , listados na Tabela 4.1. Observa-se então que a aproximação lorentziana  $w_{PS} \ll \theta_{PS}$  ocorre com o aumento do comprimento de onda e a reduo estreitamento de  $w_{PS}$ .

**Tabela 4.1 - Parâmetros utilizados na aproximação lorentziana**

Comp. Onda $\lambda$ ( $\mu m$ )	Espessura $d_{otimo}$ (nm)	Ângulo de ressonância $\theta_{PS}$ (graus)
0.6	61	$\approx 45$
0.8	67	$\approx 43$
1.0	63	$\approx 42$

**Figura 4.2 - Aproximação lorentziana da curva de RPS na configuração de Kretschmann com o aumento do comprimento de onda.**

O conhecimento desse resultado é importante uma vez que a maximização da sensibilidade é tanto quanto maior for o comprimento de onda, ou seja, na região próxima ou maior que  $1 \mu m$ , o que será confirmado na sequência deste capítulo.

Os parâmetros de otimização da curva de reflectância,  $\theta_{max}$ ,  $\rho$  e  $S_{max}$  não fazem referência direta à geometria ou a algum parâmetro de sistema embora dependam implicitamente deles. Tais parâmetros são explicitados na função que define a reflectância. No caso da configuração de Kretschmann os parâmetros são: índice de refração do prisma e do meio sensoriado, espessura do filme metálico e a permissividade complexa do metal.

Na próxima seção, é descrita a aplicação dos parâmetros de otimização (4.2), (4.3) e (4.4), na otimização da curva de reflectância do efeito RPS em grades metálicas. Os

parâmetros da grade, período  $\Lambda$ , amplitude  $h$  e espessura  $d$  são explicitados na função que define a reflectância, de acordo com o formalismo desenvolvido no Capítulo 3.

## 4.2 OTIMIZAÇÃO EM GRADES METÁLICAS

Os parâmetros de otimização descritos na Seção 4.1, embora tenham sido obtidos para uma configuração de Kretschmann, devem, em princípio, valer para qualquer curva de reflectância RPS, desde que seja preservada a condição de aproximação lorentziana.

Essa condição independe do tipo de configuração usada para excitação de plásmons de superfícies. Para o caso de uma interface simples de perfil periódico, separando dois meios semi-infinitos, um dos quais metálicos, o problema então é determinar a periodicidade  $\Lambda$  e amplitude  $h$  para um dado comprimento de onda e ângulo de incidência, definidos no projeto do dispositivo sensor.

Para o caso de duas interfaces periódicas de amplitudes distintas, definindo um filme metálico de espessura média  $d$ , tem-se mais dois parâmetros de otimização, ou seja, a espessura  $d$  e a amplitude da segunda interface  $h_2$  e, assim, sucessivamente. Ao longo desta seção, descreve-se a metodologia de otimização para o caso de uma interface simples senoidal.

### 4.2.1 Curva de reflectância em interface senoidal simples

A configuração de interface simples para o desenvolvimento de sensores RPS está ilustrada na Figura 4.3. Assume-se que a interface tem um perfil senoidal da forma

$$s(x) = h \sin(2\pi x / \Lambda). \quad (4.5)$$

Nessa configuração o meio sob teste é considerado o meio de incidência do índice de refração  $n_d$ , assumido não absorvedor. Na prática pode ser um meio gasoso ou aquoso contido em uma célula de reação de material transparente (plástico ou vidro) de forma a permitir a penetração do feixe de luz.

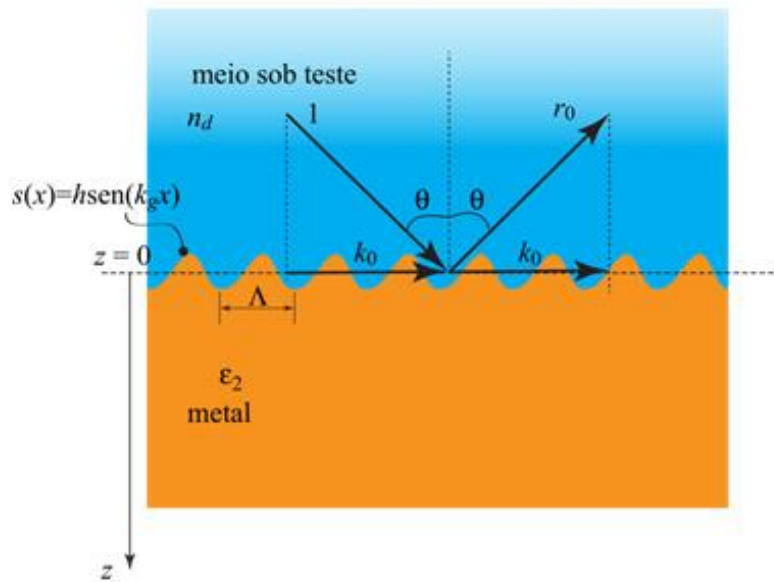
Sendo a espessura  $d$  do metal fisicamente finita, implica na existência de um terceiro meio, conforme Figura 2.4. Entretanto considera-se  $d$  como infinito para espessuras maiores que 300 nm de modo que o terceiro meio, dielétrico, não exerça influência sobre a reflectância.

O ângulo de incidência é  $\theta$  e a componente tangencial do número de onda do campo incidente é simplesmente

$$k_0 = n_d K_v \sin \theta . \quad (4.6)$$

O efeito de RPS é observado na reflexão especular da interface  $r(k_0)$ , de acordo com o formalismo desenvolvido no Capítulo 3. Desse coeficiente obtém-se a reflectância da relação

$$R = |r(k_0)|^2 . \quad (4.7)$$



**Figura 4.3 - Configuração de interface simples para grade senoidal.**

Essa função depende de vários argumentos e pode ser escrita na forma

$$R = f(L, \theta, \lambda, \Lambda, h, n_d, \epsilon_2), \quad (4.8)$$

em que,

- $L$  é o índice de truncamento;
- $\theta$  = ângulo de incidência em radianos;
- $\lambda$  = comprimento de onda em micrometros;

- $\Lambda$  = periodicidade da grade em micrometros;
- $h$  = amplitude da grade da interface 1 em nanômetros;
- $n_d$  = índice de refração do meio dielétrico sob teste; e
- $\varepsilon_2$  = permissividade do metal.

#### 4.2.2 Determinação da periodicidade da grade ótima

Na equação (4.6), dado o comprimento de onda  $\lambda$ , o ângulo de incidência  $\theta_{\max}$ , a permissividade complexa  $\varepsilon_2$  e o índice de refração  $n_d$ , do meio sob teste, definem-se os parâmetros  $\Lambda, h$  que proporcionem a geração de uma curva de reflectância que satisfaça os parâmetros de otimização, tal que o ângulo de incidência seja sintonizado no valor  $\theta_{\max}$  e a inclinação da curva de reflectância em  $\theta_{\max}$  seja o mais próximo possível de  $S_{\max}$ . Com a especificação de  $\theta_{\max}$ , o ângulo de ressonância  $\theta_{PS}$  é estimado de (4.2) e (2.17), para o caso  $m=1$ , obtém-se a aproximação inicial para o período da grade

$$\Lambda = \frac{\lambda}{n_d} \left( \pm \sqrt{\frac{|\operatorname{Re}(\varepsilon_m)|}{|\operatorname{Re}(\varepsilon_m)| - \varepsilon_d}} - \operatorname{sen} \theta_{PS} \right)^{-1}. \quad (4.9)$$

Depois de obtidos os parâmetros da grade é necessário corrigir a sua periodicidade, tendo em vista que o ângulo de ressonância, no caso real, difere daquele previsto pela expressão aproximada válida para uma interface planar simples. Após determinada a amplitude ótima  $h$ , essa correção pode ser obtida diferenciando (2.17), para  $m=1$ , para o caso de se utilizar o sinal positivo, *i.e.*,

$$\operatorname{sen} \theta_{PS} = -\frac{\lambda}{n_d \Lambda} + \sqrt{\frac{|\operatorname{Re}(\varepsilon_m)|}{|\operatorname{Re}(\varepsilon_m)| - n_d^2}}. \quad (4.10)$$

A diferencial do ângulo de ressonância, como função da diferencial do período da grade  $\Delta\Lambda$ , é obtida derivando (4.10), *i.e.*,



$$\cos(\theta_{PS})\Delta\theta_{PS} = \frac{\lambda}{n_d} \frac{1}{\Lambda^2} \Delta\Lambda,$$

o que fornece a correção desejada,

$$\Delta\Lambda = \frac{n_d \cos(\theta_{PS}) \Lambda^2 \Delta\theta_{PS}}{\lambda}. \quad (4.11)$$

#### 4.2.3 Determinação da amplitude ótima

A estimativa para a amplitude da grade ótima é obtida por solução computacional do sistema de equações (3.29) e (3.37). O valor de  $h$  é obtido a partir de um laço de iteração que inicia em um valor  $h_0$  muito pequeno, que é incrementado. Em cada passo de iteração, isto é, para cada valor de  $h$ , a declividade máxima da reflectância em torno de  $\theta_{max}$ , é calculada e comparada com a anterior, e o procedimento é repetido até que o maior valor de declividade máxima seja obtido. Com isso, obtêm-se os valores ótimos de  $\Lambda$  e  $h$  para o caso de uma interface simples. Essa metodologia de otimização independe da geometria da grade.

#### 4.2.4 Medida da sensibilidade

Após a determinação dos parâmetros ótimos da grade  $\Lambda$  e  $h$ , faz-se a medida da sensibilidade do efeito perante variações no índice de refração do meio externo. Para isso, calcula-se a função sensibilidade da relação

$$S_n = \frac{R(\theta_{max}, n_d + \Delta n) - R(\theta_{max}, n_d)}{\Delta n}. \quad (4.12)$$

em que  $R$  é o valor da reflectância no ângulo de máxima declividade e  $\Delta n$  é o incremento no índice de refração do meio externo. Utiliza-se tipicamente um incremento  $\Delta n = 10^{-7}$  nas simulações.

### 4.3 SPRinG

O aplicativo SPRinG apresenta duas principais funcionalidades: a geração de curvas de reflectância e geração de grades otimizadas, em ambos os casos para grades senoidais. O SPRinG foi desenvolvido em interface *web* , para acesso via internet. Nas subseções a seguir, faz-se a descrição dos componentes e do ambiente empregados no SPRinG.

#### 4.3.1 Geração de curva de reflectância

Para a geração de curvas de reflectância para até duas interfaces periódicas, calcula-se  $r(k_0)$ , no sistema composto pelas equações (A.29) e A (30) e, determina-se a reflectância

$$R(\tilde{X}) = |r(k_0)|^2,$$

em que  $\tilde{X}$  é uma matriz coluna dada por

$$\tilde{X} = (L \quad \theta \quad \lambda \quad \Lambda \quad h_1 \quad h_2 \quad d \quad n_{d1} \quad n_{d2} \quad \varepsilon_m)^T, \quad (4.13)$$

em que,

- $L$  = índice de truncamento;
- $\theta$  = ângulo de incidência em radianos;
- $\lambda$  = comprimento de onda em micrometros;
- $\Lambda$  = periodicidade da grade em micrometros;
- $h_1$  = amplitude da grade da interface 1 em nanômetros;
- $h_2$  = amplitude da grade da interface 2 em nanômetros;
- $d$  = espessura do metal em nanômetros;
- $n_{d1}$  = índice de refração do meio de entrada;
- $n_{d2}$  = índice de refração do meio sensoriado;
- $\varepsilon_m$  = permissividade relativa do metal.

### 4.3.2 Geração de grades otimizadas

Os procedimentos para otimização de grades para uma e duas interfaces foram desenvolvidos até o momento. No procedimento para uma interface é calculado o vetor de saída

$$Out1 = (\Lambda_{ótimo} \quad h_{ótimo})^T, \quad (4.14)$$

para uma entrada

$$In1 = (L \quad \theta_{\max} \quad \lambda \quad n_{d1} \quad \varepsilon_m)^T. \quad (4.15)$$

Para duas interfaces é calculado o vetor de saída

$$Out2 = (\Lambda_{ótimo} \quad h_{1ótimo} \quad h_{2ótimo} \quad d_{ótimo})^T, \quad (4.16)$$

para uma entrada

$$In2 = (L \quad \theta_{\max} \quad \lambda \quad n_{d1} \quad n_{d2} \quad \varepsilon_m)^T. \quad (4.17)$$

As etapas que compõem os procedimentos para ambos os casos estão listadas nas Tabelas 4.2 e 4.3. Para duas interfaces, assim como  $h_{1ótimo}$  e  $h_{2ótimo}$ , a espessura  $d_{ótimo}$  também é gerada por iteração iniciando em um valor  $d_0$ . Assim, para cada incremento de  $d$ , executa-se a sequência 05 da Tabela 4.3. O valor inicial  $d_0$  pode ser obtido da referência [20].

**Tabela 4.2 - Procedimento de Otimização para uma interface**

Seq.	Ação	Referência
01	Receber entrada (In1)	Equação (4.15)
02	Calcular o ângulo de ressonância ( $\theta_{PS}$ )	Equação (4.2)
03	Calcular periodicidade da grade ( $\Lambda$ )	Equação (4.9)
04	Calcular amplitude da grade ( $h_1$ )	Seção (4.2.3)
05	Calcular correção da grade ( $\Delta\Lambda$ )	Equação (4.11)
06	Calcular a sensibilidade da grade (S)	Equação (4.12)
07	Gerar saída (Out1)	Equação (4.14)

**Tabela 4.3 - Procedimento de Otimização para duas interfaces**

<b>Etapas</b>	<b>Ação</b>	<b>Referência</b>
01	Receber entrada (In2)	Equação (4.17)
02	Calcular o ângulo de ressonância ( $\theta_{PS}$ )	Equação (4.2)
03	Calcular periodicidade da grade ( $\Lambda$ )	Equação (4.9)
04	Determinar espessura inicial do metal ( $d_0$ )	Fontana [20]
05	Calcular amplitudes das grades ( $h_1, h_2$ )	Seção (4.2.3)
06	Calcular correção da grade ( $\Delta\Lambda$ )	Equação (4.11)
07	Calcular a sensibilidade da grade (S)	Equação (4.12)
08	Gerar saída (Out2)	Equação (4.16)

### 4.3.3 Implementação

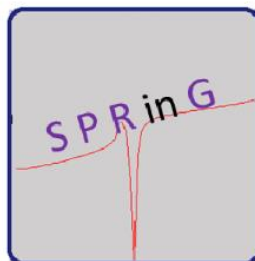
O aplicativo SPRinG é implementado em dois módulos. Um módulo é a interface com o usuário, desenvolvido e implementado para *web*, utilizando o ambiente de desenvolvimento PHP-Apache. O PHP (da sigla do termo inglês *Hypertext Preprocessor*) é um *software* de programação para ambiente *web* e o Apache é um *software* que gerencia o armazenamento de acesso às páginas *web*. Esse ambiente integrado faz parte do pacote de *software* livre XAMPP 1.6.5, utilizado no desenvolvimento do SPRinG.

O outro módulo, chamado de gerador executa os procedimentos descritos para a geração das curvas de reflectância e geração de grades otimizadas, implementados nessa versão inicial em Matlab®2011, gerando módulo executável para ambiente MS-Windows®.

A integração dos módulos é feita por troca de arquivos texto na versão atual e controlada pelo servidor Apache. A dinâmica da aplicação entre usuário, interface *web* e módulo gerador ocorre na seguinte sequência:

- (i) O usuário preenche os dados de entrada na interface *web*;
- (ii) o módulo interface armazena dados em arquivos texto;
- (iii) o módulo gerador é ativado;
- (iv) o módulo gerador lê os dados dos arquivos de entrada;
- (v) o módulo gerador processa os dados de entradas;
- (vi) o módulo gerador grava as saídas em arquivo texto;
- (vii) o módulo interface *web* lê os arquivos de saída;
- (viii) o módulo interface exibe os resultados para o usuário.

A Figura 4.4 mostra a interface inicial do SPRinG, cujo endereço Internet, até a data de conclusão desta tese, está definido na referência [41].



Surface Plasmons Resonance in Gratings - SPRinG

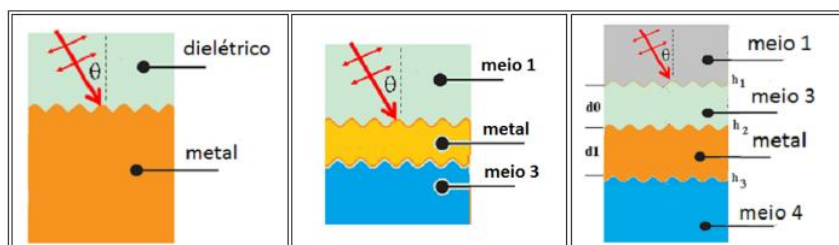
Cálculo da reflectância de grades de difração

Otimização do efeito de RPS em grades de difração

**Figura 4.4 - Interface inicial do SPRinG.**

A opção de geração de grades do SPRinG tem uma variedade de possibilidades de projeto incluindo de uma a três interfaces como mostra a Figura 4.5, amplitudes diferenciadas, escolha do ângulo ótimo de operação desejado, opção para entrada dos índices de refração dos meios dielétricos e permissividade do metal. Nas próximas seções e capítulos, o SPRinG é utilizado como ferramenta de apoio na avaliação do processo de otimização do efeito de RPS em grades de difração.

Geração de Grades senoidais RPS otimizadas: selecione uma grade



[click para retornar](#)

**Figura 4.5 - Opções do SPRinG para otimização do efeito RPS em grades de difração.**

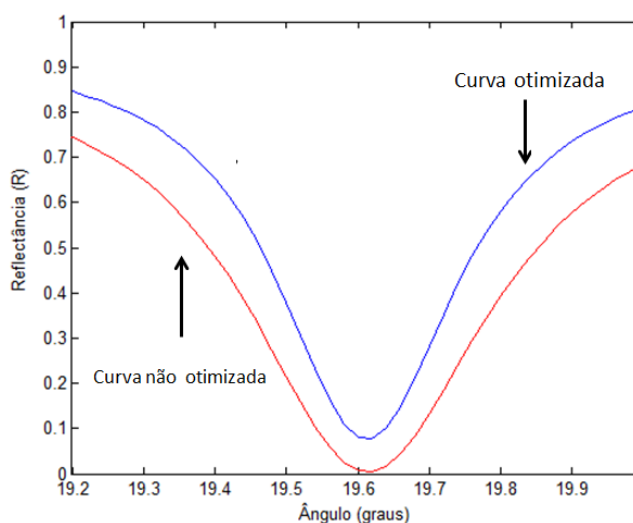
#### 4.4 AVALIAÇÃO DO PROCESSO DE OTIMIZAÇÃO

Nesta seção, são apresentados alguns resultados do processo de otimização obtidos da execução do SPRinG. A Figura 4.6 mostra um comparativo entre as curvas de reflectância de duas grades senoidais de interface simples ar-ouro, sendo uma delas otimizada.

Na Tabela 4.4 estão listados os dados utilizados na comparação entre as curvas. A principal característica da curva otimizada é que a melhor posição do detetor não é no ponto de mínimo da curva e, sim, em  $\theta_{\max}$  que, no caso da curva otimizada do gráfico da Figura 4.6, em torno de 19.5 graus.

**Tabela 4.4 - Parâmetros utilizados na comparação entre as curvas com e sem otimização**

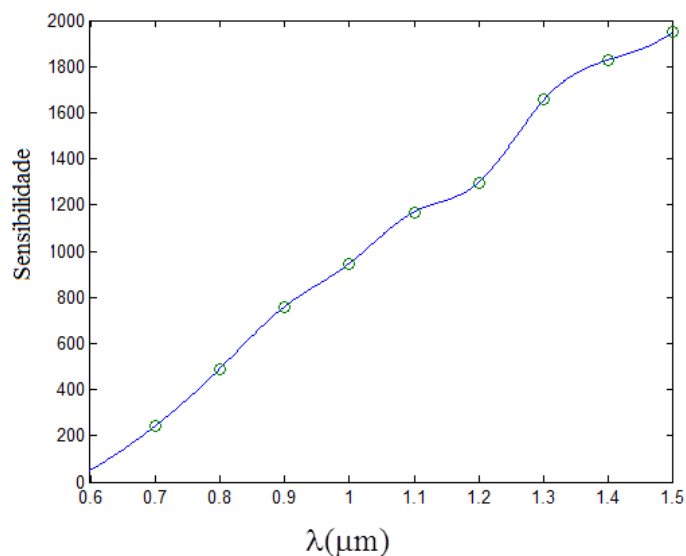
Grade	$\Lambda(nm)$	$h(nm)$	$\lambda(nm)$	S
Não otimizada	1000	25	700	137
Otimizada	1000	20	700	168



**Figura 4.6 - Comparativo entre curvas de reflectância com e sem otimização.**

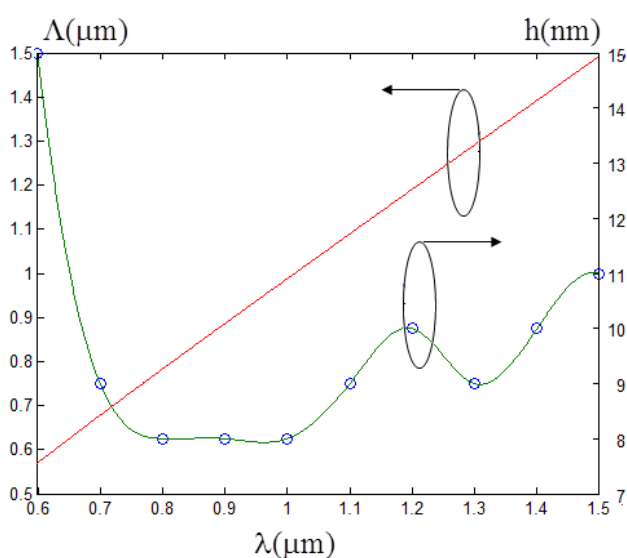
A curva otimizada tem uma sensibilidade de 168 por unidade de índice de refração contra 130 da curva não otimizada. Essa diferença tende a um crescimento significativo na medida em que o comprimento de onda se aproxima de  $1\mu m$ , tendo em vista o afinamento da região de ressonância conforme pode ser observado no gráfico da Figura 4.2.

O gráfico da Figura 4.7 mostra a variação da sensibilidade  $S$  com o comprimento de onda, em grades otimizadas, em incidência normal, para interface simples Ar-Au. O gráfico confirma a análise feita sobre o aumento da sensibilidade com o comprimento de onda.



**Figura 4.7 - Variação da Sensibilidade  $S$  com o comprimento de onda em grades otimizadas em interface simples Ar-Au, com incidência normal.**

O gráfico da Figura 4.8 propicia a escolha dos parâmetros ótimos *i.e.*, período  $\Lambda$  e amplitude  $h$  em função do comprimento de onda  $\lambda$ , para grade senoidal na interface Ar-Au, com filme espesso de ouro ( $> 300$  nm), com incidência normal, através do meio sensoriado.



**Figura 4.8 - Dependência com o comprimento de onda dos parâmetros ótimos de grade senoidal para interface Ar-Au.**

No próximo capítulo é feita uma análise das estruturas naturais de CDs/DVDs metalizados e o potencial dessas estruturas para o desenvolvimento de sensores RPS otimizados.



## 5 GRADES POLIGONAIS

O perfil da interface presente em CDs ou DVDs é do tipo poligonal ao longo da direção radial na superfície. Quando metalizados com filmes de ouro podem exibir o efeito de RPS [21] tornando-se, portanto, bons candidatos como substratos de baixo custo para sensores RPS [21,31]. Dado esse potencial, a análise e subsequente otimização de grades de perfil poligonal torna-se relevante.

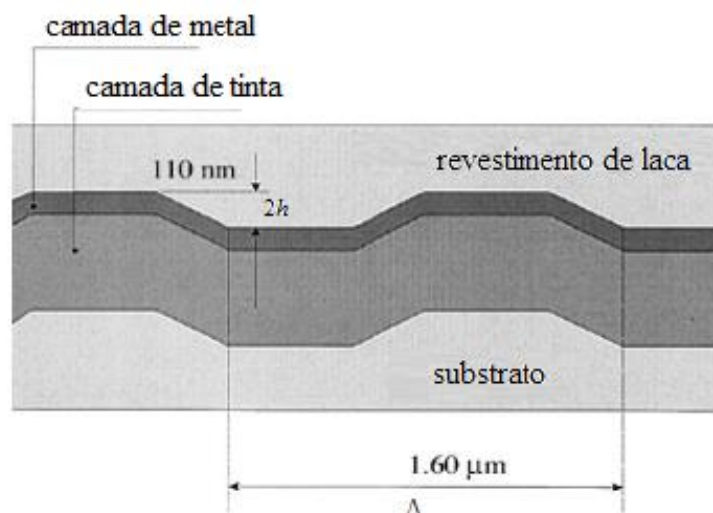
Neste capítulo os resultados obtidos por Fontana [21] para CDs comerciais de ouro são analisados com o emprego do modelo poligonal para o perfil da grade, em vez do modelo senoidal utilizado em [21]. Com o refinamento do modelo, o comprimento onda de ótimo para operação é determinado para esse tipo de estrutura, de forma a viabilizar o desenvolvimento de sensores RPS com máxima sensibilidade com o uso de CDs comerciais.

### 5.1 ESTRUTURA DO CD

A Figura 5.1 mostra uma representação esquemática do perfil de superfície do CD utilizado nos experimentos conduzidos por Fontana [21]. O CD utilizado teve sua estrutura modificada com a remoção do revestimento de laca originalmente presente na estrutura. Dessa forma, a superfície de ouro do CD fica exposta formando, assim, uma interface Au-Ar de perfil poligonal. As especificações do fabricante para o CD, ilustradas na Figura 5.1, são  $\Lambda = 1.6\mu m$  e  $2h = 110nm$ .

### 5.2 RESULTADOS EXPERIMENTAIS

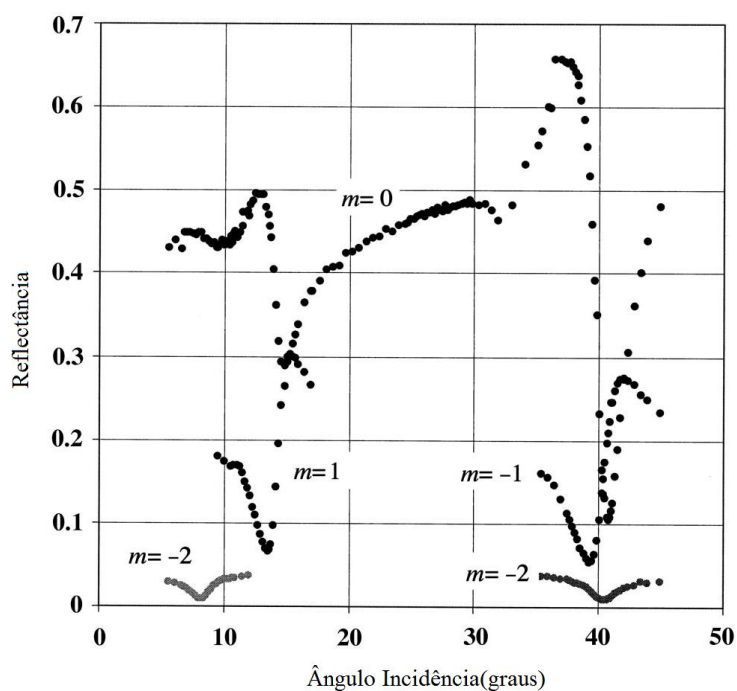
Na referência [21] foi obtido um conjunto de curvas experimentais, a partir da iluminação externa, com polarização TM e comprimento de onda  $\lambda = 632,8nm$ . O ângulo de incidência em relação à direção normal à superfície do CD foi variado no intervalo de 0 a 50 graus. Para os valores de periodicidade  $\Lambda = 1.6\mu m$  e amplitude  $2h = 110nm$ , foram obtidos a permissividade complexa experimental do metal  $\epsilon_m = -10.78 - j0.77$  e o conjunto de curvas de reflectância, associadas a algumas ordens de difração  $(0, \pm 1, \pm 2)$ . Os parâmetros estão descritos na Tabela 5.1 e as curvas são mostrados no gráfico da Figura 5.2.



**Figura 5.1 - Representação esquemática da estrutura e geometria do CD utilizada no experimento. Referência [21].**

**Tabela 5.1 - Parâmetros para obtenção da curva de reflectância mais próxima**

$\lambda(\text{nm})$	$\Lambda(\mu\text{m})$	$2h(\text{nm})$	$\epsilon_m$
632.8	1600	110	$-10.78 - 0.77j$



**Figura 5.2 – Curva de reflectâncias do CD obtidas de modo experimental [21].**

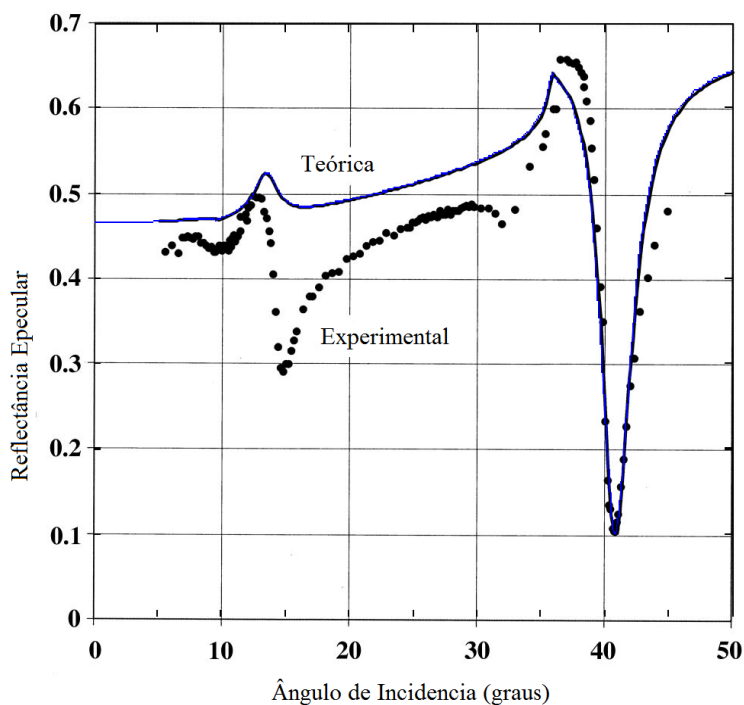
### 5.3 MODELAGEM DE ESTRUTURA DE CD COMO GRADE SENOIDAL

A partir dos resultados experimentais, mostrados na Figura 5.2., o próximo passo é a construção de um modelo para reproduzir teoricamente os resultados experimentais. Em [21] foi proposto então um modelo de grade senoidal de interface simples para descrever a reflectância de ordem zero no CD. A geometria da interface mostrada na Figura 5.1 é descrita então por

$$s(x) = h \sin(K_g x). \quad (5.1)$$

O gráfico da Figura 5.3 mostra a curva teórica gerada pelo modelo senoidal utilizando os mesmos parâmetros obtidos experimentalmente e descritos na Tabela 5.1. Observa-se no gráfico que a curva teórica, em linha contínua, não consegue capturar todos os detalhes da curva experimental de mesma ordem. Este resultado já era esperado, principalmente porque a geometria da grade não é senoidal, entretanto, consegue capturar boa parte da ressonância principal que ocorre em torno de  $\theta_{PS} = 40$  graus.

Na próxima seção é proposto um modelo baseado em grades poligonais em uma tentativa de melhor explicar os detalhes observados na curva experimental.



**Figura 5.3 - Curva experimental e curva teórica baseada no modelo senoidal para refletância de ordem zero, em CDs.**

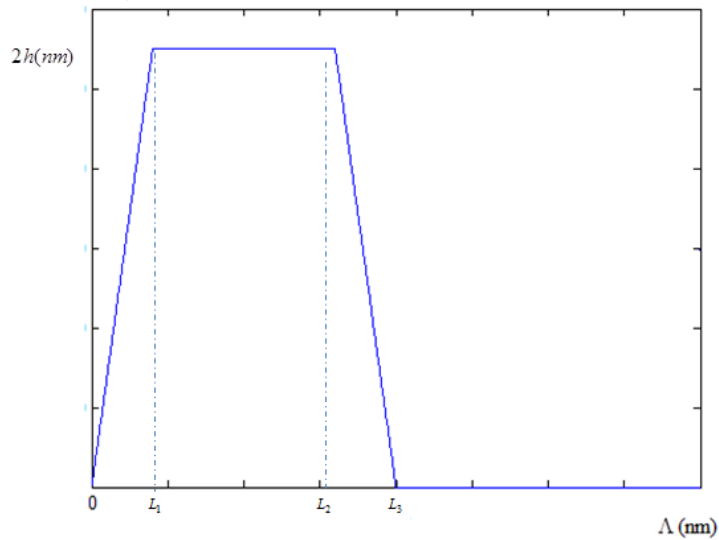
#### 5.4 MODELAGENS DE ESTRUTURA DE CD COMO GRADE POLIGONAL

É proposto um modelo considerando a geometria da grade como sendo poligonal, descrita pela função

$$s(x) = \begin{cases} \frac{h}{L_1} x & \text{se } 0 \leq x \leq L_1 \\ h & \text{se } L_1 \leq x \leq L_2 \\ \frac{(-h)}{[L_3 - L_2]} x + \frac{h(L_3)}{[L_3 - L_2]} & \text{se } L_2 \leq x \leq L_3 \\ 0 & \text{se } L_3 \leq x \leq \lambda_g \end{cases} \quad (5.2)$$

ilustrada na Figura 5.4.  $L_1$ ,  $L_2$  e  $L_3$  são parâmetros ajustáveis,  $h$  é a amplitude e  $\Lambda$  é a periodicidade da grade. Similar ao modelo senoidal considera-se a grade com interface Ar-Au descrita pela equação (5.2).

Os coeficientes de transmissão e reflexão são obtidos substituindo (5.2) em (3.40) e resolvendo o sistema formado pelas Equações (3.38) e (3.39), ou seja,



**Figura 5.4 - Modelo de grade poligonal proposto para estudo do efeito PRS em CDs.**

$$C_m(q) = \frac{1}{\lambda_g} \int_0^{\lambda_g} e^{-jq[s(x)]} e^{jmk_g x} dx, \quad (5.3)$$

com  $q$  representando o parâmetro associado à componente  $z$  do vetor de onda em cada meio.

Substituindo (5.2) em (5.3) e resolvendo a integral resulta em

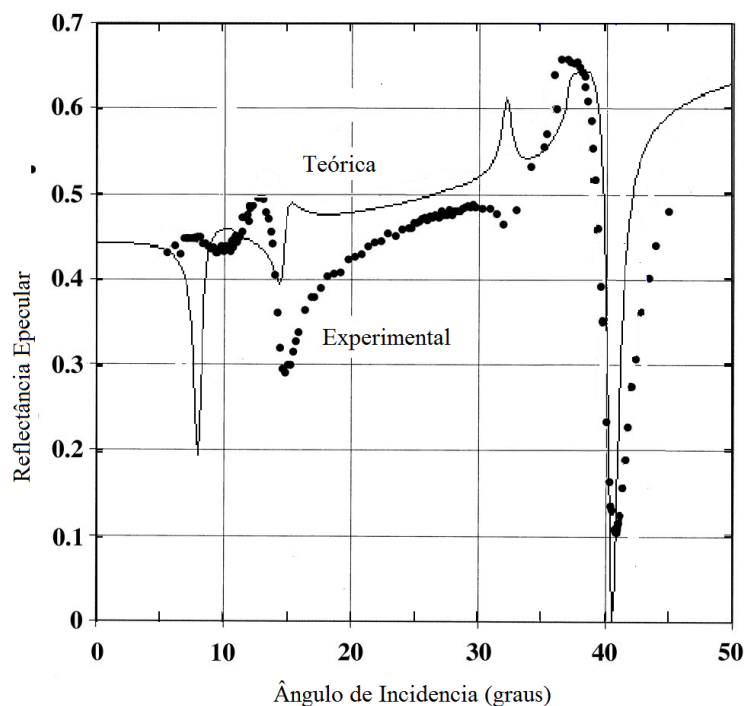
$$\begin{aligned}
 C_m(q) = & \frac{L_1}{[qh - mk_g L_1]} \left[ e^{-j[qh - mk_g L_1]} - 1 \right] \\
 & - \frac{1}{mk_g} e^{-j[qh]} \left[ e^{jmk_g L_2} - e^{jmk_g L_1} \right] \\
 & - \left[ \frac{[L_3 - L_2]}{[qh + mk_g [L_3 - L_2]]} \right] e^{-j \left[ \frac{hqL_3}{[L_3 - L_2]} \right]} \left( e^{j \left[ \frac{L_3 [qh + mk_g [L_3 - L_2]]}{[L_3 - L_2]} \right]} - e^{j \left[ \frac{L_2 [qh + mk_g [L_3 - L_2]]}{[L_3 - L_2]} \right]} \right) \cdot \quad (5.4) \\
 & - \frac{1}{mk_g} \left[ e^{jmk_g L_3} - e^{jmk_g L_2} \right]
 \end{aligned}$$

Com a expressão (5.4) é possível obter todos os coeficientes que aparecem nas equações (3.29) e (3.37) fazendo  $q = p_{10}, p_{1l}$  e  $p_{2l}$ . Com isso, o sistema de equações é resolvido, permitindo, assim, determinar a reflectância de ordem zero para a grade poligonal. Na próxima seção são apresentados os resultados obtidos com a implementação computacional deste sistema de equações em um ambiente de simulação desenvolvido em Matlab® R2011a.

## 5.5 RESULTADOS DA IMPLEMENTAÇÃO DO MODELO POLIGONAL

O objetivo da implementação do modelo descrito na seção 5.4 é obter uma curva de reflectância mais próxima possível da curva experimental obtida por Fontana [21], utilizando os mesmos parâmetros experimentais descritos na Tabela 5.1. Além disso, outro parâmetro importante a ser considerado neste modelo é o truncamento  $L$  que opera diretamente convergência da solução e da curva de reflectância a qual será discutida no final deste capítulo. Os parâmetros  $L_1$ ,  $L_2$  e  $L_3$  foram determinados a partir de relações entre as arestas e o comprimento de onda da geometria do CD, constantes na documentação do dispositivo, sendo:  $L_1 = 400nm$ ,  $L_2 = 800nm$  e  $L_3 = 1200nm$ .

O gráfico da Figura 5.5, abaixo, mostra a curva teórica, em linha contínua, obtida com o modelo poligonal, para o conjunto de parâmetros listados na Tabela 5.1, juntamente com a curva experimental de ordem zero, com parâmetros descritos na Seção 5.3.



**Figura 5.5 - Comparativo entre curva teórica e experimental, do modelo poligonal proposto.**

## 5.6 ANÁLISE DOS RESULTADOS

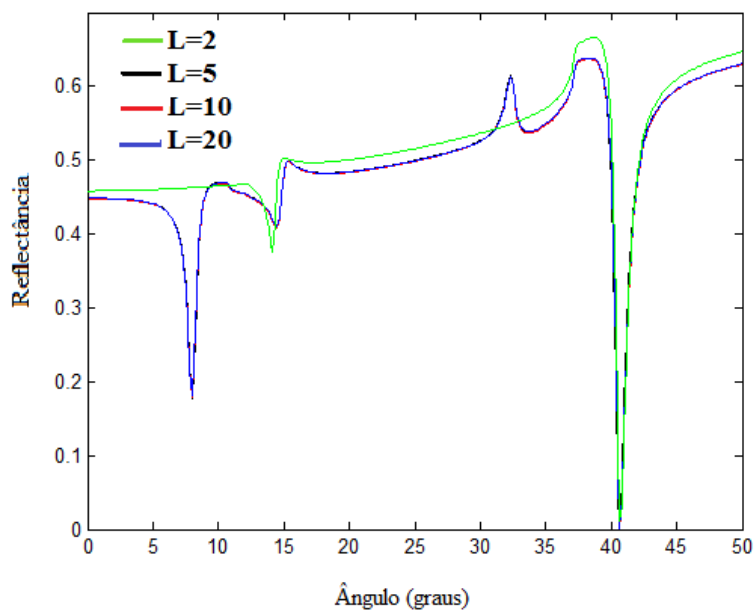
Quando comparado ao modelo senoidal, observa-se uma melhoria dos resultados com a captura de mais detalhes da curva experimental. Os dois modelos capturam bem a ressonância mais profunda em torno de 40 graus. O modelo poligonal consegue, ainda, capturar alguns outros detalhes das ressonâncias secundárias nos pontos onde ocorrem na curva experimental, mas como valores diferentes de amplitudes.

As diferenças entre o modelo teórico e o experimental podem ser devidas a algumas simplificações no modelo. Por exemplo, o modelo é baseado em interface simples e não é considerada a espessura finita do metal e a possível influência da subcamada de tinta, mostrada na Figura 5.1, presente na estrutura real do CD.

Outra possibilidade de discrepância seria a não validade de uso da expansão de Rayleigh para grades com geometrias poligonais devido a dificuldades na convergência [30]. Para verificar essa possibilidade, índices de truncamento de 2, 5, 10 e 20 foram utilizados nas simulações. Os resultados das simulações estão mostrados na Figura 5.6. Como pode ser observada nesse intervalo, a curva se mantém estável em forma com

pequenas variações na amplitude, inclusive na região das ressonâncias secundárias. Isso permite concluir que as discrepâncias observadas não são devidas a problemas de convergência.

Com essa análise, verifica-se a necessidade de considerar a espessura finita do filme, o que será feito em trabalhos futuros, uma vez que a versão atual do SPRinG está implementada somente para grades senoidais.



**Figura 5.6 - Convergência da curva para  $L = 2, 5, 10$  e  $20$ .**

### 5.7 DETERMINAÇÃO DO COMPRIMENTO DE ONDA ÓTIMO PARA O CD

Considerando o aproveitamento de CDs e DVDs como grades para sensores RPS, é necessário definir em que comprimento de onda obtém-se a máxima sensibilidade para incidência normal.

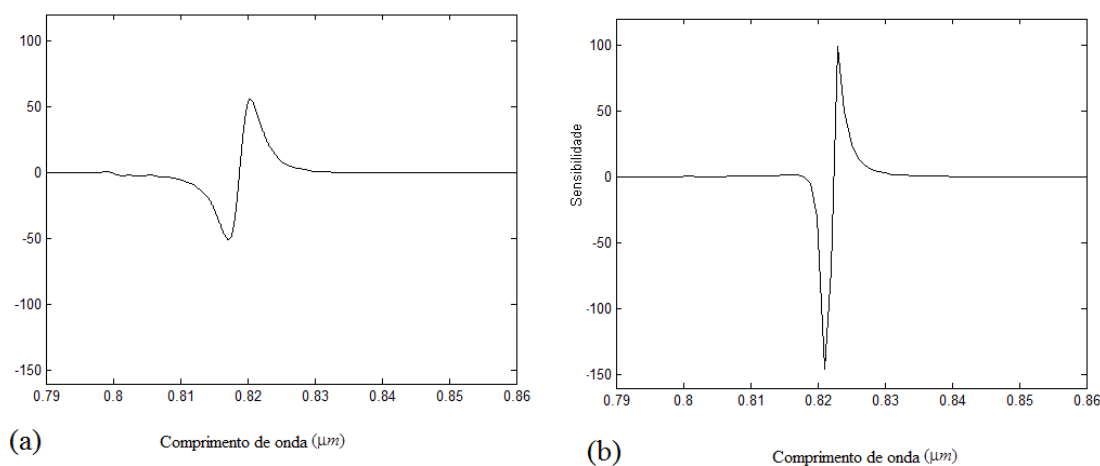
O comprimento da onda ótimo é estimado pela variação do comprimento de onda e como consequência a permissividade do metal que é determinada pela relação de dependência espectral da função permissividade complexa do ouro obtida em [42]. Os parâmetros fixos da grade, periodicidade e amplitude, são aqueles descritos na Tabela 5.1. Para cada valor de comprimento de onda é determinada a sensibilidade  $S$ . Com isso pode-se conseguir uma estimativa da região espectral de máxima sensibilidade e de que forma os modelos diferem nessa previsão.

A reflectância é calculada e a sensibilidade determinada de acordo com a Equação (4.12). Com base nessas considerações, as simulações foram realizadas tanto para grades senoidais quanto para grades poligonais com os parâmetros mostrados na Tabela 5.1, na faixa espectral de 0.6 a 1.5 $\mu\text{m}$ .

Os resultados estão mostrados na Figura 5.7., na qual se observa que os modelos fornecem valores máximos da sensibilidade na região espectral em torno de 820 nm. No entanto, em termos comparativos observou-se que a sensibilidade no modelo poligonal é aproximadamente o dobro da senoidal. Os valores exatos são:  $\lambda = 0.820\mu\text{m}$ ,  $S= 52$  para o modelo senoidal, e  $\lambda = 0.819\mu\text{m}$ ,  $S=190$ , para o modelo poligonal.

O resultado mais relevante é a pequena diferença entre os comprimentos de onda ótimos, o que significa que os dois modelos são coerentes entre si e compartilham algo em comum em relação aos valores experimentais, possivelmente a captura da ressonância mais profunda.

Esse estudo preliminar mostra que é possível o emprego de CDs para operação sob incidência normal e que esse ponto de operação deve ocorrer na região espectral em torno de 820 nm. As diferenças observadas, no entanto, reforçam a necessidade de refinamento do modelo para permitir uma melhor previsão do desempenho do efeito de RPS para o desenvolvimento de sensores com o emprego de CDs comerciais.



**Figura 5.7 - Sensibilidade espectral dos modelos de grades em CDs (a) senoidal  
(b) poligonal.**



## 6 PROPOSTA DE SENSORES OTIMIZADOS BASEADOS EM RPS COM INCIDÊNCIA NORMAL

Neste capítulo é proposto o uso de grades de difração otimizadas para exibição de efeito RPS com incidência normal. Nessa configuração torna-se possível o desenvolvimento de sistemas sensores mais simples com o uso de fibras ópticas, CDs e DVDs.

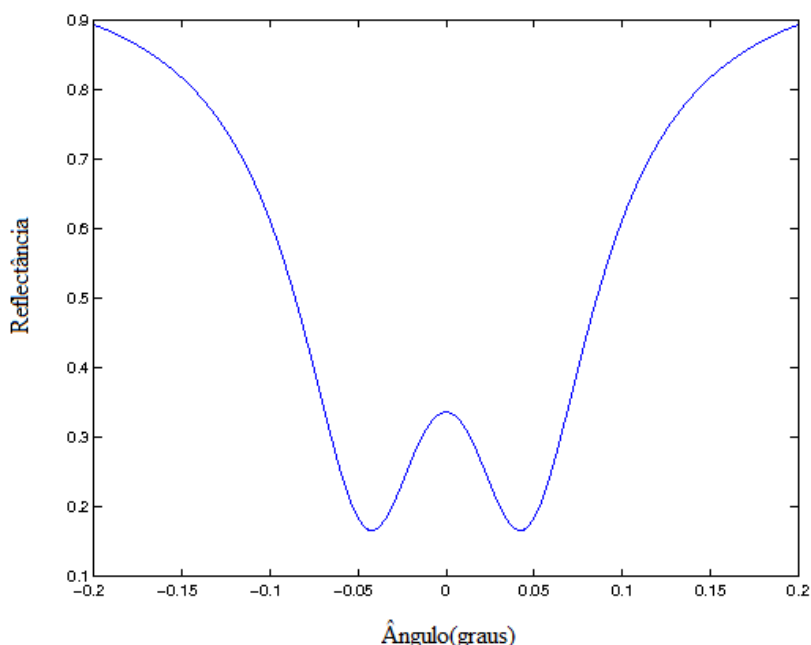
### 6.1 RPS SOB INCIDÊNCIA NORMAL

Em espectroscopia de modulação do comprimento de onda, geralmente empregada para a detecção de linhas de absorção fracas, o comprimento de onda é modulado em uma dada frequência em torno do valor correspondente ao ponto de máxima absorção na qual a derivada da curva de absorção é nula [32]. Em torno desse ponto, a curva de absorção tem dependência quadrática com o comprimento de onda e a detecção de uma componente de segundo harmônico do sinal permite a identificação específica da linha.

Uma técnica semelhante pode ser empregada para detectar o efeito de RPS, modulando a fase, o ângulo de incidência ou o comprimento de onda da fonte de luz. Além disso, seria importante para a estabilidade do dispositivo sensor que o ponto operacional do efeito de RPS permanecesse com declividade nula, mesmo perante flutuações no índice de refração ou no comprimento de onda da fonte de luz. Para isso, seria necessário o desenvolvimento de sensores RPS com sensibilidade máxima no ponto de declividade nula da curva de reflectância. Na curva tradicional de RPS o ponto de declividade nula ocorre no mínimo da ressonância que é o ponto de sensibilidade mínima perante variações do índice de refração.

Propõe-se nesta tese o emprego de grade de difração projetada de tal forma a permitir atingir a sensibilidade máxima no ponto de declividade nula. Isto pode ser obtido para incidência normal do feixe de luz em relação ao plano médio da interface. Sob essa condição o feixe de entrada, auxiliado pelo perfil periódico da grade, acopla parcialmente com dois plásmons de superfície contra-propagantes e a curva de resposta apresenta sensibilidade máxima no ponto de declividade nula.

A Figura 6.1 gerada pelo SPRinG, para uma interface simples Ar-Au para  $\lambda = 850nm$ , mostra um exemplo de uma curva otimizada com declividade nula em  $\theta_{max} = 0$  graus.



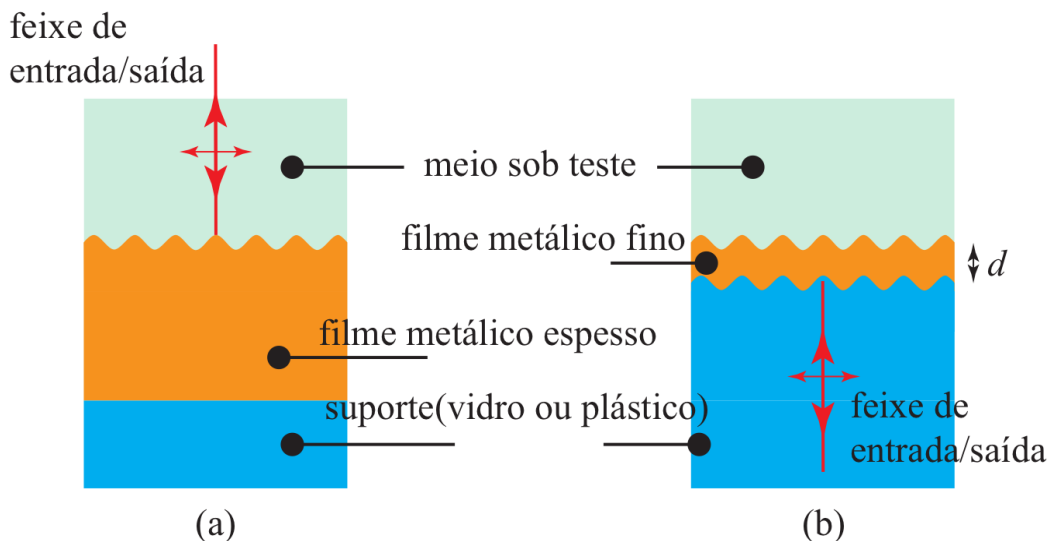
**Figura 6.1- Exemplo curva de reflectância otimizada para máxima sensibilidade em interface Ar-Au, para  $\lambda = 850nm$ .**

Um benefício de se poder operar nesse esquema é a possibilidade de fabricação, por exemplo, de sensores em fibra baseados em RPS, terminados em uma superfície metálica de perfil periódico, com plano médio alinhado ortogonalmente em relação ao eixo longitudinal da fibra abrindo, assim, a possibilidade de desenvolvimento de uma larga gama de novos dispositivos.

## 6.2 POSSÍVEIS CONFIGURAÇÕES

Duas possíveis configurações são propostas nesta tese, conforme cenários (a) e (b) da Figura 6.2. Na incidência externa, cenário 6.2(a), cuja configuração corresponde a um sensor de superfície frontal, com um filme metálico espesso tendo superfície de perfil periódico, com o feixe de luz sendo transmitido através do meio sob teste antes de ser refletido pela superfície metálica.

A incidência interna, cenário 6.2(b), é composta de um filme metálico de espessura  $d$  depositado sobre uma grade de difração no material de suporte (em geral feito de vidro ou plástico). Uma vez que, do ponto de vista de fabricação dessa estrutura, o filme é depositado sobre o suporte de perfil periódico, as interfaces do filme exibem perfil de mesma periodicidade, mas de amplitudes distintas. Esta seria uma possível configuração de um sensor em fibra óptica, em que o meio de suporte é a própria fibra utilizada para excitação e detecção do efeito de RPS da luz refletida para a extremidade de entrada.



**Figura 6.2 - Configurações propostas para RPS para incidência normal (a) externa e (b) interna.**

### 6.2.1 Efeito de RPS em filmes de ouro para incidência normal externa

Para a configuração ilustrada na Figura 6.2(a), os cálculos foram realizados utilizando o SPRinG, admitindo que o feixe de luz, polarizado no plano de incidência, atinge a superfície periódica do metal através do meio sob teste. O filme metálico é espesso o suficiente para não haver interferência da interface metal-suporte, mostrada na Figura 6.2(a).

O meio sob teste é considerado não absorvente de índice de refração  $n$ . Para incidência normal, o ângulo de incidência é fixado em  $\theta = 0$  graus. A escolha de ouro como metal foi feita em vista de sua boa estabilidade química, em soluções aquosas, e por ser utilizado na maioria de dispositivos sensores baseados em RPS. As constantes ópticas para o ouro foram obtidas a partir de valores tabelados na literatura [33].

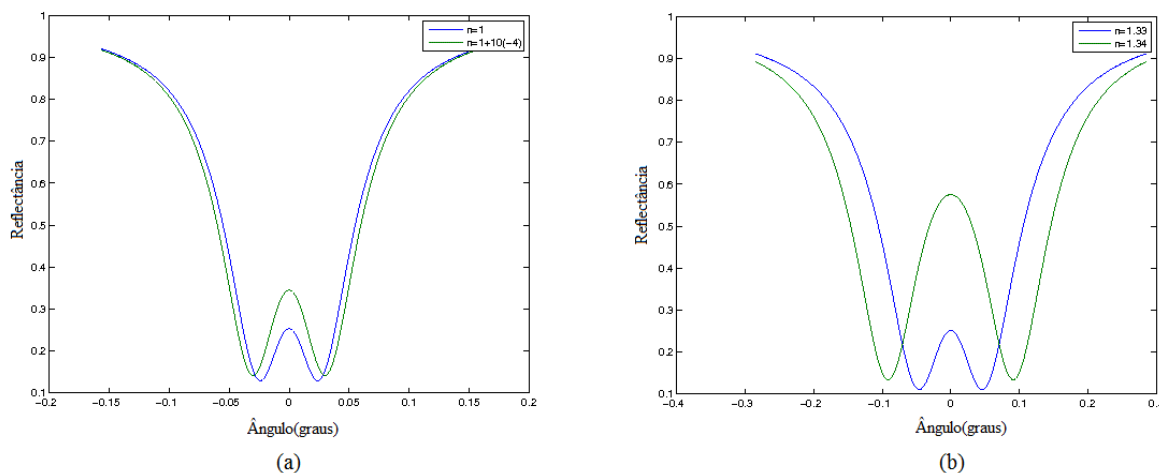
A Figura 6.3(a) mostra o grau de variação na reflectância em  $\theta_{\max} = 0$  graus, para uma variação incremental de  $10^{-4}$  no índice de refração do meio sob teste, tendo valor inicial  $n = 1$ , um exemplo típico de aplicação em meios gasosos. Nessa simulação, o sensor foi projetado para operação no comprimento de onda de  $1\mu m$  e os parâmetros obtidos para a grade otimizada estão descritos na Tabela 6.1.

A Figura 6.3(b) mostra o grau de variação na reflectância, para uma variação incremental de  $10^{-2}$  no índice de refração do meio sob teste, tendo um valor inicial  $n=1.33$ ,

que é o valor típico em meio aquoso, mantendo os outros parâmetros de entrada inalterados. Os parâmetros obtidos para a grade também são descritos na Tabela 6.1, em outro par de simulações, para essa configuração. Em outro par de simulações para essa configuração, o comprimento de onda é aumentado para  $1.3\mu m$  tanto para  $n=1$  quanto para  $n=1.33$ . Os resultados são mostrados no gráfico da Figura 6.4(a), com parâmetros listados na Tabela 6.1.

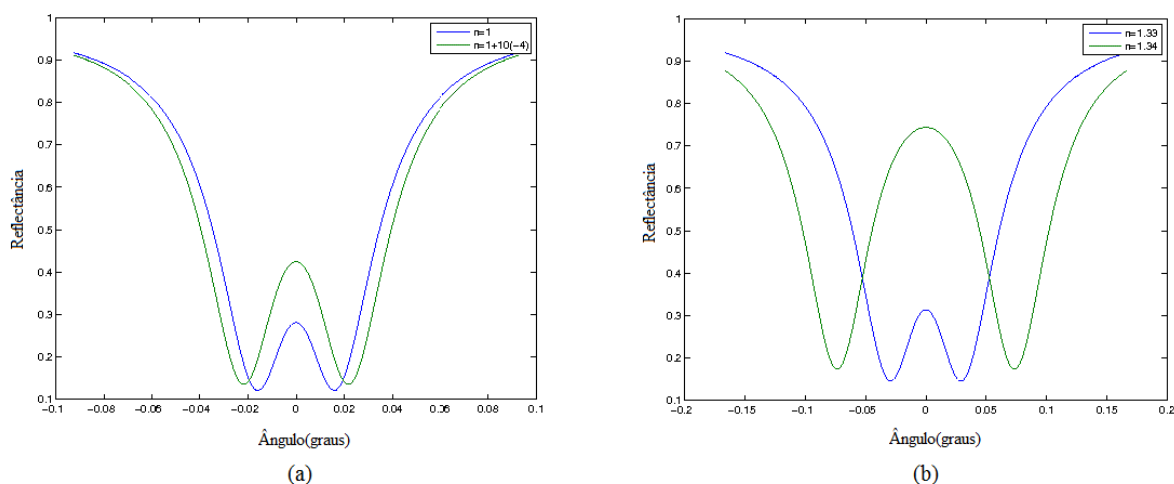
**Tabela 6.1 - Parâmetros de entrada e saída do SPRinG, referentes às curvas geradas e mostradas nas Figuras 6.3 e 6.4**

Ref.	$\lambda$ (nm)	$\Lambda$ (nm)	h(nm)	d(nm)	Sensibilidade
Fig. 6,3(a)	1000	987.61	10	200	927
Fig. 6,3(b)	1000	735.33	9	200	380
Fig. 6,4(a)	1300	1291.2	12	200	1500
Fig. 6,4(b)	1300	965.67	10	200	650

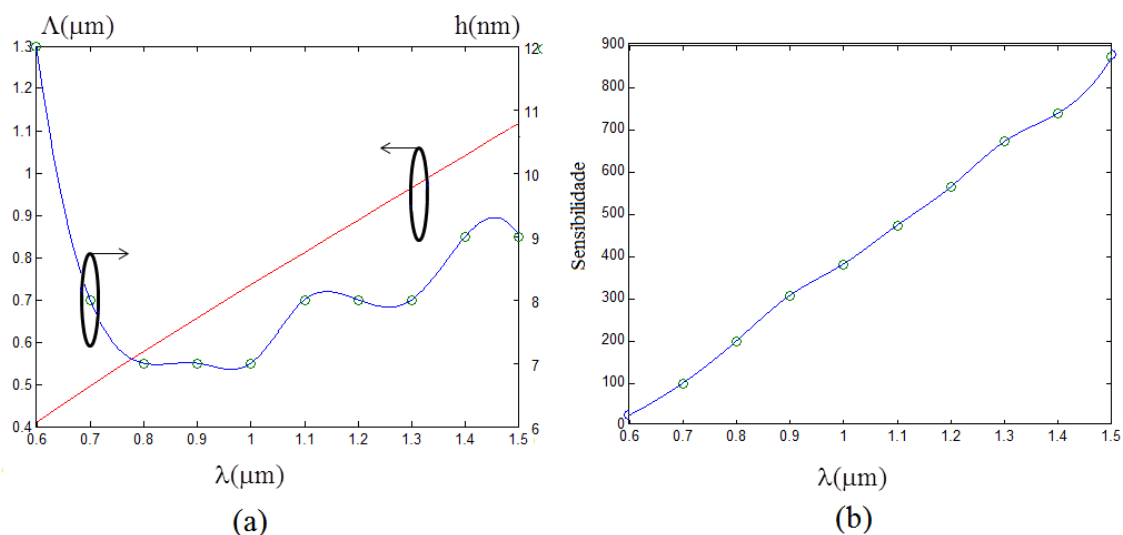


**Figura 6.3 – Variação da reflectância em função do índice de refração para incidência normal externa e  $\lambda = 1000nm$ , em interface (a) Ar-Au. (b) Água-Au.**

Os gráficos das Figuras 4.7 e 4.8 propiciam a escolha dos parâmetros de uma grade otimizada na região espectral entre  $0.6\mu m$  e  $1.5\mu m$  para meios gasosos,  $n \approx 1$ , em interface simples Ar-Au em incidência normal externa. Os gráficos da Figura 6.5(a) e 6.5(b) propiciam a escolha dos parâmetros para meios aquosos,  $n \approx 1.33$ . Para o meio aquoso a dependência espectral do índice de refração de água foi obtido em [34]. As curvas obtidas permitem projetar um sensor de sensibilidade máxima, no comprimento de onda correspondente para operação com incidência normal.



**Figura 6.4 – Variação da reflectância em função do índice de refração com incidência normal externa e  $\lambda = 1300\text{nm}$ , para interface (a) Ar-Au. (b) Água-Au**



**Figura 6.5 - Dependências espectrais (a) dos parâmetros ótimos e (b) sensibilidade em grade de ouro para aplicações em meios aquosos.**

Duas observações importantes podem ser feitas a partir das Figuras (4.7), (4.8) e (6.5). Em primeiro lugar, pode-se notar que a sensibilidade no ar, por exemplo, aumenta por um fator de aproximadamente 40, pela mudança do comprimento de onda de operação de  $0.6\mu\text{m}$  para  $1.5\mu\text{m}$ , chegando a um valor de cerca de 2000. A segunda observação a ser destacada é sensibilidade de 2.4 vezes maior, obtida em meio gasoso, relativamente àquela obtida em meio aquoso. Este é um efeito esperado uma vez que o efeito de RPS é muito mais acentuado em meios gasosos.

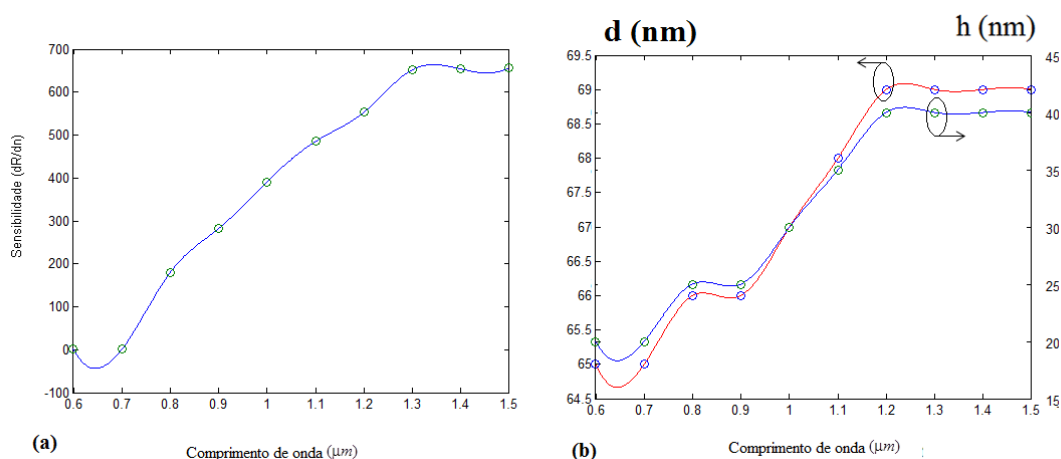
### 6.2.2 Efeito de RPS em filmes de ouro para incidência normal interna

Diferente da configuração mostrada na Figura 6.2(a), a configuração para incidência normal interna, Figura 6.2(b), envolve a otimização de duas interfaces periódicas, bem como a espessura do filme metálico.

Nesta configuração, o feixe de luz polarizado no plano de incidência atinge a superfície periódica do metal através do suporte como, por exemplo, a fibra óptica. O filme metálico é fino o suficiente de modo que as variações do índice de refração do meio sob teste modulem a luz refletida do metal de volta para o meio suporte.

Com o uso do SPRinG foram aplicados os mesmos testes de desempenho como no caso de incidência externa. A quantidade e as possibilidades de configuração de parâmetros afetam o desempenho como, por exemplo, uma ou duas interfaces senoidais, diversas combinações de amplitudes para as interfaces e a espessura do filme metálico, aumentam a complexidade do problema.

Para as opções de projeto disponíveis no SPRinG os melhores resultados, em relação à sensibilidade, foram obtidos para a configuração com interface suporte-metal senoidal e interface metal-meio sob teste, planar. Neste caso, a variação da sensibilidade com o comprimento de onda para o meio gasoso é mostrada no gráfico da Figura 6.6(a) e a 6.6(b) mostra a variação da espessura  $d$ , do metal e da amplitude  $h$ , da interface senoidal suporte-metal.

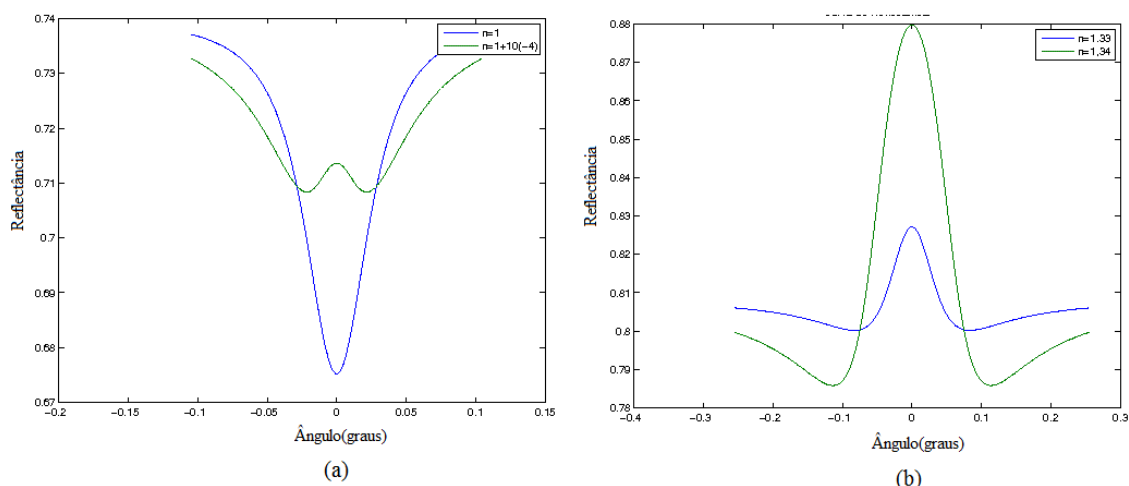


**Figura 6.6 - Dependências espectrais para incidência interna em meio gasoso (a) para a Sensibilidade (b) para os parâmetros ótimos  $d$  e  $h$ .**

Embora menos sensível que a configuração 6.2(a) e mesmo sendo, por enquanto, a melhor configuração para duas interfaces, essa configuração apresenta uma reduzida faixa dinâmica para a variação da reflectância. A faixa é sempre menor que 0.5, devido à falta de profundidade da curva no ponto de declividade zero, em  $\theta_{\max} = 0$ .

Os gráficos da Figura 6.7 ilustram bem essa limitação de faixa dinâmica. Neste caso, para um comprimento de onda de  $1\mu m$ , com sensibilidade  $S$  em torno de 300 para o meio gasoso e 150 para o aquoso. Entretanto, como mostra a Figura 6.7(a) para o meio gasoso a faixa dinâmica inicia em 0,67 e 0.82 para o meio aquoso conforme Figura 6.7(b).

Após experimentos com duas interfaces senoidais, observou-se a necessidade de se modificar o SPRinG para permitir mais opções de amplitudes no projeto de grades com duas interfaces, para buscar outros resultados com uma maior faixa dinâmica, o que será realizado na continuidade desta tese.



**Figura 6.7- Curva de reflectância em incidência normal interna com faixa dinâmica reduzida (a) meio gasoso (b) meio aquoso.**

## 7 CONCLUSÕES E PROPOSTA DE TRABALHOS FUTUROS

As principais contribuições desta tese são:

- Desenvolvimento do software SPRinG para geração de grades metálicas otimizadas para uso em projeto de sensores baseados em RPS;
- Desenvolvimento de metodologias para determinação do comprimento de onda ótimo para sensores RPS baseados em CDs;
- Proposta de novas aplicações para sensores RPS, baseados em incidência normal interna e externa.

As propostas desta tese são correlacionadas tendo como foco central a hipótese de que é possível determinar parâmetros estruturais de grades metálicas, como periodicidade, amplitude e espessura para o desenvolvimento de sensores RPS, com máxima sensibilidade, para um dado comprimento de onda e sob incidência normal.

A proposta de investigar o efeito RPS em CDs/DVDs passa necessariamente pela abordagem de grades poligonais. Apesar das diferenças entre as curvas teóricas geradas pelos modelos senoidal e poligonal e a curva experimental, os dois modelos conseguem capturar a ressonância mais profunda mesmo usando os parâmetros experimentais da grade. Além disso, os dois modelos prevêem a mesma região do espectro de comprimento de onda para ponto ótimo de operação do CD, em incidência normal, a saber, em torno de 820 nm. Este é o resultado mais importante desta investigação, pois um terceiro modelo mesmo que elimine as discrepâncias não acrescentará mais detalhes na ressonância principal e, portanto, é provável que não altere a região espectral de trabalho já encontrada. A determinação da região espectral de comprimento de ondas ótimo de trabalho possibilita, então, o aproveitamento destes dispositivos, CDs ou DVDs, como sensores RPS de baixo custo em incidência normal.

Também são propostas e apresentadas estratégias para novas aplicações de grades senoidais otimizadas em incidência normal. Um benefício de se poder operar nesse esquema é a possibilidade de fabricação, por exemplo, de sensores em fibras ópticas baseados em RPS, terminados em uma superfície metálica de perfil periódico, com plano médio alinhado ortogonalmente em relação ao eixo longitudinal da fibra abrindo, assim, a possibilidade de desenvolvimento de uma larga gama de novos dispositivos. São apresentados dois cenários, a saber, a incidência externa e a incidência interna, conforme descrito nas Seções 6.2.1 e 6.2.2. Os resultados, no caso de incidência externa, mostram



que para cada variação de  $10^{-4}$  no índice de refração do meio gasoso sensoriado obtém-se um acréscimo de 10% na reflectância. Este resultado pode ser utilizado para projetos de sensoriamento de meios transparentes, tipicamente meios gasosos, dado que a luz atravessa o meio sensoriado para alcançar o metal. Também são interessantes os resultados obtidos para incidência interna, que apresentam possibilidades de utilização em sensoriamento de meios não transparentes, como é o caso de meios aquosos, tais como em biossensores.

Outra observação em relação a novas aplicações é que neste novo cenário o sistema de detecção não precisa fazer conversão de intensidade em deslocamento angular. Isto é, a medida de sensibilidade é a própria variação da intensidade captada pelo sistema de detecção.

Também foi desenvolvida uma aplicação com suporte para acesso através da Internet. O SPRinG oferece funcionalidades de geração de curvas de reflectância, uma variedade de possibilidades de projeto de grades, incluindo uma a três interfaces, amplitudes diferenciadas, escolha do ângulo ótimo de operação desejado, opção para entrada dos índices de refração e permissividade do metal. O acesso ao SPRinG, até a conclusão desta tese, está disponível na referência [41] para testes e sugestões de melhorias.

Em desenvolvimentos futuros pretende-se avaliar melhor a modelagem de grades poligonais para uma melhor previsão do desempenho de CDs comerciais no tocante ao desenvolvimento de sensores baseados em RPS.

Em relação a propostas de desenvolvimento de sensores RPS baseada em incidência normal, será importante explorar melhor o efeito em fibras ópticas. Para isso, será necessário incluir no modelo o perfil do campo guiado para se poder melhor prever o desempenho dos dispositivos.

Para as novas aplicações, será importante implementar algumas das idéias desenvolvidas nesta tese e se determinar o desempenho obtido em face das previsões teóricas aqui previstas. Por exemplo, a verificação do comprimento de onda ótimo de operação no caso do CD e a configuração de incidência normal externa.

No caso do aplicativo SPRinG, além da sua permanente evolução em termos de funcionalidades, pretende-se desenvolver o código uma linguagem portátil para qualquer plataforma computacional utilizando, por exemplo, a programação em C ou em matemática, que disponibiliza bibliotecas para execução de programas em qualquer sistema operacional.

## REFERÊNCIAS

- [1] J. HOMOLA; I. KOUDELA; S. S. YEE. *Surface plasmon resonance sensors based on diffraction gratings and prism couplers: sensitivity comparison*. Sensors and Actuators B: Chemical, Amsterdam, v. 54, n. 1-2, pp. 16–24, Jan. 1999.
- [2] C. KITELL. *Introduction to Solid State Physics*, 8<sup>th</sup>. ed. New Caledonia: CGS Books Services, 2005. 675 p.
- [3] D. SARID; W. CHALLENGER. *Modern Introduction to Surface Plasmons: Theory. Mathematica Modeling and Applications*. New York: Cambridge University Press, 2010. 369 p.
- [4] X. D. HOA; A. G. KIRK; M. TABRIZIAN. *Towards integrated and sensitive surface plasmon resonance biosensors: A review of recent progress*. Biosensors and Bioelectronics, v. 23, n. 2, pp. 151–160, Sept. 2007.
- [5] NAN-FU CHIU et al. *Advanced plasmonic biosensing devices and automation systems for disease diagnostic and drug screening applications*. In: Intelligent Systems Design and Applications, 2008. ISDA '08. Eighth International Conference, 2008, v. 2, pp. 171–176.
- [6] J. DOSTALÉK. *Rich information optical biosensor based on surface plasmon resonance*. Institute of Radio Engineering and Electronics, Academy of Sciences of the Czech Republic, Department of Optical Sensors, Czech Republic, May 2006.
- [7] C. NYLANDER; B. LIEBERG; T. LIND. *Gas detection by means of surface plasmon resonance*. Sensors and Actuators, Amsterdam, v. 3, n. 1, pp. 79–88, 1983.
- [8] N. ROTENBERG et al. *Ultrafast switching of light into surface plasmons: an active grating coupler*. In: Lasers and Electro-Optics and Conference on Quantum electronics and Laser Science, Munich, 2009, v. 2, pp. 1–2.
- [9] J. M. LIU. *Photonic Devices*. New York: Cambridge University Press, 2005.
- [10] R. C. JORGENSEN; S. S. YEE. *A fiber-optic chemical sensor based on surface-plasmon resonance*. Sensors and Actuators B: Chemical, v. 3, n. 1, pp. 79–88, 1993.
- [11] E. FONTANA. *A novel gold-coated multimode fiber sensor*. IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques, London, v. 50, n. 1, pp. 82–87, 2002.
- [12] L. DE MARIA; M. MARTINELLI; G. VEGETTI. *Fiber-optic sensor based on surface plasmon interrogation*. Sensors and Actuators B: Chemical, Amsterdam, v. 12, n. 3, pp. 221–223, 1993.
- [13] E. FONTANA et al. *Surface plasmon resonance on a single mode optical fiber*. IEEE Transactions on Instrumentation and Measurement, London, v. 47, n. 1, pp. 168–173, 1998.

- [14] E. FONTANA. *A theoretical analysis of the coupling of light to surface-plasmon oscillations at the edge of a slab waveguide*. IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques, London, v. 46, n. 3, pp. 234–241, 1998.
- [15] B. ŠPACKOVÁ; J. HOMOLA. *Theoretical analysis of a fiber optic surface plasmon resonance sensor utilizing a Bragg grating*. Optics Express, v. 17, n. 25, pp. 23 254–23 264, 2009.
- [16] D. SARID; W. CHALLENGER. *Modern Introduction to Surface Plasmons: Theory. Mathematica Modeling and Applications*. New York: Cambridge University Press, 2010. 369 p.
- [17] A. OTTO. *Excitation of nonradiative surface plasma waves in silver by the method of frustrated total reflection*. Zeitschrift für Physik, v. 216, pp. 398–410, 1968.
- [18] E. KRETSCHMANN; H. RAETHER. *Radiative decay of nonradiative surface plasmons excited by light*. Z. Naturforsch, Tübingen, v. 23, pp. 2135–2136, 1971.
- [19] D. SARID; W. CHALLENGER. *Modern Introduction to Surface Plasmons: Theory. Mathematica Modeling and Applications*. New York: Cambridge University Press, 2010. 369 p.
- [20] E. FONTANA. *Thickness optimization of metal films for the development of surface-plasmon based sensors for nonabsorbing media*. Applied Optics, EUA, v. 45, n. 29, pp. 7632–7642, 2006.
- [21] E. FONTANA. *Theoretical and experimental study of the surface plasmons resonance effect on a recordable compact disk*. Applied Optics, EUA, v. 43, n. 1, pp. 79–87, 2004.
- [22] A. F. FREDERIC; P. AND MILLER; M. J. VANDOME. *Fresnel Equations*. 1<sup>a</sup> ed. Saarbrücken, Germany: VDM Publishing, 2010.
- [23] W. P. CHEN; J. M. CHEN. *Use of surface plasma waves for determination of the thickness and optical constants of thin metallic films*. Optical Society of America, EUA, v. 71, n. 2, pp. 189–191, 1981.
- [24] B. ASHALL. *Plasmonics and ultrafast nanooptics*. Disponível em: <<http://www.ucd.ie/biophysics/surfaceplasmons.html>>. Acesso em: Jun. 2013.
- [25] M. A. COOPER. *Optical biosensors in drug discovery*. Nature Reviews Drug Discovery, EUA, n. 1, pp.515–528, July 2002.
- [26] N. D. HIKMAT; W. D. BILLY. *Theory and applications of surface plasmon resonance, resonant mirror, resonant waveguide grating, and dual polarization interferometry biosensors*. Sensors 2010, EUA, v. 10, pp. 9630–9646, 2010.
- [27] M. HUBER et al. *Simulation of diffraction in periodic media with a coupled finite element and plane wave approach*. SIAM Journal on Scientific Computing, EUA, v. 31, n. 2, pp. 909–913, Nov. 2008.

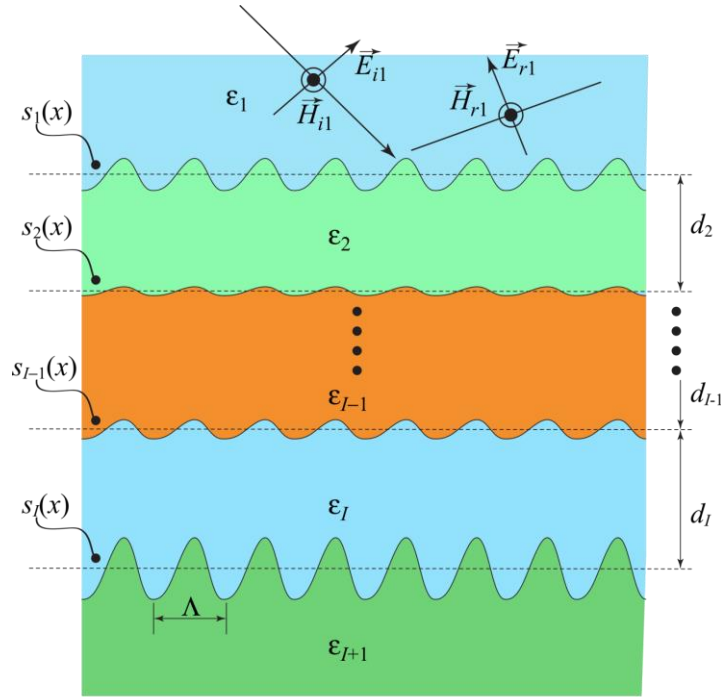
- [28] M. MOHARAM; T. GAYLORD. *Rigorous coupled-wave analysis of grating diffraction – E mode polarization and losses*. Optical Society of America, EUA, v. 73, pp. 451–455, 1983.
- [29] A. POMP. *The integral method for coated gratings: computation cost*. Modern Optics, London, v. 38, n. 1, pp. 109–120, 1991.
- [30] VAN DEN BERG. P. M.; J. T. FOKKEMA. *The Rayleigh hypothesis in the theory of reflection by a grating*. Optical Society of America, USA, v. 69, n. 1, Jan. 1979.
- [31] D. XUAN et al. *High surface plasmon resonance sensitivity enabled by optical disks*. Optics Letters, California, v. 37, no.17, Sept. 2009.
- [32] J. A. SILVER. *Frequency modulation spectroscopy for trace species detection*. Applied Optics, USA, v. 31, n. 6, pp. 707–717, Jan. 1992.
- [33] D. R. LIDE. Handbook of Chemistry and Physics, 85<sup>th</sup>. ed. Ohio: CRC Press, 2005. 2664 p.
- [34] P. SCHIEBENER et al. *Refractive index of water and steam as function of wavelength, temperature and density*. Physical and Chemical Reference Data, EUA, v. 19, pp. 677–717, Jan. 1990.
- [35] S. DICKOPF; K. SCHMIDT; D. VERTTER. *SPR sensor and SPR sensor array*. FPO IP Research & communities, United States Patent Application n. 6795192 B2, Sept. 2004. Disponível em: <[http://www.freepatentsonline.com/result.html?sort=relevance&srch=top&query\\_txt=6795192+B2&submit=&patents=on](http://www.freepatentsonline.com/result.html?sort=relevance&srch=top&query_txt=6795192+B2&submit=&patents=on)>. Acesso em: 14 abr. 2013.
- [36] C. J. *Progress in the implementation of label-free detection: Part 2: Binding analysis assays*. In: Drug Discovery World Fall 2008, 2008.
- [37] C. HU; F. LIN. *High-performance coupled grating surface plasmon resonance sensor based on Al-Au bimetallic layer*. Modern Applied Science, Canada, v. 4, n. 6, 2010.
- [38] N. GLASS; M. WEBER; D. MILLS. *Attenuation and dispersion of surface plasmon polaritons on gratings*. Physics Review B., Washington, v. 29, pp. 6548–6559, 1984.
- [39] M. WEBER. *Highly accurate renormalized mode-coupling theory for reflectivity of diffraction grating*. Physics Review B., Washington, v. 33, pp. 909–913, 1986.
- [40] R. PETIT. *Electromagnetic theory of gratings*. Berlin: Springer-Verlag, 1980.
- [41] E. MELO; E. FONTANA. *Surface Plasmons Resonance in Gratings*. Disponível em: <<http://www.ufpe.br/fontana/spring/>>. Acesso em: 14 ago. 2013.
- [42] MASSACHUSETTS INSTITUTE OF TECHNOLOGY (MIT. EDU). *Free Snell: Refractive Index spectra*. Disponível em: <<http://people.csail.mit.edu/jaffer/FreeSnel/nk.html>>. Acesso em: 14 ago. 2013.

## APÊNDICES

### A - CÁLCULO DO MODELO PARA MÚTIPLAS INTERFACES

#### PERIÓDICAS

Neste Apêndice desenvolve-se o modelo para o cálculo dos coeficientes de transmissão e reflexão para uma estrutura com múltiplas interfaces, mostrada na Figura A1.

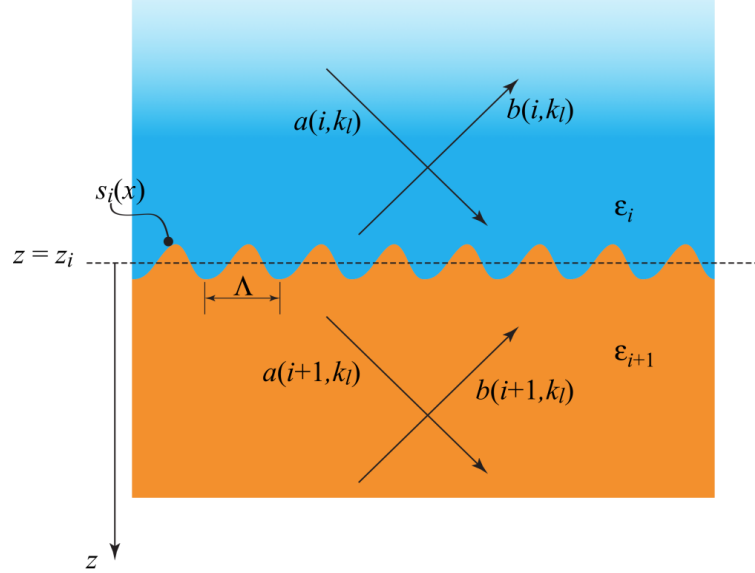


**Figura A1 - Grade com estrutura de multicamadas.**

Inicialmente é necessário determinar a relação entre amplitudes incidentes e refletidas em meios adjacentes que têm a  $i$ -ésima interface em comum. Essa situação está ilustrada na Figura A2. Novamente, a análise é restrita ao caso de modos TM. Os campos no  $i$ -ésimo meio, com  $i = 1, 2, 3, I-1$ , podem ser escritos na forma

$$\vec{E}_a(i) = \frac{Z}{\epsilon_i K_v} \sum_l a(i,l) (p_{il}, 0, -k_l) e^{-jk_l x} e^{-jp_{il}(z-z_{i-1})}, \quad (\text{A.1})$$

$$\vec{H}_a(i) = (0, 1, 0) \sum_l a(i,l) e^{-jk_l x} e^{-jp_{il}(z-z_{i-1})}. \quad (\text{A.2})$$



**Figura A2 - Descrição dos campos em meios adjacentes que têm a  $i$ -ésima interface.**

Note que o primeiro plano médio está localizado em  $z = 0$ , e nas definições (A.1) e (A.2),  $z_0$  é um plano virtual também localizado em  $z = 0$ , para manter a consistência com a formulação, no caso particular, de uma única interface. Portanto,  $z_0 = 0$ . Isso é também equivalente a definir uma espessura virtual  $d_1 = 0$ , como se tornará evidente ainda neste apêndice.. Com estas considerações, define-se o conjunto de coordenadas para os planos que configuram as interfaces

$$\tilde{Z} = (0 \quad z_2 \quad z_3 \quad \dots \quad \dots \quad z_{I-1} \quad z_I)^T,$$

e espessuras

$$\tilde{D} = (0 \quad d_2 \quad d_3 \quad \dots \quad \dots \quad d_{I-1} \quad d_I)^T.$$

O vetor de onda é dado por

$$\vec{K}_{il} = (k_l, 0, p_{il}), \quad (\text{A.3})$$

com

$$k_l^2 + p_{il}^2 = \varepsilon_i K_v^2. \quad (\text{A.4})$$

Os campos refletidos podem ser escritos como

$$\vec{E}_b(i) = \frac{Z}{\varepsilon_i K_v} \sum_l b(i, l) (-p_{il}, 0, -k_l) e^{-jk_l x} e^{jp_{il}(z-z_{i-1})}, \quad (\text{A.5})$$

e

$$\vec{H}_b(i) = \sum_l b(i, l) (0, 1, 0) e^{-jk_l x} e^{jp_{il}(z-z_{i-1})}. \quad (\text{A.6})$$

Os campos no  $(i+1)$ -ésimo meio são obtidos fazendo a troca  $i \rightarrow i+1$ . As condições de contorno dadas por (3.17) e (3.18) para o campo total em cada lado da interface podem ser escritas como

$$\vec{N}_i \times \Delta \vec{E} = \vec{0}, \quad (\text{A.7})$$

e

$$\vec{N}_i \times \Delta \vec{H} = \vec{0}, \quad (\text{A.8})$$

com

$$\vec{N}_i = (ds_i / dx, 0, -1). \quad (\text{A.9})$$

Aplicando as condições de contorno para os campos  $H$  na  $i$ -ésima interface

$$z = z_i + s_i(x),$$

produz

$$\begin{aligned}
& \sum_l e^{-jk_l x} \left[ a(i, l) e^{-jp_{il} s_i(x)} e^{-jp_{il} d_i} + b(i, l) e^{jp_{il} d_i} e^{jp_{il} s_i(x)} \right] \\
& = \sum_l e^{-jk_l x} \left[ a(i+1, l) e^{-jp_{(i+1)l} s_i(x)} + b(i+1, l) e^{jp_{(i+1)l} s_i(x)} \right]
\end{aligned} \tag{A.10}$$

Para a  $i$ -ésima superfície

$$\exp[-jas_i(x)] = \sum_n C_n(a, \tilde{g}_i) e^{-jnk_s x}, \tag{A.11}$$

com  $\tilde{g}_i$  representando uma matriz coluna cujos elementos são parâmetros geométricos que definem a  $i$ -ésima grade e com

$$C_n(a, \tilde{g}_i) = \frac{1}{\Lambda} \int_{-\Lambda/2}^{\Lambda/2} e^{j[nk_s - as_i(x)]} dx. \tag{A.12}$$

Por exemplo, para uma grade senoidal ou quadrada com amplitude  $h_i$ ,  $\tilde{g}_i$  tem um único elemento  $g_i = h_i$ . O período sendo constante para todas as grades já é parte da definição de  $\tilde{g}_i$  e não precisa ser incluído como um de seus argumentos. Para outras geometrias, outros parâmetros são necessários para definir a matriz coluna  $\tilde{g}_i$ .

Aplicando (A.11) em (A.12), obtém-se

$$\begin{aligned}
& \sum_{l,n} e^{-j(l+n)k_s x} \left[ a(i, l) C_n(p_{il}, \tilde{g}_i) e^{-jp_{il} d_i} + b(i, l) C_n(-p_{il}, \tilde{g}_i) e^{jp_{il} d_i} \right] \\
& = \sum_{l,n} e^{-j(l+n)k_s x} \left[ a(i+1, l) C_n(p_{(i+1)l}, \tilde{g}_i) + b(i+1, l) C_n(-p_{(i+1)l}, \tilde{g}_i) \right].
\end{aligned}$$

Fazendo  $l+n=m$  e igualando os coeficientes de cada harmônico espacial, fornece



$$\begin{aligned}
& e^{-jmk_g x} \sum_l \left[ a(i, l) C_{m-l}(p_{il}, \tilde{g}_i) e^{-jp_{il} d_i} + b(i, l) C_{m-l}(-p_{il}, \tilde{g}_i) e^{jp_{il} d_i} \right] \\
& = e^{-jmk_g x} \sum_l \left[ a(i+1, l) C_{m-l}(p_{(i+1)l}, \tilde{g}_i) + b(i+1, l) C_{m-l}(-p_{(i+1)l}, \tilde{g}_i) \right] .
\end{aligned} \tag{A.13}$$

A forma matricial do conjunto truncado de equações com  $l_{max} = L$ , pode ser colocada na forma

$$\tilde{C}_{i+}(i) e^{-j\tilde{\Phi}(i)} \tilde{A}(i) + \tilde{C}_{i-}(i) e^{j\tilde{\Phi}(i)} \tilde{B}(i) = \tilde{C}_{i+}(i+1) \tilde{A}(i+1) + \tilde{C}_{i-}(i+1) \tilde{B}(i+1), \tag{A.14}$$

com

$$\tilde{C}_{i\pm}(j) = \begin{pmatrix} \tilde{C}_{i\pm}(j)^{\langle -L \rangle} & \tilde{C}_{i\pm}(j)^{\langle -L+1 \rangle} & \dots & \tilde{C}_{i\pm}(0)^{\langle 0 \rangle} & \tilde{C}_{i\pm}(j)^{\langle 1 \rangle} & \dots & \tilde{C}_{i\pm}(j)^{\langle L \rangle} \end{pmatrix}, \tag{A.15}$$

tendo a  $l$ -ésima coluna dada por

$$\tilde{C}_{i\pm}(j)^{\langle l \rangle} = \begin{pmatrix} C_{-L-l}(\pm p_{jl}, \tilde{g}_i) & C_{-L-l+1}(\pm p_{jl}, \tilde{g}_i) & \dots & C_{-l}(\pm p_{jl}, \tilde{g}_i) & C_{-l+1}(\pm p_{jl}, \tilde{g}_i) & \dots & C_{L-l}(\pm p_{jl}, \tilde{g}_i) \end{pmatrix}^T, \tag{A.16}$$

em que  $j = i, i+1$ . As matrizes colunas em (A.14) são definidas por

$$\tilde{A}(i) = \begin{pmatrix} a(i, -L) & a(i, -L+1) & \dots & a(i, 0) & \dots & a(i, L-1) & a(L) \end{pmatrix}^T, \tag{A.17}$$

$$\tilde{B}(i) = \begin{pmatrix} b(i, -L) & b(i, -L+1) & \dots & b(i, 0) & \dots & b(i, L-1) & b(L) \end{pmatrix}^T, \tag{A.18}$$

$$\tilde{P}(i) = \begin{pmatrix} p_{i(-L)} & p_{i(-L+1)} & \dots & p_{i0} & \dots & p_{i(L-1)} & p_{iL} \end{pmatrix}^T, \tag{A.19}$$

e o termo exponencial é a matriz diagonal tendo elementos

$$\left[ e^{\pm j\tilde{\Phi}(i)} \right]_{ll'} = e^{\pm jp_{il} d_i} \delta_{ll'}, \tag{A.20}$$

para  $|l| \leq L$ . É importante notar que esta matriz satisfaz à propriedade

$$e^{j\tilde{\Phi}(i)} e^{-j\tilde{\Phi}(i)} = \tilde{\mathfrak{I}}. \quad (\text{A.21})$$

Para determinar as equações para os campos elétricos, usa-se (A.11), o que fornece

$$\begin{aligned} \frac{1}{\varepsilon_i} \sum_l e^{-jk_l x} \left[ \begin{aligned} &a(i, l) (k_l ds_i / dx - p_{il}) e^{-jp_{il} s_i(x)} e^{jp_{il} d_i} \\ &+ b(i, l) (k_l ds_i / dx + p_{il}) e^{jp_{il} s_i(x)} e^{-jp_{il} d_i} \end{aligned} \right] = \\ \frac{1}{\varepsilon_{i+1}} \sum_l e^{-jk_l x} \left[ \begin{aligned} &a(i+1, l) (k_l ds_i / dx - p_{(i+1)l}) e^{-jp_{(i+1)l} s_i(x)} \\ &+ b(i+1, l) (k_l ds_i / dx + p_{(i+1)l}) e^{jp_{(i+1)l} s_i(x)} \end{aligned} \right]. \end{aligned}$$

Repetindo o procedimento da expansão exponencial e usando a propriedade da derivada (3.33), obtém-se

$$\begin{aligned} \frac{1}{\varepsilon_i} \sum_{l,n} e^{-j(l+n)x} \left[ \begin{aligned} &\left( \frac{nk_l k_g - p_{il}^2}{p_{il}} \right) C_n(p_{il}, \tilde{g}_i) e^{-jp_{il} d_i} a(i, l) \\ &- \left( \frac{nk_l k_g - p_{il}^2}{p_{il}} \right) C_n(-p_{il}, \tilde{g}_i) e^{jp_{il} d_i} b(i, l) \end{aligned} \right] = \\ \frac{1}{\varepsilon_{i+1}} \sum_{l,n} e^{-j(l+n)x} \left[ \begin{aligned} &\left( \frac{nk_l k_g - p_{(i+1)l}^2}{p_{(i+1)l}} \right) C_n(p_{(i+1)l}, \tilde{g}_i) a(i+1, l) \\ &- \left( \frac{nk_l k_g - p_{(i+1)l}^2}{p_{(i+1)l}} \right) C_n(-p_{(i+1)l}, \tilde{g}_i) b(i+1, l) \end{aligned} \right]. \end{aligned}$$

Fazendo  $l+n=m$  e igualando os coeficientes de cada harmônico espacial, resulta em

$$\begin{aligned}
& \sum_l \left[ \begin{aligned} & \left( \frac{(m-l)k_l k_g - p_{il}^2}{\varepsilon_i p_{il}} \right) C_{m-l}(p_{il}, \tilde{g}_i) e^{-j p_{il} d_i} a(i, l) \\ & - \left( \frac{(m-l)k_l k_g - p_{il}^2}{\varepsilon_i p_{il}} \right) C_{m-l}(-p_{il}, \tilde{g}_i) e^{j p_{il} d_i} b(i, l) \end{aligned} \right] \\
& = \sum_l \left[ \begin{aligned} & \left( \frac{(m-l)k_l k_g - p_{(i+1)l}^2}{\varepsilon_{i+1} p_{(i+1)l}} \right) C_{m-l}(p_{(i+1)l}, \tilde{g}_i) a(i+1, l) \\ & - \left( \frac{(m-l)k_l k_g - p_{(i+1)l}^2}{\varepsilon_{i+1} p_{(i+1)l}} \right) C_{m-l}(-p_{il}, \tilde{g}_i) b(i+1, l) \end{aligned} \right].
\end{aligned} \tag{A.22}$$

Usando a forma geral do fator forma para o  $i$ -ésimo meio

$$F_{ml}(i) = \frac{(m-l)k_l k_g - p_{il}^2}{\varepsilon_i p_{il}}, \tag{A.23}$$

a expressão (A.22) pode ser colocada na forma

$$\begin{aligned}
& \sum_l \left[ F_{ml}(i) C_{m-l}(p_{il}, \tilde{g}_i) e^{-j p_{il} d_i} a(i, l) - F_{ml}(i) C_{m-l}(-p_{il}, \tilde{g}_i) e^{j p_{il} d_i} b(i, l) \right] = \\
& \sum_l \left[ F_{ml}(i+1) C_{m-l}(p_{(i+1)l}, \tilde{g}_i) a(i+1, l) - F_{ml}(i+1) C_{m-l}(-p_{il}, \tilde{g}_i) b(i+1, l) \right]
\end{aligned} \tag{A.24}$$

Essa última expressão pode ser escrita em forma matricial com emprego da seguinte definição:

$$\tilde{D}_{i\pm}(j) = \tilde{F}(j) \circ \tilde{C}_{i\pm}(j), \tag{A.25}$$

Com

$$\tilde{F}(i) = \left( \tilde{F}(i)^{\langle -L \rangle} \quad \tilde{F}(i)^{\langle -L+1 \rangle} \quad \dots \quad \tilde{F}(i)^{\langle 0 \rangle} \quad \tilde{F}(i)^{\langle 1 \rangle} \quad \dots \quad \tilde{F}(i)^{\langle L \rangle} \right), \tag{A.26}$$

tendo a  $l$ -ésima coluna dada por

$$\tilde{F}(i)^{\langle l \rangle} = \left( F_{-Ll}(i) \quad F_{(-L+1)l}(i) \quad \dots \quad F_{0l}(i) \quad F_{1l}(i) \quad \dots \quad \tilde{F}_{Ll}(i) \right)^T, \tag{A.27}$$

e com  $\tilde{C}_{i\pm}(j)$  dada por (A.15). Usando (A.17), (A.18) e (A.25), (A.24) pode ser colocada na forma

$$\tilde{D}_{i+}(i)e^{-j\tilde{\Phi}(i)}\tilde{A}(i) - \tilde{D}_{i-}(i)e^{j\tilde{\Phi}(i)}\tilde{B}(i) = \tilde{D}_{i+}(i+1)\tilde{A}(i+1) - \tilde{D}_{i-}(i+1)\tilde{B}(i+1). \quad (\text{A.28})$$

Em resumo, a equação matricial da  $i$ -ésima interface pode ser escrita como

$$\tilde{C}_{i+}(i)e^{-j\tilde{\Phi}(i)}\tilde{A}(i) + \tilde{C}_{i-}(i)e^{j\tilde{\Phi}(i)}\tilde{B}(i) = \tilde{C}_{i+}(i+1)\tilde{A}(i+1) + \tilde{C}_{i-}(i+1)\tilde{B}(i+1), \quad (\text{A.29})$$

$$\tilde{D}_{i+}(i)e^{-j\tilde{\Phi}(i)}\tilde{A}(i) - \tilde{D}_{i-}(i)e^{j\tilde{\Phi}(i)}\tilde{B}(i) = \tilde{D}_{i+}(i+1)\tilde{A}(i+1) - \tilde{D}_{i-}(i+1)\tilde{B}(i+1). \quad (\text{A.30})$$

Essas expressões representam um sistema de equações para as amplitudes de campo em ambos os lados da interface. Define-se

$$\tilde{M}'_i(j) = \begin{pmatrix} \tilde{C}_{i+}(j) & \tilde{C}_{i-}(j) \\ \tilde{D}_{i+}(j) & -\tilde{D}_{i-}(j) \end{pmatrix}, \quad (\text{A.31})$$

$$\tilde{E}(i) = \begin{pmatrix} e^{-j\tilde{\Phi}(i)} & \tilde{0} \\ \tilde{0} & e^{j\tilde{\Phi}(i)} \end{pmatrix}, \quad (\text{A.32})$$

que satisfaz à relação

$$\tilde{E}^{-1}(i) = \tilde{E}'(i) = \begin{pmatrix} e^{j\tilde{\Phi}(i)} & \tilde{0} \\ \tilde{0} & e^{-j\tilde{\Phi}(i)} \end{pmatrix}. \quad (\text{A.33})$$

Definindo ainda a matriz de amplitudes

$$\tilde{S}(i) = \begin{pmatrix} \tilde{A}(i) \\ \tilde{B}(i) \end{pmatrix}, \quad (\text{A.34})$$

então (A.29) e (A.30) podem ser escritas na forma

$$\tilde{M}'_i(i) \tilde{E}(i) \tilde{S}(i) = \tilde{M}'_i(i+1) \tilde{S}(i+1),$$

ou equivalentemente

$$\tilde{S}(i+1) = [\tilde{M}'_i(i+1)]^{-1} \tilde{M}'_i(i) \tilde{E}(i) \tilde{S}(i), \quad (\text{A.35})$$

Definindo ainda

$$\tilde{M}(i) = [\tilde{M}'_i(i+1)]^{-1} \tilde{M}'_i(i) \tilde{E}(i), \quad (\text{A.36})$$

(A.35) pode ser escrita como

$$\tilde{S}(i+1) = \tilde{M}(i) \tilde{S}(i). \quad (\text{A.37})$$

A Equação (A.37) pode ser aplicada iterativamente para determinar a relação entre as amplitudes dos campos de entrada (meio 1) e de saída (meio  $I+1$ ). Essa relação pode ser colocada na forma

$$\tilde{S}(I+1) = \tilde{M} \tilde{S}(1), \quad (\text{A.38})$$

com

$$\tilde{M} = \prod_{i=1}^I \tilde{M}(I+1-i), \quad (\text{A.39})$$

com o produtório de matrizes em (A.36) sendo realizado na ordem decrescente dos argumentos dessas matrizes, da esquerda para a direita.

Em (A.38) a matriz de amplitudes no  $(I+1)$ -ésimo meio é simplesmente

$$\tilde{S}(I+1) = \begin{pmatrix} \tilde{A}(I+1) \\ \tilde{0} \end{pmatrix}, \quad (\text{A.39})$$

e, no meio 1,

$$\tilde{S}(1) = \left( (0 \quad \dots \quad 0 \quad 1 \quad 0 \quad \dots \quad 0)^T \tilde{B}(1) \right)^T. \quad (\text{A.40})$$

Se a matriz  $\tilde{M}$  for escrita na forma

$$\tilde{M} = \begin{pmatrix} \tilde{M}_{11} & \tilde{M}_{12} \\ \tilde{M}_{21} & \tilde{M}_{22} \end{pmatrix}, \quad (\text{A.41})$$

aplicando (3.96), (3.97) e (3.98) em (3.94), resulta em

$$\tilde{A}(I+1) = \tilde{M}_{11} (0 \quad \dots \quad 0 \quad 1 \quad 0 \quad \dots \quad 0)^T + \tilde{M}_{12} \tilde{B}(1), \quad (\text{A.42})$$

$$\tilde{M}_{21} (0 \quad \dots \quad 0 \quad 1 \quad 0 \quad \dots \quad 0)^T + \tilde{M}_{22} \tilde{B}(1) = \tilde{0}. \quad (\text{A.43})$$

Note que

$$\tilde{M}_{11} (0 \quad \dots \quad 0 \quad 1 \quad 0 \quad \dots \quad 0)^T = \tilde{M}_{11}^{\langle 0 \rangle}, \quad (\text{A.44})$$

$$\tilde{M}_{21} (0 \quad \dots \quad 0 \quad 1 \quad 0 \quad \dots \quad 0)^T = \tilde{M}_{21}^{\langle 0 \rangle}, \quad (\text{A.45})$$

e, portanto, de (A.43) obtém-se

$$\tilde{B}(1) = -\tilde{M}_{22}^{-1} \tilde{M}_{21}^{\langle 0 \rangle}, \quad (\text{A.46})$$

e de (A.42) chega-se a

$$\tilde{A}(I+1) = \tilde{M}_{11}^{\langle 0 \rangle} - \tilde{M}_{12} \tilde{M}_{22}^{-1} \tilde{M}_{21}^{\langle 0 \rangle}. \quad (\text{A.47})$$

Para demonstrar que essa formulação está de acordo com aquela obtida para interface simples, nesse caso, tem-se

$$\tilde{M}'_1(1)\tilde{S}(1) = \tilde{M}'_1(2)\tilde{S}(2).$$

De (A.38)

$$\tilde{S}(2) = \begin{pmatrix} \tilde{A}(2) \\ \tilde{0} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tilde{T} \\ \tilde{0} \end{pmatrix}, \quad (\text{A.48})$$

$$\tilde{S}(1) = \left( (0 \quad \dots \quad 0 \quad 1 \quad 0 \quad \dots \quad 0)^T \tilde{R} \right)^T, \quad (\text{A.49})$$

$$\tilde{M}'_1(1) = \begin{pmatrix} \tilde{C}_+(1) & \tilde{C}_-(1) \\ \tilde{D}_+(1) & -\tilde{D}_i(1) \end{pmatrix} \quad (\text{A.50})$$

$$\tilde{M}'_1(2) = \begin{pmatrix} \tilde{C}_+(2) & \tilde{C}_-(2) \\ \tilde{D}_+(2) & -\tilde{D}_i(2) \end{pmatrix}, \quad (\text{A.51})$$

$$\tilde{C}_+^{(0)}(1) + \tilde{C}_-(1)\tilde{R} = \tilde{C}_+(2)\tilde{T}, \quad (\text{A.52})$$

$$\tilde{D}_+^{(0)}(1) - \tilde{D}_-(1)\tilde{R} = \tilde{D}_+(2)\tilde{T}. \quad (\text{A.53})$$

As equações (A.52)-(A.53) formam o sistema de equações matriciais para o cálculo dos coeficientes de transmissão e reflexão para interface simples, dados por (3.49) e (3.50), como era de se esperar.

## B - PUBLICAÇÕES

Melo, E. F.; Fontana, E. *Design of Surface Plasmon Resonance Sensors Having Maximum Response at Normal Incidence*. In: *Frontiers in Optics 2012*, 2012, Rochester. *Frontiers in Optics 2012*. Washington: Optical Society of America, 2012. v. 1. pp. 1-2.

Melo, E. F.; Fontana, E. *Optimized Front Surface SPR Sensors for Operation at Normal Incidence*. In: *MOMAG 2012*, 2012, João Pessoa. *Anais do MOMAG 2012*. João Pessoa: SBMO, 2012. v. 1. pp. 1-4.

Melo, E. F.; Fontana, E. *Optimization of Metal Gratings for SPR Sensing Applications*. In: *2011 SBMO/IEEE MTT-S International Microwave and Optoelectronics Conference*, 2011, Natal. *Proceedings 2011 SBMO/IEEE MTT-S International Microwave and Optoelectronics Conference*. Piscataway: IEEE Press, 2011. v. 1. pp. 819-823.