

UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARÁ  
CAMPUS UNIVERSITÁRIO DE TUCURUÍ  
FACULDADE DE ENGENHARIA ELÉTRICA

MODELAGEM NUMÉRICA DE SENSORES PLASMÔNICOS  
SPCE DE 3 E 4 CAMADAS USANDO O COMSOL EM  
AMBIENTE 2D

MAIKON SANCHES DA COSTA

Campus Universitário de Tucuruí  
Tucuruí-Pará-Brasil

2021

UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARÁ  
CAMPUS UNIVERSITÁRIO DE TUCURUÍ  
FACULDADE DE ENGENHARIA ELÉTRICA

MAIKON SANCHES DA COSTA

MODELAGEM NUMÉRICA DE SENSORES PLASMÔNICOS  
SPCE DE 3 E 4 CAMADAS USANDO O COMSOL EM  
AMBIENTE 2D

Campus Universitário de Tucuruí  
Tucuruí-Pará-Brasil

2021

UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARÁ  
CAMPUS UNIVERSITÁRIO DE TUCURUÍ  
FACULDADE DE ENGENHARIA ELÉTRICA

MAIKON SANCHES DA COSTA

MODELAGEM NUMÉRICA DE SENSORES PLASMÔNICOS  
SPCE DE 3 E 4 CAMADAS USANDO O COMSOL EM  
AMBIENTE 2D

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado à Faculdade de Engenharia Elétrica, do Campus Universitário de Tucuruí, da Universidade Federal do Pará, como requisito parcial para obtenção do título de Bacharel em Engenharia Elétrica.

Campus Universitário de Tucuruí  
Tucuruí-Pará-Brasil

2021

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

---

C837m Costa, Maikon Sanches da.  
Modelagem numérica de sensores plasmônicos SPCE de 3 e 4  
camadas usando o COMSOL em ambiente 2D / Maikon Sanches da  
Costa. — 2021.  
72 f. : il. color.

Orientador(a): Prof. Dr. Karlo Queiroz da Costa  
Coorientador(a): Prof. Me. André Felipe Souza da Cruz  
Trabalho de Conclusão de Curso (Graduação) - Universidade  
Federal do Pará, Campus Universitário de Tucuruí, Faculdade de  
Engenharia Elétrica, Tucuruí, 2021.

1. Plasmônica. 2. Sensores plasmônicos. 3. Campo  
distante. 4. Nanoestruturas. 5. Método Numérico. I. Título.

CDD 621.3

---



Maikon Sanches da Costa

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado  
à Faculdade de Engenharia Elétrica, do Cam-  
pus Universitário de Tucuruí, da Universidade  
Federal do Pará, como requisito parcial para  
obtenção do título de Bacharel em Engenha-  
ria Elétrica.

Trabalho aprovado. Campus Universitário de Tucuruí  
Tucuruí-Pará-Brasil, 27 de agosto de 2021

---

**Prof. Dr Karlo Queiroz da Costa**  
Orientador – FEE/CTUC/UFPA

---

**Prof. Me. André Felipe Souza da Cruz**  
Co-Orientador e Membro da Bancada  
Examinadora – FEE/CTUC/UFPA

---

**Me. Andrey Viana Pires**  
Convidado - Membro da Bancada  
Examinadora

Campus Universitário de Tucuruí  
Tucuruí-Pará-Brasil

2021

*Dedico esse trabalho a minha querida mãe, Marilene do Carmo da Cruz Sanches e aos meus irmãos Eider Sanches da costa, Elkher Sanches da costa e a minha caçula Biatrice de Nazaré Sanches da Costa.*

# Agradecimentos

Quero agradecer primeiramente a minha mãe, Marilene do Carmo da Cruz Sanches, por toda educação e ensinamentos nessa vida e que me fizeram ser o que sou. Quero agradecer muito ela por acreditar em mim, e sempre está ao meu lado e nunca medir esforços para me ajudar a conquista meu sonho. Agradeço ainda em memória de minha avó, Domingas, que faleceu durante minha graduação e não pode ver essa minha conquista, mas sei que ela sempre olhou por mim onde quer que esteja.

Agradeço a toda a minha família, meus irmãos Eider Sanches da Costa, Elkher Sanches da Costa e minha irmã caçula Biatrice de Nazaré Sanches da Costa, por me incentivarem a continuar, a lutar dia a pós dia durante essa graduação.

Agradeço a todos os meus tios e tias, primos e primas, por acreditarem em mim e sempre me apoiarem, em especial a minha tia, Edileuza da Silva da Costa, que me acolheu na sua casa e me ajudou muito nessa caminhada. A minha madrinha, Luiza, que ajudou a cuidar de mim quando criança para minha mãe poder trabalha, e sempre ter orgulho de mim.

A todos os meus amigos, que torceram por mim e sempre estiveram do meu lado, torcendo por mim e nas horas de alegrias e tristezas.

A meus colegas e amigos da FEE, que sempre estivemos juntos nesses anos de jornada, na luta e muitos esforços. Torço que todos nós sejamos recompensados algum dia.

A Todos os meus professores, que compartilharam seus conhecimentos e nos incentivaram a buscar ainda mais para que possamos ser ainda melhores, em especial ao Prof. Dr. Karlo Queiros da Costa, por me orientar nos projetos de pesquisa e nesse TCC. E também ao Me. André Felipe Souza da Cruz por me coorientar nesse TCC e me ajudar a conclui-lo.

*Sonho! Alguns sonham em conquistar o mundo. Alguns sonhos são perseguidos por um único homem, que dedica sua vida a eles. Outros são como tempestades, que avassalam centenas ou até milhares de sonhos de outros homens. Não importa sua classe social ou origem, seja realizado ou não, o sonho é a paixão dos homens. Os sonhos nos sustentam! Sofremos pelos sonhos! vivemos pelos sonhos! morremos pelos sonhos! Mesmo se abandonado, ele continua chamuscando em algum lugar de nossos corações. Provavelmente, até a nossa morte! Essa é a vida que qualquer homem deseja. Como um fiel apóstolo de um Deus chamado “Sonho”! Viver por viver, só porque um dia nasceu, eu não suportaria uma vida assim!”*  
*(MIURA, Kentaro. “Berserk: Griffith em um diálogo com a Princesa Charlotte”. Revista: Young Animal, 1992-2021. Cap. 12.)*

# Resumo

Sensores ópticos baseados em ondas SPP são conhecidos como sensores de Surface Plasmon Resonance - SPR. Estes dispositivos fotônicos detectam variações do índice efetivo de refração de uma estrutura multicamada por meio da interação da onda plasmônica excitada na interface metal-dielétrico com as amostras do material a ser analisado na superfície do sensor. Sensores SPR podem ser utilizados para detecção de espécies químicas, biológicas, monitoramento de nanopartículas e etc. Neste trabalho, apresenta-se a análise teórica de um sensor SPR na configuração SPCE com 3 e 4 camadas, onde o processo de re-emissão das nanopartículas (ou analitos) são modelados por dipolos infinitesimais sobre a superfície do sensor, em um comprimento de onda  $\lambda = 633 \text{ nm}$  ou na faixa óptica. É usado o *Software* COMSOL Multiphysics® para analisar numericamente, pelo método dos elementos finitos, a resposta eletromagnética dos modelos equivalentes do sensor SPCE com 3 e 4 camadas em 2D. A análise no COMSOL utiliza o método dos elementos finitos para calcular os campos próximo e distante, onde os resultados são validados através de outros resultados obtidos por outras referências. A validação e análise dos resultados para o sensor de 4 camadas 2D é feita pela comparação com resultados experimentais de um sensor na configuração Kretschmann. Todos os resultados obtidos tiveram boa concordância, provando a eficácia dos modelos criados no *Software* e a reciprocidade eletromagnética das duas configurações de sensores SPR.

**Palavras-chave:** Plasmônica, Sensores Plasmônicos, Campo distante, Nanoestruturas, Método Numérico.

# Abstract

Optical sensors based on SPP waves are known as Surface Plasmon Resonance - SPR sensors. These photonic devices detect variations in the effective refractive index of a multilayer structure through the interaction of the plasmonic wave excited at the metal-dielectric interface with samples of the material to be analyzed on the sensor surface. SPR sensors can be used for detection of chemical and biological species, monitoring of nanoparticles and so on. In this work, the theoretical analysis of an SPR sensor in SPCE configuration with 3 and 4 layers is presented, where the re-emission process of nanoparticles (or analytes) are modeled by infinitesimal dipoles on the sensor surface, in a length of wave  $\lambda = 633\text{ nm}$  or in the optical range. COMSOL Multiphysics® Software is used to numerically analyze, by the finite element method, the electromagnetic response of the SPCE sensor equivalent models with 3 and 4 layers in 2D. The analysis in COMSOL uses the finite element method to calculate the near and far fields, where the results are validated through other results obtained by other references. The validation and analysis of the results for the 2D 4-layer sensor is done by comparing with experimental results for a sensor in the Kretschmann configuration. All results obtained had good agreement, proving the effectiveness of the models created in the Software and the electromagnetic reciprocity of the two configurations of SPR sensors.

**Keywords:** Plasmonics, Plasmonic Sensors, Far Field, Nanostructures, Numerical Method.

# Lista de ilustrações

|                                                                                                               |    |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| Figura 1 – a) Esquema experimental de um sensor SPR em configuração SPCE.                                     |    |
| Em ausência do analito o plasmon irradiado é adquirido por um detector                                        |    |
| a um ângulo $\theta_1$ respeito a normal do prisma de vidro. b) A presença                                    |    |
| do analito em solução provoca uma mudança no ângulo de emissão do                                             |    |
| plasmon $\theta_2$ .                                                                                          | 20 |
| Figura 2 – Representação da geometria de uma interface plana metal( $\epsilon_d$ )/dielétrico( $\epsilon_m$ ) |    |
| para o estudo das SPPs.                                                                                       | 24 |
| Figura 3 – Representação da geometria de uma interface metal( $\epsilon_d$ )/dielétrico( $\epsilon_m$ )       |    |
| para o estudo das SPPs no (a) Modo TM e (b) Modo TE. Adaptado de                                              |    |
| [1]                                                                                                           | 26 |
| Figura 4 – Relação de dispersão de SPPs para a interface metal/dielétrico. O metal                            |    |
| é representado pela função dielétrica de <i>Drude</i> com amortecimento                                       |    |
| desprezível. Para o dielétrico Ar, linhas azul, para o dielétrico Sílica,                                     |    |
| linhas vermelhas. Adaptado de [2]                                                                             | 29 |
| Figura 5 – Relação de dispersão de SPPs para a interface Prata/ar ( linha cinza) e                            |    |
| Prata/sílica (linha preta). As SPPs agora são amortecidas com compri-                                         |    |
| mento de propagação finito. Adaptado de [3].                                                                  | 30 |
| Figura 6 – Geometrias usadas para excitar SPPs por acoplamento de Prisma (a)                                  |    |
| Configuração Kretschmann, adaptado [4]. (b) Configuração Otto. $L$                                            |    |
| representado o feixe de luz usado como fonte de excitação e $D$ o detector                                    |    |
| da luz refletida. Adaptado de [5].                                                                            | 31 |
| Figura 7 – Relação de dispersão para SPPs por acoplamento de prisma configuração                              |    |
| Kretschmann. Adaptada de [4]                                                                                  | 32 |
| Figura 8 – Curvas de refletividade em relação ao ângulo de incidência na con-                                 |    |
| figuração Kretschmann. variando (a) espessura de metal prata, (b) o                                           |    |
| comprimento de onda $\lambda$ e (c) o índice de refração do meio externo. O                                   |    |
| índice de refração do prisma é 1.5. Adaptado de [4]                                                           | 33 |
| Figura 9 – Exemplos de excitação da onda SPP por campo próximo. (a) uma                                       |    |
| pequena ponta de prova, com uma fonte de luz de abertura de sub-                                              |    |
| comprimento de onda [6], (b) Por irradiação de nanopartículas [7].                                            |    |
| Adaptados de [5]                                                                                              | 33 |
| Figura 10 – Linhas de densidades de potência constante em um determinado instante                             |    |
| de tempo, para excitação de SPPs por um dipolo 5nm acima de uma                                               |    |
| camada de prata de 50nm de espessura, conforme a configuração da                                              |    |
| Figura 9(b). Adaptado de [5]                                                                                  | 34 |
| Figura 11 – Sensor SPR na configuração Kretschmann. [8]                                                       | 35 |

|                                                                                                                                                                                                             |    |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| Figura 12 – Deslocamento na curva refletividade causado por uma camada de água de 3 nm adsorvida em um filme de prata de 53 nm de espessura [5]. . .                                                        | 36 |
| Figura 13 – Sensor SPR na configuração SPCE. . . . .                                                                                                                                                        | 37 |
| Figura 14 – Modelo eletromagnético equivalente do sensor SPCE com 3 camadas. A fonte de re-emissão (fonte de corrente) está localizada a uma altura $z'$ da camada de ouro. . . . .                         | 39 |
| Figura 15 – Modelo eletromagnético equivalente do senso SPCE com 4 camadas. A camada de SiO <sub>2</sub> corresponde a substância ligante. . . . .                                                          | 40 |
| Figura 16 – Ilustração da aplicação da discretização de uma geometria 2D, (a) região de solução e (b) sua discretização por elementos finitos. Adaptado de [9].                                             | 42 |
| Figura 17 – Tipos de elementos finitos, (a) 1D, (b) 2D e (c) 3D. Adaptado de [9].                                                                                                                           | 43 |
| Figura 18 – Malha de elementos finitos com (a) elementos triangulares 2D e (b) elementos tetraédricos 3D. Adaptado de [10]. . . . .                                                                         | 43 |
| Figura 19 – Logotipo do <i>Software</i> COMSOL Multiphysics 5.3a. Direitos reservados a [11]. . . . .                                                                                                       | 44 |
| Figura 20 – Interface do <i>Software</i> COMSOL Multiphysics 5.3a. Direitos reservados a [11]. . . . .                                                                                                      | 45 |
| Figura 21 – Criador de modelo do COMSOL Multiphysics. Direitos reservados a [11].                                                                                                                           | 46 |
| Figura 22 – Geometria do modelo do sensor com 3 camadas criado no COMSOL Multiphysics. . . . .                                                                                                              | 48 |
| Figura 23 – Camada PML criada no modelo do sensor, destacada em azul. . . . .                                                                                                                               | 49 |
| Figura 24 – Física RF aplicada na solução do comportamento do sensor. . . . .                                                                                                                               | 50 |
| Figura 25 – Condição de contorno de um condutor elétrico perfeito aplicado no sensor.                                                                                                                       | 50 |
| Figura 26 – Domínios para o cálculo do campo distante do sensor. . . . .                                                                                                                                    | 51 |
| Figura 27 – Filamento de corrente elétrica aplicada em um ponto, simulando a re-emissão dos analitos sobre o sensor SPCE. . . . .                                                                           | 52 |
| Figura 28 – Malha de Discretização do modelo do sensor SPCE feita no COMSOL Multiphysics®. . . . .                                                                                                          | 53 |
| Figura 29 – Janela de estudo usado nas simulações. . . . .                                                                                                                                                  | 54 |
| Figura 30 – Modelo do sensor com 4 camadas feito no COMSOL Multiphysics®. . .                                                                                                                               | 55 |
| Figura 31 – Malha de discretização do Modelo do sensor com 4 camadas feito no COMSOL Multiphysics®. . . . .                                                                                                 | 56 |
| Figura 32 – Componente real $E_z$ do campo elétrico para o sensor com 3 camadas obtido no COMSOL Multiphysics®: (a) Para o modelo 2D criado e (b) para o modelo 3D comparativo. Adaptado de [12]. . . . .   | 58 |
| Figura 33 – Modulo da fase de $H_y$ do campo magnético para o sensor com 3 camadas obtido no COMSOL Multiphysics®, (a) Para o modelo 2D criado, (b) Para o modelo 3D comparativo. Adaptado de [12]. . . . . | 59 |



|                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                |    |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| Figura 34 – Diagrama de <i>Far Field</i> bidimensional do sensor com 3 camadas obtido no COMSOL Multiphysics®. . . . .                                                                                                                                                                                                                                                         | 59 |
| Figura 35 – Diagrama de campo distante bidimensional obtido no COMSOL Multiphysics®, para o sensor com 3 camadas variando a altura $z'$ , (a) para o modelo 2D criado e (b) modelo 3D comparativo. adaptado de [12] . . . . .                                                                                                                                                  | 61 |
| Figura 36 – Componente real $E_z$ do campo elétrico em dB para o sensor com 3 camadas obtido via: (a) DCIM adaptado de [13], (b) para o modelo 3D COMSOL. Adaptado de [13], (c) método numérico de [14] e (d) modelo 2D criado no COMSOL. . . . .                                                                                                                              | 62 |
| Figura 37 – Fase da componente $E_z$ do campo elétrico em radianos para o sensor com 3 camadas obtido via: (a) DCIM adaptado de [13], (b) método numérico feito por [14], (c) obtido no COMSOL em um modelo 3D criado por [12] e (d) modelo 2D criado no COMSOL. . . . .                                                                                                       | 63 |
| Figura 38 – Diagrama de campo distante ( <i>Far Field</i> ) para o sensor com 3 camadas obtido via: (a) modelo 2D criado com ângulo de acoplamento $\theta_{SPP} \approx \pm 43.5^\circ$ e (b) DCIM adaptado de [13] com ângulos de acoplamentos quase idênticos para os dois métodos de solução, $\theta_{SPP} \approx \pm 43.7^\circ$ . . . .                                | 64 |
| Figura 39 – Resultados obtidos para os primeiros parâmetros no modelo 2D com 4 camadas: (a) Componente $E_z$ do campo elétrico e (b) Fase de $E_z$ . . . .                                                                                                                                                                                                                     | 65 |
| Figura 40 – (a) Diagrama de <i>Far Field</i> bidimensional do sensor 2D com 4 camadas obtido no COMSOL Multiphysics®, com ângulo de acoplamento $\theta_{SPP} \approx 58^\circ$ . (b) Perfil experimental de ângulo mínimo SPR em $\lambda_1 = 633\text{ nm}$ , com ângulo de ressonância $\theta \approx 58.5^\circ$ . Adaptado de [15] . . . . .                             | 66 |
| Figura 41 – Resultados obtidos para os segundos parâmetros no modelo 2D com 4 camadas: (a) Componente $E_z$ do campo elétrico e (b) Fase de $E_z$ . . . .                                                                                                                                                                                                                      | 67 |
| Figura 42 – (a) Diagrama de <i>Far Field</i> bidimensional do sensor 2D com 4 camadas para os segundos parâmetros obtido no COMSOL Multiphysics®, com ângulo de acoplamento $\theta_{SPP} \approx 55^\circ$ . (b) Perfil experimental de ângulo mínimo SPR em $\lambda_2 = 783\text{ nm}$ , com ângulo de ressonância $\theta \approx 54.2^\circ$ . Adaptado de [15] . . . . . | 67 |

# Lista de tabelas

|                                                                                  |    |
|----------------------------------------------------------------------------------|----|
| Tabela 1 – Parâmetros utilizados na modelagem do sensor com 3 e 4 camadas no     |    |
| COMSOL Multiphysics. . . . .                                                     | 47 |
| Tabela 2 – Propriedade dos materiais usados na modelagem do sensor de 4 Camadas. | 54 |

# Lista de abreviaturas e siglas

|           |                                                                                       |
|-----------|---------------------------------------------------------------------------------------|
| SPP       | Plasmon Polaritons de Superfície( <i>Surface Plasmon Polariton</i> );                 |
| TM        | Transversal Magnético;                                                                |
| EM        | Eletromagnético;                                                                      |
| SPR       | Ressonância Plasmônica de Superfície( <i>Surface Plasmon Resonance</i> );             |
| SPCE      | Emissão Acoplada de Plasma de Superfície ( <i>Surface Plasmon Coupled Emission</i> ); |
| NPs       | Nanopartículas;                                                                       |
| VED       | Dipolo Elétrico Vertical ( <i>Vertical Electric Dipole</i> )                          |
| FEM       | Método dos Elementos Finitos ( <i>Finite Element Method</i> );                        |
| MoM       | Método dos Momentos;                                                                  |
| FDM       | Método da Diferenças Finitas;                                                         |
| TE        | Transversal Elétrico;                                                                 |
| DCIM      | Método das Imagens Complexas Discretas;                                               |
| <i>Au</i> | Ouro;                                                                                 |

# Lista de símbolos

|                    |                                                               |
|--------------------|---------------------------------------------------------------|
| $\lambda$          | Comprimento de onda                                           |
| $\lambda_{SPP}$    | Comprimento de Onda para melhor propagação da Onda Plasmônica |
| $\theta$           | Ângulo de Incidência em Relação à Normal (Grau ou Radiano)    |
| $\theta_c$         | Ângulo Crítico                                                |
| <b>D</b>           | Densidade Superficial de Fluxo Elétrico                       |
| <b>B</b>           | Densidade Superficial de Fluxo Magnético                      |
| <b>E</b>           | Campo Elétrico Total                                          |
| <b>M</b>           | Campo Magnético Total                                         |
| $\rho_{ext}$       | Densidade de Carga livre (externa)                            |
| $\mathbf{J}_{ext}$ | Densidade de Corrente livre (externa)                         |
| <b>J</b>           | Densidade de Corrente Elétrica de Condução                    |
| $\mathbf{J}_p$     | Densidade de corrente elétrica de polarização equivalente     |
| $\varepsilon$      | Permissividade                                                |
| $\varepsilon_0$    | Permissividade do vácuo                                       |
| $\mu$              | Permeabilidade                                                |
| $\mu_0$            | Permeabilidade do Vácuo                                       |
| $k_0$              | Constante de Propagação no Vácuo                              |
| $\beta$            | Constante de Propagação                                       |
| $x, y, z$          | Coordenadas Cartesianas                                       |
| $E_x$              | Componente de Campo Elétrico na direção $x$                   |
| $E_y$              | Componente de Campo Elétrico na direção $y$                   |
| $E_z$              | Componente de Campo Elétrico na direção $z$                   |
| $H_x$              | Componente de Campo Magnético na direção $x$                  |

|                 |                                                                                          |
|-----------------|------------------------------------------------------------------------------------------|
| $H_y$           | Componente de Campo Magnético na direção $y$                                             |
| $H_z$           | Componente de Campo Magnético na direção $z$                                             |
| $c$             | Velocidade da Luz no Vácuo                                                               |
| $\omega$        | Frequência Angular da Onda                                                               |
| $f$             | Frequência em Hz                                                                         |
| $\varepsilon_c$ | Permissividade Relativa do Condutor/Metal                                                |
| $\varepsilon_d$ | Permissividade Relativa do Dielétrico                                                    |
| $\varepsilon_p$ | Permissividade Relativa do Prisma                                                        |
| $k_c$           | Constante de Propagação no Meio Condutor                                                 |
| $k_d$           | Constante de Propagação no Meio Dielétrico                                               |
| $k_{SPP}$       | Constante de Propagação Plasmônica (SPPs)                                                |
| $k_p$           | Constante de Propagação no Prisma                                                        |
| $k_x$           | Constante de Propagação Projetado ao longo da interface Metal/prisma, sobre o eixo $x$ . |
| $\omega_{SPP}$  | Frequência de Plasma de Superfície                                                       |
| $\omega_p$      | Frequência de Plasma                                                                     |
| $L_{SPP}$       | Comprimento de Propagação da onda SPP                                                    |
| $\theta_{SPP}$  | Ângulo de excitação e de melhor acoplamento da onda Plasmônica                           |
| $z'$            | Posição e altura do dipolo                                                               |
| $d$             | Espessura                                                                                |

# Sumário

|            |                                                                      |           |
|------------|----------------------------------------------------------------------|-----------|
| <b>1</b>   | <b>INTRODUÇÃO</b>                                                    | <b>19</b> |
| <b>1.1</b> | <b>Objetivo do Trabalho</b>                                          | <b>21</b> |
| <b>1.2</b> | <b>Organização do Trabalho</b>                                       | <b>21</b> |
| <b>2</b>   | <b>ONDAS PLASMÔNICAS NOS METAIS</b>                                  | <b>23</b> |
| <b>2.1</b> | <b>Plasmon Polaritons de Superfície (SPP) em uma Interface Plana</b> | <b>23</b> |
| <b>2.2</b> | <b>Excitação de SPPs em uma Interface Plana</b>                      | <b>30</b> |
| 2.2.1      | Excitação de SPPs Usando Acoplamento de Prisma                       | 30        |
| 2.2.2      | Excitação de SPPs por Campo Próximo                                  | 32        |
| <b>3</b>   | <b>SENSOR PLASMÔNICO NA CONFIGURAÇÃO SPCE</b>                        | <b>35</b> |
| <b>3.1</b> | <b>Modelo Eletromagnético Equivalente do Sensor SPCE</b>             | <b>38</b> |
| <b>4</b>   | <b>MODELAGEM NUMÉRICA DO SENSOR SPCE EM 2D</b>                       | <b>41</b> |
| <b>4.1</b> | <b>Método dos Elementos Finitos</b>                                  | <b>41</b> |
| <b>4.2</b> | <b>COMSOL Multiphysics</b>                                           | <b>44</b> |
| 4.2.1      | Definições Globais                                                   | 46        |
| 4.2.2      | Componentes ( <i>Component</i> )                                     | 47        |
| <b>4.3</b> | <b>Modelo 1 - Sensor SPR na configuração SPCE com 3 camadas 2D</b>   | <b>47</b> |
| 4.3.1      | Física aplicada ao Problema: Radio Frequência                        | 48        |
| 4.3.1.1    | Condutor Elétrico Perfeito ( <i>Perfect Electric Conductor</i> )     | 50        |
| 4.3.1.2    | Domínio <i>Far-Field</i>                                             | 50        |
| 4.3.1.3    | Ponto de Dipolo Elétrico ( <i>Electric Point Dipole</i> )            | 51        |
| 4.3.2      | Discretização da Malha                                               | 51        |
| 4.3.3      | Estudo ( <i>Study</i> ) do modelo                                    | 53        |
| <b>4.4</b> | <b>Modelo 2 - Sensor SPR na configuração SPCE com 4 camadas 2D</b>   | <b>54</b> |
| <b>5</b>   | <b>RESULTADOS E DISCUSSÕES</b>                                       | <b>57</b> |
| <b>5.1</b> | <b>Análise e Validação do Sensor SPCE 2D com 3 Camadas</b>           | <b>57</b> |
| <b>5.2</b> | <b>Análise do Sensor SPCE 2D com 4 Camadas</b>                       | <b>65</b> |
| <b>6</b>   | <b>CONCLUSÃO</b>                                                     | <b>68</b> |
| <b>6.1</b> | <b>Trabalhos Futuros</b>                                             | <b>69</b> |
|            | <b>Referências</b>                                                   | <b>70</b> |

# 1 Introdução

Plasmon Polaritons de superfície (*Surface Plasmon Polariton*-SPP) são excitações eletromagnéticas que se propagam na interface entre um dielétrico e um condutor, onde campos evanescentes existem confinados na direção perpendicular à interface e as ondas se propagam ao longo da interface com comprimento de onda  $\lambda_{SPP}$  menor que o comprimento de onda do espaço livre [3][16]. Estas ondas de superfície eletromagnéticas surgem do acoplamento dos campos eletromagnéticos com as oscilações dos elétrons livres do condutor, condição de casamento de fase [3][2].

O uso da aplicação da plasmônica (SPP) vem crescendo fortemente nos últimos anos, devido a sua aplicabilidade além do limite de difração, que não permite o confinamento da luz em uma secção transversal com dimensões menores que meio comprimento de onda [2][12]. Alguns exemplos do uso das SPPs são guias de ondas plasmônicos com dimensões menores que o limite de difração, confinamento espacial e em sensores ópticos com alta resolução. Sensores ópticos baseados em ondas SPP são conhecidos como sensores de ressonância plasmônica de superfície (SPR—*Surface Plasmon Resonance*) [13][17]. Estes dispositivos fotônicos (Figura 1) detectam variações do índice efetivo de refração de uma estrutura multicamada, por meio da interação da onda plasmônica excitada na interface metal-dielétrico com as amostras do material a ser analisado na superfície do sensor [13]. Sensores SPR podem ser utilizados para detecção de espécies químicas e biológicas, diagnósticos médicos (câncer, por exemplo) e monitoramento viral, monitoramento de nanopartículas ou nanopoluentes produzidos por resíduos de processos de nanofabricação entre outras aplicações que vem atraindo a atenção de vários pesquisadores a estudar estes dispositivos [13][17][18].

A área da Plasmonica [3] tem se desenvolvido muito rapidamente nas últimas três décadas, desde a primeira demonstração experimental ótica da ressonância de plasma superficial (SPR) por Otto e Kreschmann, independentemente em 1968 [19][20]. Muitos artigos e livros descrevem em detalhes o progresso histórico e o estado da arte da espectroscopia SPR aplicada a bio-sensoriamento, ou sensoriamento analítico, onde o progresso na tecnologia de fabricação de dispositivos de filmes finos e no desenvolvimento de esquemas alternativos de detecção é acompanhado por oportunos protocolos de funcionalização química da superfície ativa do sensor [17][18]. A condição de casamento de fase com a onda SPP pode ser atendida quando o feixe de excitação incide na interface metal/dielétrico por meio de um prisma acoplado à estrutura [21].

Um sensor SPR, utilizando acoplamento de prisma, foi apresentado em 2003 por Joseph R. Lakowicz, na configuração *Surface Plasmon Coupled Emission* (SPCE),

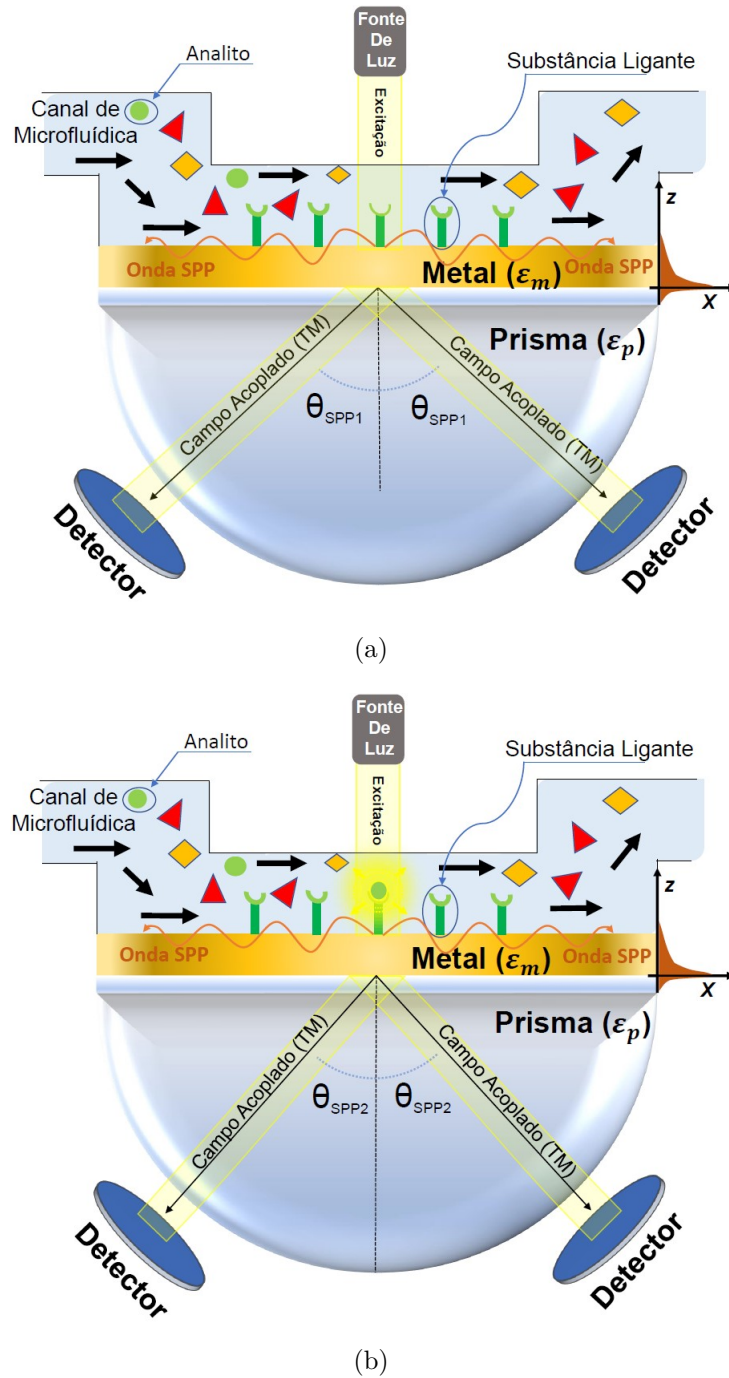


Figura 1 – a) Esquema experimental de um sensor SPR em configuração SPCE. Em ausência do analito o plasmon irradiado é adquirido por um detector a um ângulo  $\theta_1$  respeito a normal do prisma de vidro. b) A presença do analito em solução provoca uma mudança no ângulo de emissão do plasmon  $\theta_2$ .

exemplificado na [Figura 1](#) e foco desse trabalho [\[22\]](#). A estrutura do sensor é composta por um sistema multicamadas, formada por um prisma, uma fina camada de metal (ouro) e um meio externo, que pode ser líquido ou gasoso, por onde passarão os analitos. Os analitos são nanopartículas (NPs) ou nanopoluentes, que são ligados a camada fina de metal por substâncias espaçadoras e ligantes que aderem substâncias específicas ao sensor



[13].

As NPs são excitadas por um feixe de luz, não monocromática, comportando-se como elementos radiadores ópticos em um comprimento de onda de ressonância específico associado a suas características físicas ou geométricas [23][24][25][13]. O processo de detecção das NPs é baseado na resposta óptica do sensor em função das características dielétricas da amostra; no espectro óptico, a operação do sensor SPCE é baseada no fenômeno da ressonância plasmônica, que ocorre em metais nobres submetidos a altas frequências [26][1]. No SPCE, os elementos radiadores tem dimensões menores que o comprimento de ondas de excitação, com isso, as NPs são representadas por dipolos infinitesimais ou correntes elementares [5][13].

## 1.1 Objetivo do Trabalho

Sensores baseados na configuração SPCE envolvem as interações dos campos próximos das NPs sobre a superfície do sensor, onde estas interações resultam nas ondas SPP e alteram características de emissão das ondas no prisma, espalhando-as em um específico comprimentos de onda e um ângulo de acoplamento SPP (associado a NPs) obtido como resposta do sensor [13]. Com isso, o objetivo principal desse trabalho é resolver e analisar os campos próximos e distantes de elementos radiadores infinitesimais em estruturas de três e quatro camadas, com comprimento de onda  $\lambda = 632.8\text{ nm}$  ou nas frequências ópticas, para o sensor plasmônico na configuração SPCE através do *software* COMSOL Multiphysics®, que usa o método numérico dos elementos finitos obter a solução eletromagnética do sensor.

A primeira análise tem o objetivo de modelar o sensor SPCE com 3 camadas em ambiente 2D do *Software* e comparar os principais resultados, de campo próximo e distante, com resultados numéricos obtidos por modelos em ambiente 3D usando o mesmo *Software* [12] ou por resultado obtidos por outros métodos de solução como o numérico feito por [14] ou DCIM [13].

A segunda análise tem o objetivo de modelar o sensor SPCE com 4 camadas em ambiente 2D e comparar os resultados com resultados experimentais obtidos para um sensor na configuração Kretschmann por [15], afim de validar os resultados e o modelo 2D criado.

## 1.2 Organização do Trabalho

O trabalho está dividido em 6 capítulos. Este capítulo apresentou a introdução do tema tratado e o objetivo do trabalho.

O [Capítulo 2](#) apresenta uma breve revisão teórica sobre a Plasmônica e suas aplicações, Plasmom Polaritons de superfície (SPPs) e suas aplicações, e também os tipos de Excitação de ondas SPPs em interfaces planas.

No [Capítulo 3](#) apresenta-se conceitos sobre sensores plasmônicos na configuração SPCE, assim como seu modelo eletromagnético equivalente em estruturas de multicamadas (3 e 4 camadas).

No [Capítulo 4](#) é mostrada a modelagem numérica do sensor SPCE, apresenta-se o método numérico dos elementos finitos(FEM) usado para a solução do problema aqui tratado, assim como o *software* COMSOL Multiphysics® e suas ferramentas usadas na modelagem em 2D e solução eletromagnética do problema desse trabalho.

Com isso, no [Capítulo 5](#) são abordados e comentados os principais resultados obtidos, de campos próximos e distantes, das simulações feitas no *Software*. E por fim, no [Capítulo 6](#), feita as considerações finais e a conclusão do trabalho junto das intenções de trabalhos futuros.

## 2 Ondas Plasmônicas nos Metais

Devido aos grandes avanços tecnológicos em busca de dispositivos cada vez mais compactos e com dimensões em escala nanométricas, pesquisadores [27] vem tentando unir as melhores características de dispositivos eletrônicos e de dispositivos ópticos. Circuitos eletrônicos são mais facilmente compactados mas com velocidade de operação limitada, ao contrário de dispositivos ópticos, que trabalham com velocidade alta, mas suas dimensões são limitadas pelo limite de difração que impede que a luz seja confinada em uma seção transversal menor que meio comprimento de onda [2]. Uma forma de contornar isso é usando o princípio da Plasmônica, de ondas SPPs, que são modos eletromagnéticos que se propagam ao longo da interfase de um metal/dielétrico [1][2]. Com isso, é possível o guiamento da onda em dispositivos com dimensões abaixo do comprimento de onda, e a fabricação de dispositivos em escalas nanométricas [2].

### 2.1 Plasmon Polaritons de Superfície (SPP) em uma Interface Plana

A excitação de metais em frequências ópticas produz a oscilação de uma nuvem de elétrons com fase oposta ao campo elétrico da radiação incidente. Este efeito resulta em uma função dielétrica complexa, com parte real negativa e a onda correspondente é conhecida como onda plasmônica, e seu estudo em nanoestruturas é chamada de nanoplasmônica ou plasmônica [3][28]. Plasmon Polaritons de Superfície (*Surface Plasmon Polariton*—SPP) são excitações eletromagnéticas que se propagam na interface entre um dielétrico e um condutor, onde campos evanescentes existem confinados na direção perpendicular à interface e as ondas se propagam ao longo da interface com comprimento de onda  $\lambda_{SPP}$  menor que o comprimento de onda do espaço livre [3][16]. Estas ondas de superfície eletromagnéticas surgem do acoplamento dos campos eletromagnéticos com as oscilações dos elétrons livres do condutor em que esses respondem coletivamente oscilando em ressonância com o campo eletromagnético e só existem no modo de polarização transversal magnético (TM) [3][2].

As excitações de superfície são caracterizadas em termos da sua dispersão e perfil espacial, em conjunto com a discussão detalhada da quantificação de confinamento de campo [3]. As SPPs são descritas matematicamente usando as equações de Maxwell, a seguir, em uma interface plana com um condutor e um dielétrico, usando a equação da onda como ponto de partida aplicável ao guiamento de ondas eletromagnéticas.

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho_{ext} \quad (2.1)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (2.2)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad (2.3)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{J}_{ext} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} \quad (2.4)$$

Expandindo e combinando a [Equação 2.3](#) e a [Equação 2.4](#) convenientemente até obter-se a equação da onda na forma:

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{E} = -\mu_0 \frac{\partial^2 \mathbf{D}}{\partial t^2} \quad (2.5)$$

Usando entidades vetoriais, assumindo ausências de cargas externas, desprezando a variação do perfil dielétrico  $\varepsilon$ , assumindo uma dependência do tempo harmônico do campo elétrico  $\frac{\partial}{\partial t} = j\omega$  obtemos uma forma adequada para descrição de propagação de ondas confinadas:

$$\nabla^2 \mathbf{E} - k_0^2 \varepsilon \mathbf{E} = 0 \quad (2.6)$$

A [Equação 2.6](#) é conhecida como equação de Helmholtz, onde  $k_0 = \frac{\omega}{c}$  é o vetor de propagação no vácuo.

Assumindo uma geometria, por simplicidade, unidimensional, com  $\varepsilon$  dependendo apenas de uma coordenada espacial e a onda propagando somente na direção  $x$  e sem variação espacial no eixo  $y$  no eixo cartesiano, com isso  $\varepsilon = \varepsilon(z)$ . O plano  $z = 0$  coincide com a interface de propagação da onda plasmônica, como mostra a [Figura 2](#) abaixo:

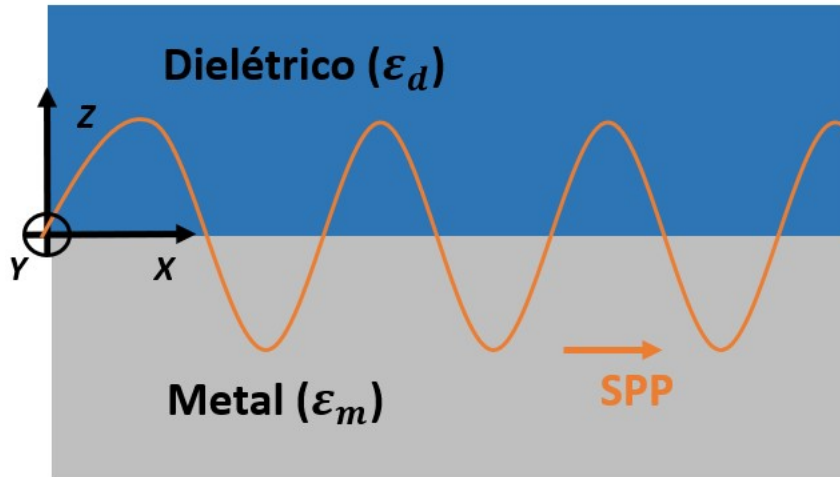


Figura 2 – Representação da geometria de uma interface plana metal( $\varepsilon_d$ )/dielétrico( $\varepsilon_m$ ) para o estudo das SPPs.

O campo elétrico agora pode ser descrito como  $E(x, y, z) = E(z)e^{j\beta x}$ , onde  $\beta = k_x$  é a constante de propagação correspondente ao vetor de propagação da onda, substituindo

a nova expressão para o campo elétrico na [Equação 2.6](#) obtemos a desejada equação da onda para nosso problema, onde existe naturalmente uma equação para o campo magnético  $\mathbf{H}$ :

$$\frac{\partial^2 \mathbf{E}(\mathbf{z})}{\partial z^2} + (k_0^2 \varepsilon - \beta^2) \mathbf{E} = 0 \quad (2.7)$$

Usando a equação da onda [2.7](#) como ponto de partida para encontrar o perfil do campo espacial e a dispersão de propagação da onda, deve-se encontrar expressões explícitas para os diferentes componentes do campo de  $\mathbf{E}$  e  $\mathbf{H}$  [3](#) [1](#).

Substituindo a dependência de tempo harmônico  $\frac{\partial}{\partial t} = -j\omega$  nas equações [2.3](#) [2.4](#), utilizando relações rotacionais e assumindo que em nossa geometria a direção de propagação é  $x$ , tal que não há confinamento e variação de campo na direção  $y$  ( $\frac{\partial}{\partial y} \equiv 0$ ), obtemos o seguinte sistema de equações acopladas simplificadas [3](#) [1](#):

$$\frac{\partial E_y}{\partial z} = -j\omega\mu_0 H_x \quad (2.8)$$

$$\frac{\partial E_x}{\partial z} - j\beta E_z = j\omega\mu_0 H_y \quad (2.9)$$

$$j\beta E_y = j\omega\mu_0 H_z \quad (2.10)$$

$$\frac{\partial H_y}{\partial z} = j\omega\varepsilon_0 \varepsilon E_x \quad (2.11)$$

$$\frac{\partial H_x}{\partial z} - j\beta H_z = -j\omega\varepsilon_0 \varepsilon E_y \quad (2.12)$$

$$j\beta H_y = -j\omega\varepsilon_0 \varepsilon E_z \quad (2.13)$$

Este sistema permite dois conjuntos de soluções auto-consistentes com diferentes propriedades de polarização das ondas propagantes, os modos TE (Transversal Elétrico) e os modos TM (Transversal Magnético).

#### a. MODO TRANSVERSAL MAGNÉTICO

Para o conjunto dos modos transversal magnético (TM ou p), de acordo com [Figura 3\(a\)](#), em que apenas os componentes de campo  $E_x$ ,  $E_z$  e  $H_y$  são diferentes de zero, o sistema de equações de [2.8](#) a [2.13](#) se reduz a:

$$E_x = -j \frac{1}{\omega\varepsilon_0 \varepsilon} \frac{\partial H_y}{\partial z} \quad (2.14)$$

$$E_z = -\frac{\beta}{\omega\varepsilon_0 \varepsilon} H_y \quad (2.15)$$

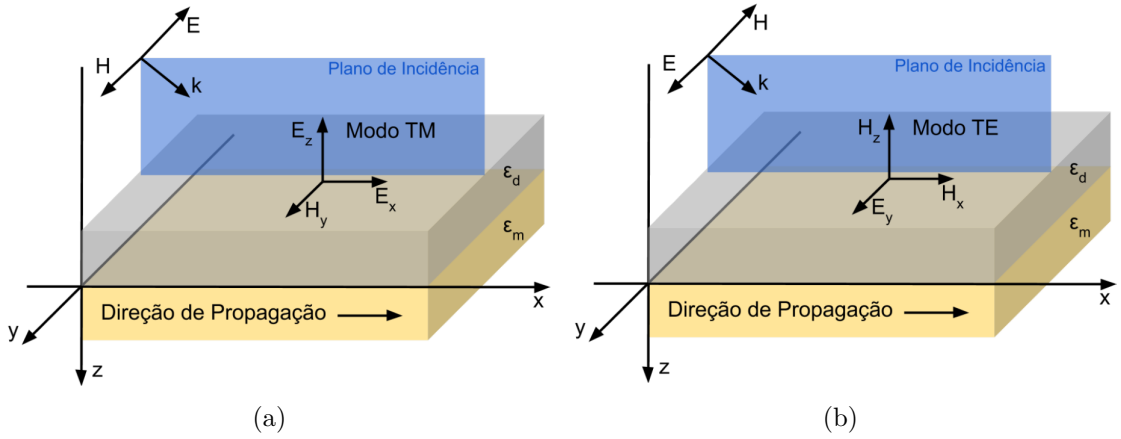


Figura 3 – Representação da geometria de uma interface metal( $\varepsilon_d$ )/dielétrico( $\varepsilon_m$ ) para o estudo das SPPs no (a) Modo TM e (b) Modo TE. Adaptado de [1]

Sendo a equação da onda para o modo TM:

$$\frac{\partial^2 H_y}{\partial z^2} + (k_0^2 \varepsilon - \beta^2) H_y = 0 \quad (2.16)$$

Para a solução deste modo, pegamos o caso mais simples que sustenta as SPPs, mostrados na [Figura 3\(a\)](#), de uma interface plana entre um dielétrico  $z > 0$  com permissividade real positiva  $\varepsilon_d$  e um meio condutor  $z < 0$  com permissividade complexa  $\varepsilon_m(\omega)$ , tal que  $Re[\varepsilon_m] < 0$ . Queremos olhar para soluções de propagação de ondas confinados à interface, ou seja, com deterioração evanescente na direção  $z$  perpendicular [\[3\]](#). Dessa forma, usando o conjunto de equações [2.14-2.16](#) do modo TM em ambos os meios temos:

– Para  $z > 0$ ,

$$H_y(z) = A_d e^{j\beta x} e^{-k_d z} \quad (2.17)$$

$$E_x(z) = j A_d \frac{1}{\omega \varepsilon_0 \varepsilon_d} k_d e^{j\beta x} e^{-k_d z} \quad (2.18)$$

$$E_z(z) = -A_d \frac{\beta}{\omega \varepsilon_0 \varepsilon_d} e^{j\beta x} e^{-k_d z} \quad (2.19)$$

– Para  $z < 0$ ,

$$H_y(z) = A_m e^{j\beta x} e^{-k_m z} \quad (2.20)$$

$$E_x(z) = -j A_m \frac{1}{\omega \varepsilon_0 \varepsilon_m} k_m e^{j\beta x} e^{-k_m z} \quad (2.21)$$

$$E_z(z) = -A_m \frac{\beta}{\omega \varepsilon_0 \varepsilon_m} e^{j\beta x} e^{-k_m z} \quad (2.22)$$

$k_i \equiv k_{z,i}$  ( $i = 1, 2$ ) é o componente do vetor de onda perpendicular à interface nos dois meios. Seu valor recíproco,  $\hat{z} = 1/|k_z|$ , define o comprimento de decaimento evanescente dos campos perpendicular à interface, determinando o confinamento da onda. A continuidade de  $H_y$  e  $\varepsilon_j E_x$  na interface requer que  $A_d = A_m$  então temos [3][2]:

$$\frac{k_d}{k_m} = -\frac{\varepsilon_d}{\varepsilon_m} \quad (2.23)$$

A condição para que a onda seja confinada na interface requer que  $Re[\varepsilon_m] < 0$  se  $\varepsilon_d > 0$  (as ondas de superfície existem apenas em interfaces entre materiais com sinais opostos da parte real de suas permissividades dielétricas, ou seja, entre um condutor e um isolador). A expressão para  $H_y$  ainda tem que cumprir a equação de onda 2.16, obtendo-se [3][1]

$$k_m^2 = \beta^2 - k_0^2 \varepsilon_m \quad (2.24)$$

$$k_d^2 = \beta^2 - k_0^2 \varepsilon_d \quad (2.25)$$

Combinando as equações 2.24 e 2.25 chega-se ao resultado central desta seção, a relação de dispersão de SPPs que se propagam na interface entre dielétrico/condutor [3],

$$k_{SPP} = \beta = k_0 \sqrt{\frac{\varepsilon_m \varepsilon_d}{\varepsilon_m + \varepsilon_d}} \quad (2.26)$$

Esta expressão é válida para  $\varepsilon_m$  real e complexa, ou seja, para condutores sem e com atenuação [3].

## b. MODO TRANSVERSAL ELÉTRICO

Para o conjunto dos modos transversal elétrico (TE ou s), de acordo com Figura 3(b), com apenas  $H_x$ ,  $H_z$  e  $E_y$  sendo diferente de zero, o sistema de equações de 2.8 a 2.13 se reduz a:

$$H_x = j \frac{1}{\omega \mu_0} \frac{\partial E_y}{\partial z} \quad (2.27)$$

$$H_z = \frac{\beta}{\omega \mu_0} E_y \quad (2.28)$$

sendo a equação da onda para o modo TE:

$$\frac{\partial^2 E_y}{\partial z^2} + (k_0^2 \varepsilon - \beta^2) E_y = 0 \quad (2.29)$$

Usando o conjunto de equações 2.27-2.29 do modo TE, para ambos os meios ( $z > 0$  e  $z < 0$ ), sendo o processo de solução dual ao modo TM e o seu desenvolvimento

matemático detalhado pode ser encontrado em [3], obtemos que a continuidade de  $E_y$  e  $H_x$  na interface leva a condição,

$$A_m(k_m + k_d) = 0 \quad (2.30)$$

Para isso, o confinamento de campo na interface exige  $Re[k_m] > 0$  e  $Re[k_d] < 0$ . Isso só é possível se  $A_m = 0$ , de modo que  $A_m = A_d = 0$ . Assim, não existem SPPs para a polarização TE. Concluímos que as SPPs só existem na polarização TM e que para existência de seus modos, o campo magnético deve ser perpendicular a direção de propagação paralelo a interface dielétrico/condutor [3][2].

A análise das propriedades das SPPs é feita analisando a relação de dispersão  $k_{SPP}$  dada pela Equação 2.26, para um metal, sendo a prata com amortecimento desprezível descrito pela função dielétrica de Drude não amortecida Equação 2.31. Analisando 2.26 para 2 tipos de casos; 1) com o metal-prata ( $\varepsilon(\omega)$ ) e o dielétrico o Ar ( $\varepsilon_2 = 1$ ); 2) metal-prata ( $\varepsilon(\omega)$ ) e o dielétrico a sílica fundida ( $\varepsilon_2 = 2, 25$ ) [3][2].

$$\varepsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \quad (2.31)$$

A Figura 4, mostra os resultados para as duas situações, onde a frequência angular  $\omega$  é normalizada para frequência de plasma  $\omega_p$ . O gráfico do primeiro caso está em azul e do segundo caso em vermelho. Pode-se observar que há um valor de frequência máximo que o veto de propagação SPP ( $k_{SPP}$ ) pode atingir e depende do tipo de dielétrico que interage com o metal [2]. Essa frequência é conhecida como frequência de Plasma de Superfície  $\omega_{SPP}$  e obtida substituindo a Equação 2.31 na relação de dispersão Equação 2.26 obtendo-se [3]:

$$\omega_{SPP} = \frac{\omega_p}{\sqrt{1 + \varepsilon_d}} \quad (2.32)$$

A partir da Figura 4, observa-se que as curvas de excitações de plasma de superfície (linha azul tracejada e linha vermelha pontilhada e tracejada) estão à direita das respectivas linhas de luz de Ar e sílica, isso significa que não existem oscilações entre fótons e elétrons, por isso, a luz que incide diretamente na superfície do metal não é acoplada ao plásmom de superfície. Assim, técnicas especiais de casamento de fase, como acoplamento de grade ou prisma, são empregadas para excitar as ondas SPPs [3][2]. Para frequências maiores que a do plasma ( $\omega > \omega_p$ ) a radiação nos metais começa a existir, sendo esse o regime transparente. Ao se aproximar da frequência plasmônica, o valor de  $k_{SPP}$  se curva tendendo ao infinito, essa região em que o vetor de onda dos plásmos de superfícies se torna maior que a da propagação dos fótons livres é chamada de modo confinado, em que é possível o confinamento da onda superficial na interface [12]. Acima da frequência plasmônica e abaixo do regime transparente, existe uma região de frequência com  $k_{SPP}$  puramente imaginário que proíbe a propagação de SPPs. Para frequências baixas (infravermelho



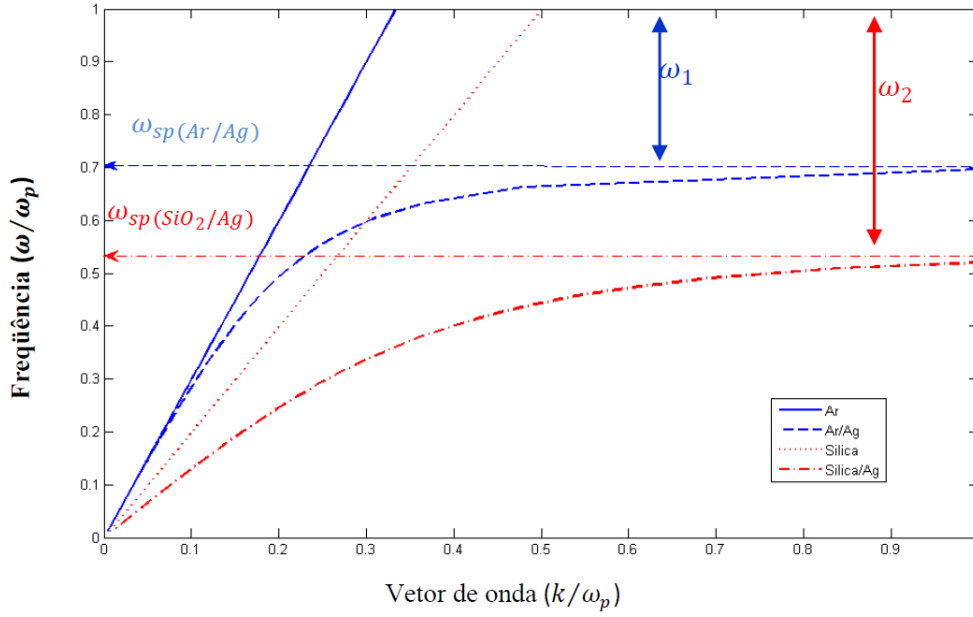


Figura 4 – Relação de dispersão de SPPs para a interface metal/dielétrico. O metal é representado pela função dielétrica de *Drude* com amortecimento desprezível. Para o dielétrico Ar, linhas azul, para o dielétrico Sílica, linhas vermelhas. Adaptado de [2]

médio ou menor),  $k_{SPP}$  se aproxima de  $k_0$  e com isso as ondas se estendem por muitos comprimentos de ondas no espaço dielétrico e com uma incidência rasante, que explica a difração das ondas de rádio pela superfície da terra em longas distâncias [12][3].

A análise anterior é feita assumindo um condutor ideal com função dielétrica real ( $\text{im}[\varepsilon] = 0$ ), mas para as excitações em metais reais sofrem de elétrons livres e amortecimento. Logo, para o caso que  $\varepsilon_1(\omega)$  é complexo, consequentemente  $k_{SPP}$  complexo, os SPPs excitados são amortecidos com comprimento de propagação igual a:

$$L_{SPP} = \frac{1}{2\text{Im}[k_{SPP}]} \quad (2.33)$$

A Figura 5 mostra um exemplo para o caso amortecido em interfaces de Prata/Ar e Prata/sílica, onde observa-se que os SPPs excitados se aproximam de um valor finito máximo de  $k_{SPP} = \beta$  na frequência de plasma de superfície. Com isso, temos um comprimento de onda  $\lambda_{SPP} = 2\pi/\text{Re}[\beta]$  limitado. Também observa-se que agora é permitida a excitação de SPPs na região entre  $\omega_p$  e  $\omega_{SPP}$ , ao contrário do primeiro caso Figura 4 [3]. Essa análise também mostra que para frequências próximas a frequência plasmônica as SPPs exibem maior confinamento, porém menor propagação devido ao maior amortecimento. Por isso, Quanto melhor o confinamento, menor o comprimento de propagação [3][12].

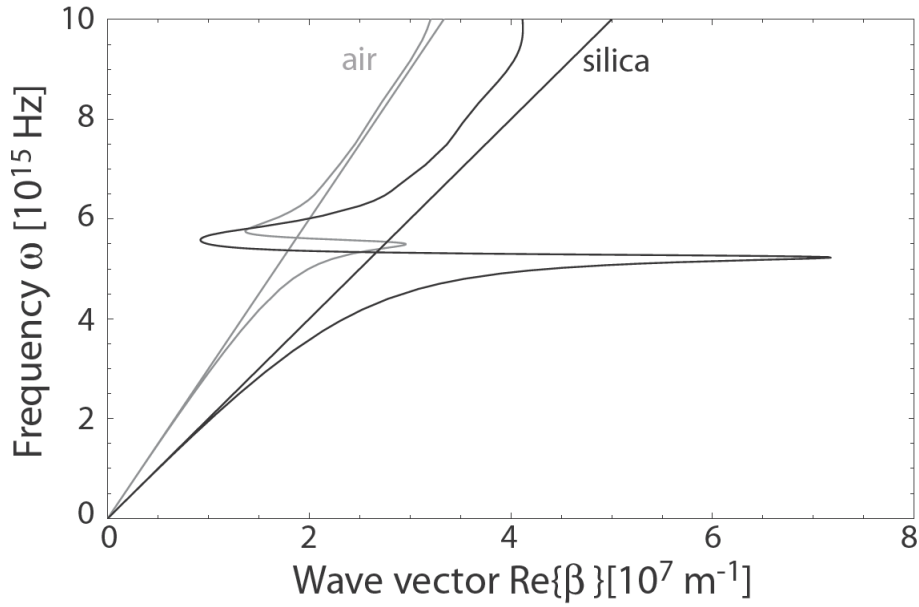


Figura 5 – Relação de dispersão de SPPs para a interface Prata/ar ( linha cinza) e Prata/sílica (linha preta). As SPPs agora são amortecidas com comprimento de propagação finito. Adaptado de [3].

## 2.2 Excitação de SPPs em uma Interface Plana

Para se obter o confinamento e a excitação de SPPs é necessário que a constante de propagação SPP  $k_{SPP}$  seja maior que a constante de propagação no dielétrico  $k_d$ . As curvas de dispersão SPP (Figura 5) fica a direita da curva de luz do dielétrico, assim a excitação por feixes de luz tri-dimensionais não é possível [3] [21]. Para que a excitação ocorra, técnicas especiais de casamento de fase devem ser implementadas, como por exemplo: por acoplamento de prisma, acoplamento de grade, excitação usando feixes altamente focados e por fim podemos alcançar o valor de  $k_d$  usando iluminação por campo próximo através de uma fonte de irradiação próximo à interface com o metal [12] [3]. Será apresentado com mais detalhes as técnicas de casamento de fase usando acoplamento de prisma e por campo próximo, visto que são as empregadas no problema principal desse trabalho.

### 2.2.1 Excitação de SPPs Usando Acoplamento de Prisma

Em uma interface plana de metal/dielétrico não é possível excitar as SPPs diretamente por feixe de luz tridimensional nessa estrutura, desde que  $\beta = k_{SPP}$  seja maior que a constante de propagação do lado do dielétrico  $k_d$ . Contudo, o casamento de fase para a SPP pode ser obtido por um sistema de três camadas com uma fina camada de metal entre dois dielétricos, sendo um deles o Ar ( $\varepsilon = 1$ ) e o outro dielétrico um prisma acoplado com maior constante dielétrica  $\varepsilon_p$  [3] [21]. Duas configurações de acoplamento de prisma são possíveis, a de Kretschmann e a de Otto mostradas na Figura 6, onde a

configuração Kretschmann [Figura 6\(a\)](#) é a mais comum devido sua facilidade de aplicação, principalmente em sensoriamento, em que apenas uma película fina de metal é depositado no topo de um prisma de vidro. Os fótons de um feixe de luz monocromático  $L$  incide do lado do vidro em um ângulo maior que o ângulo crítico de reflexão interna total que através do filme de metal excitam as ondas SPPs na interface metal/Ar [\[3\]](#) [\[12\]](#).

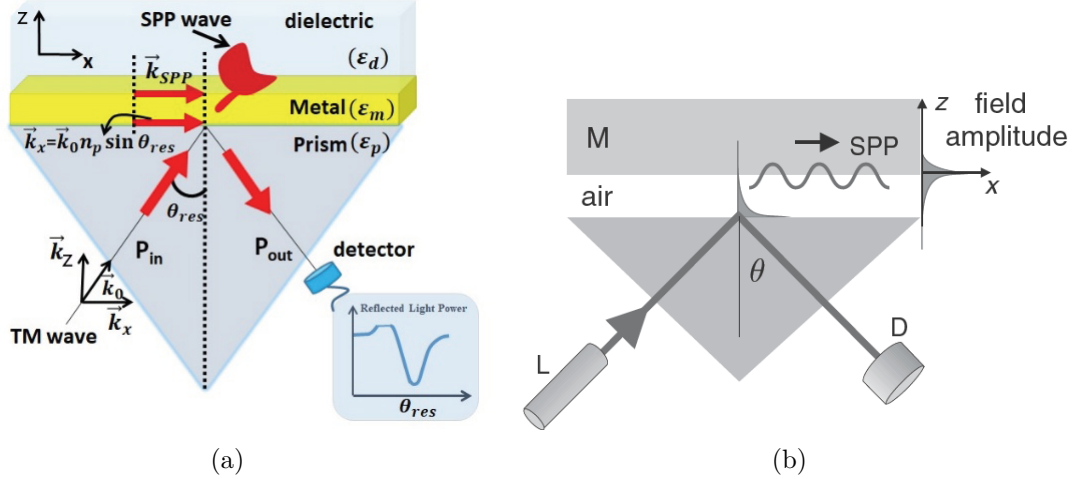


Figura 6 – Geometrias usadas para excitar SPPs por acoplamento de Prisma (a) Configuração Kretschmann, adaptado [\[4\]](#). (b) Configuração Otto.  $L$  representado o feixe de luz usado como fonte de excitação e  $D$  o detector da luz refletida. Adaptado de [\[5\]](#).

A configuração Otto ([Figura 6\(b\)](#)), onde o prisma é separado por um espaçamento de ar da película de metal, é menos usual devido à dificuldade de controle do espaçamento entre o prisma e o metal, preferível apenas quando o contato direto com a superfície de metal é indesejável [\[3\]](#) [\[21\]](#). Nessa configuração, a reflexão interna total ocorre na interface prisma/ar e estimulando as ondas SPPs via tunelamento na interface ar/metal. Estas configurações de acoplamento são conhecidas por sua reflexão interna total e envolvem tunelamento dos feixes de excitação para as interfaces metal/ar ou ar/metal, onde ocorrem a excitação SPP [\[3\]](#).

Devido as ondas plasmônicas só existirem no modo TM, somente um feixe de luz diretamente polarizado em TM excitará a onda SPP. Com isso, ao incidir um feixe de luz TM com um ângulo  $\theta$ , em relação a normal a interface metal/prisma (de acordo com [Figura 6](#)), a projeção ao longo da interface (na direção do eixo  $x$ ) da constante de propagação no prisma  $k_p$  será  $k_x = k_0 \sqrt{\epsilon_p} \sin(\theta)$  que é suficiente para excitar SPPs na interface entre o metal e o dielétrico de índice inferior (o Ar) [\[3\]](#) [\[21\]](#). A condição de casamento de fase para a excitação da onda SPP é obtida quando a projeção  $k_x$  do feixe de excitação é igual a constante de propagação  $\beta = k_{SPP}$ , de acordo com a [Equação 2.34](#). Essa condição pode ser obtida variando o ângulo de incidência  $\theta$  ou o comprimento de

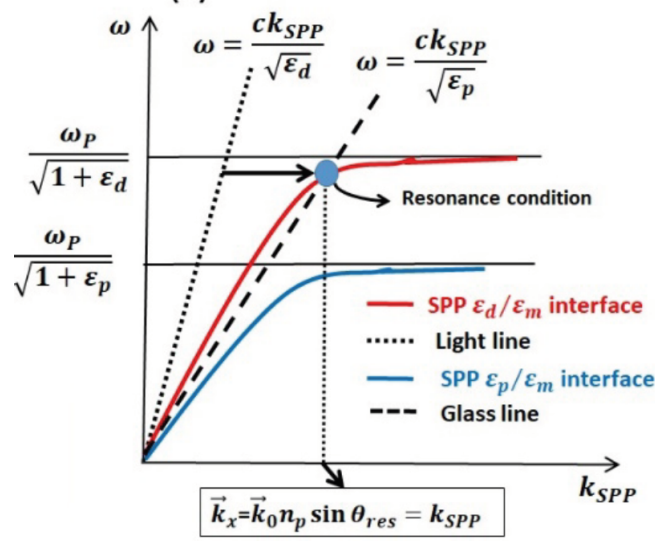


Figura 7 – Relação de dispersão para SPPs por acoplamento de prisma configuração Kretschmann. Adaptada de [4]

onda  $\lambda$  do feixe de excitação [3] [21].

$$k_{SPP} = k_0 \sqrt{\epsilon_p} \sin(\theta) \quad (2.34)$$

O melhor acoplamento da onda SPP é obtido quando temos um mínimo na curva de refletividade para um ângulo  $\theta_{SPP}$  ou comprimento de onda  $\lambda_{SPP}$  [21]. Os SPPs excitados são ondas inerentemente com vazamento, ou seja, perdem energia não apenas devido à absorção inerente dentro do metal, mas também devido ao vazamento de radiação para o prisma. O mínimo na intensidade do feixe refletido é devido à interferência destrutiva entre essa radiação de vazamento e a parte refletida do feixe de excitação, e quanto menor o mínimo, melhor o acoplamento [3] [5] [21]. A Figura 8 mostra curvas de refletividade em função do ângulo  $\theta$  de incidência de um feixe de excitação TM, (a) variando parâmetros como a espessura do metal/prata  $l$ , (b) comprimento de onda  $\lambda$  e (c) índice de refração do meio externo.

### 2.2.2 Excitação de SPPs por Campo Próximo

Os componente paralelos do vetor de onda  $k_x$ , necessários para excitação de SPPs, podem ser obtidos de campos próximos confinados na vizinhança de uma abertura de subcomprimento de onda (ponta de sonda ótica), espalhamento da luz em partículas metálicas ou moléculas fluorescentes, desde que a componente  $k_x$  dos campos radiados seja igual a  $k_{SPP}$  [5] [21]. As técnicas de microscopia óptica de campo próximo permitem a excitação local de SPPs sobre uma área  $a \ll \lambda$  e podem, portanto, atuar como uma fonte pontual para SPPs [3]. Se os campo confinados forem irradiados bem próximos a interface do metal, a excitação da onda SPP podem ser feita localmente [5]. A Figura 9

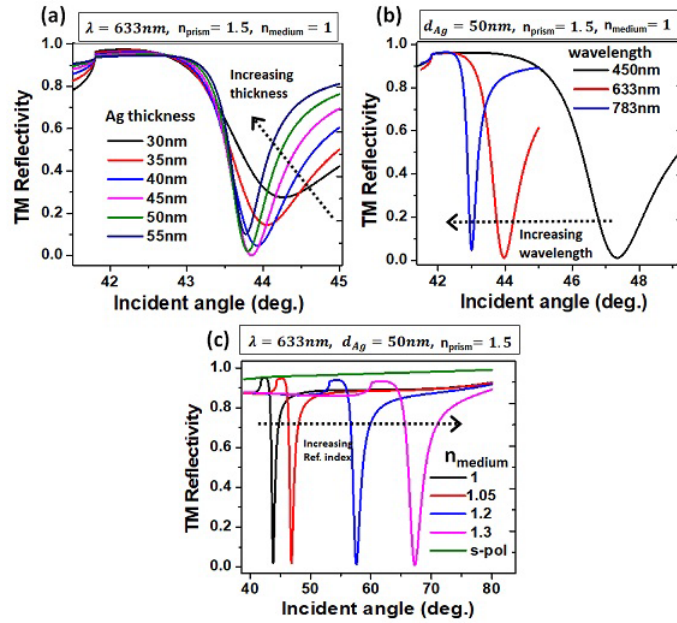


Figura 8 – Curvas de refletividade em relação ao ângulo de incidência na configuração Kretschmann, variando (a) espessura de metal prata, (b) o comprimento de onda  $\lambda$  e (c) o índice de refração do meio externo. O índice de refração do prisma é 1.5. Adaptado de [4]

mostra alguns exemplos de excitação da onda SPP por campo próximo, em que todos os casos, os plasmons de superfície são excitados por componentes evanescentes do espectro angular que correspondem ao vetor de onda paralelo  $k_x$  do plasmon de superfície. As setas no filme de metal indicam a emissão de radiação de vazamento (refratada) [5].

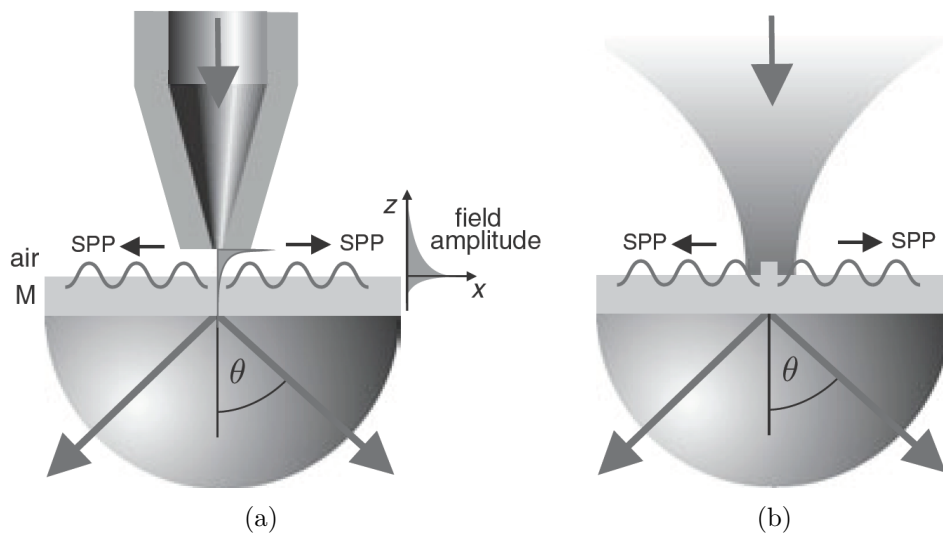


Figura 9 – Exemplos de excitação da onda SPP por campo próximo. (a) uma pequena ponta de prova, com uma fonte de luz de abertura de subcomprimento de onda [6], (b) Por irradiação de nanopartículas [7]. Adaptados de [5]

A Figura 9(a) é um exemplo de excitação de campo próximo usando uma pequena

ponta de sonda ótica, com abertura  $a$  tal que  $a \leq \lambda_{SPP} \leq \lambda$ , para iluminar próximo uma fina camada de metal disposta em cima de um prisma de vidro (hemisférico) para permitir que a radiação de vazamento (refratada) escape e seja registrada. A excitação do plasmon de superfície pode ser monitorada pela observação da radiação de vazamento do plasmon refratada no meio-espaco de vidro ou coletada em um substrato como campos distantes [3] [5]. Devido ao pequeno tamanho da abertura, a luz proveniente da ponta consistirá em componentes do vetor de onda  $k \geq k_{SPP} \geq k_0$ , permitindo assim a excitação por correspondente de fase da onda SPPs com constante de propagação  $k_{SPP}$  localmente e com isso pode-se excitar ondas SPPs em diferentes locais do metal devido a facilidade de posicionar as sondas [3]. O tamanho da fonte e sua distância à superfície do metal determinam o espectro espacial que está disponível para a excitação das onda SPPs, se a fonte estiver muito longe da superfície do metal, apenas os componentes de onda plana do espectro angular alcançam a superfície do metal e, portanto, o acoplamento aos plasmons da superfície é impedido [5].

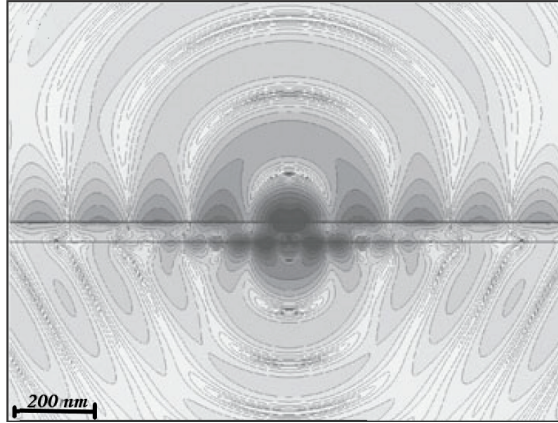


Figura 10 – Linhas de densidades de potência constante em um determinado instante de tempo, para excitação de SPPs por um dipolo 5nm acima de uma camada de prata de 50nm de espessura, conforme a configuração da Figura 9(b). Adaptado de [5]

Um dipolo é uma fonte de excitação ideal no sentido de que seu espectro angular é muito amplo. Fontes mais realistas têm dimensões finitas [5]. A Figura 10 mostra a excitação de ondas SPP feita por um dipolo 5nm acima de uma fina camada de prata de 50nm de espessura, onde o comprimento de onda de excitação é 370 nm e o momento de dipolo é paralelo à interface de prata, conforme a configuração Figura 9(b) [5]. Os resultados obtidos da Figura 10 mostram a densidade de potência em escala logarítmica constante em um determinado instante de tempo, onde observa-se que as SPPs propagadas na superfície superior decaem radiativamente, conforme são manifestadas as frentes de onda no meio inferior [5]. Os resultados desse tipo de excitação são recíprocos aos obtidos pela configuração Kretschmann debatido anteriormente.



### 3 Sensor Plasmônico na Configuração SPCE

O nano sensoriamento baseado nas ondas plasmônicas de superfície (SPPs) pode ser feito por dispositivos conhecidos como sensores de ressonância plasmônica superficial (SPR-*Surface Plasmon Resonance*), onde são capazes de detectar uma sensível variação do índice de refração em uma estrutura com multicamadas por meio da interação do campo evanescente gerado pela onda SPP excitada na interface metal/dielétrico com o material analisado na superfície do sensor [12] [13]. Essa alteração do índice de refração relaciona-se ao acúmulo de analitos, como moléculas ou nanopartículas, na superfície do sensor causando alterações nas características de acoplamento da onda SPP ( $\theta_{SPP}$  ou  $\lambda_{SPP}$ ) e o monitoramento dessas variações de acoplamento é a resposta de saída analisada do sensor [21]. Com este método, a adição ou remoção de materiais alvo da superfície do metal pode ser detectada com precisão de submonocamada [5]. O uso da aplicação de sensores SPR vem crescendo junto ao avanço de dispositivos na escala nanométrica e que são capazes de detectar espécies químicas ou biológicas. Por isso, esses sensores podem ser aplicados em detecção de nanopoluentes e contaminantes químicos em alimentos; em monitoramento viral, câncer e diagnósticos médicos. Desde que substâncias ligantes específicas seja utilizadas no sensor, ele pode monitorar diversos tipos de agentes químicos e biológicos [12] [13] [18].

Um dos sensores SPR mais estudados pela comunidade científica é o sensor utilizando acoplamento de prisma na configuração Kretschmann [2], mostrado na Figura 11, onde sua estrutura multicamada é formada por um prisma, uma fina camada de metal (ouro, prata, cobre e etc.), e o meio dielétrico externo (Ar ou meio líquido) [2] [21]. Nesse sensor, uma fonte de luz diretamente polarizada (TM) incide na interface prisma/metal com um ângulo  $\theta > \theta_c$  ( $\theta_c$  é o ângulo crítico de flexão total) e a onda refletida é analisada.

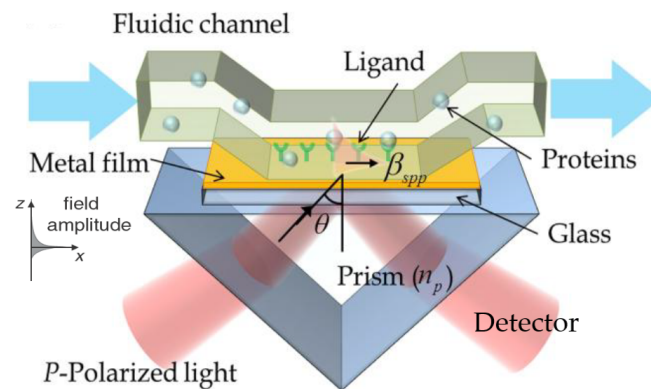


Figura 11 – Sensor SPR na configuração Kretschmann. [8]

Alguns tipos de sensores direcionados a detecção de uma substância ou partícula específica utilizam substâncias ligantes para interagir e fixar analitos específicos na superfície do sensor, como é o caso do sensor representado na Figura 11 [21]. Basicamente a funcionalidade do sensor é analisar no meio próximo a interface metal/dielétrico, onde as variações na constante dielétrica causada pelas amostras variam o ângulo de excitação  $\theta_{SPP}$  das ondas SPPs na interface metal-dielétrico e é monitorado pela posição do mínimo na curva de refletividade, ou seja, a posição do mínimo da curva de refletividade é modificada quando a amostra de um determinado analito interage com a superfície externa do sensor [12] [13]. A Figura 12, obtida por simulação [5], mostra a variação causada pela deposição de uma camada de água de 3 nm sobre o filme de metal(prata) de 50 nm de espessura, de acordo com o esquema da Figura 11 [5].

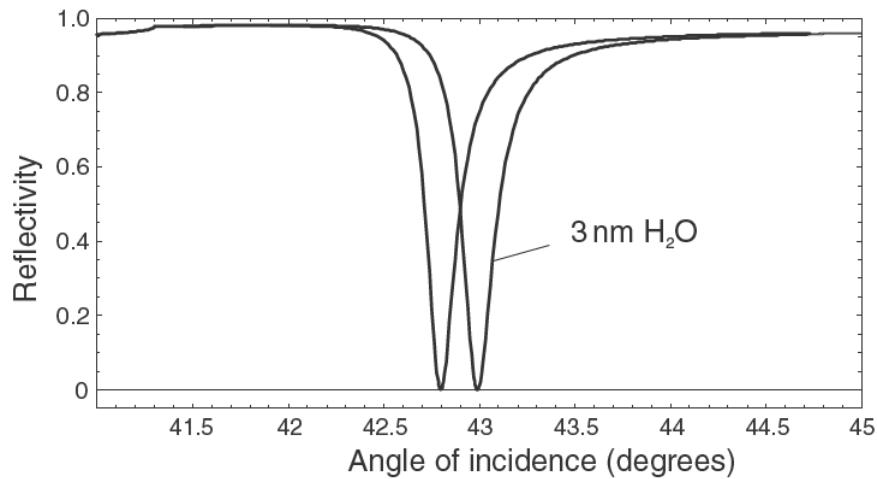


Figura 12 – Deslocamento na curva refletividade causado por uma camada de água de 3 nm adsorvida em um filme de prata de 53 nm de espessura [5].

Outro sensor SPR comumente estudado é o sensoriamento baseado no acoplamento das SPPs por campos próximos originados do espalhamento (fluorescência) da luz em partículas ou moléculas fluorescentes, tendo como objetivo melhorar a sensibilidade do sensor SPR para a detecção de baixas concentrações de analitos [5] [13]. Esse sensor SPR é chamado de SPCE (*Surface Plasmon Coupled Emission*), tal que sua alta sensibilidade está associada ao incremento do campo próximo a estas nanopartículas devido o efeito plasmônico associado a elas e tem a vantagem de aumentar o contraste das imagens obtidas de um esquema mais simples [12] [13] [29]. O estudo de sensores SPR na configuração SPCE é o objetivo principal desse trabalho, através de soluções numéricas obtidas pelo COMSOL Multiphysics®.

O Sensor SPCE desse trabalho é ilustrado na Figura 13, onde sua estrutura é formada por uma fina película de ouro depositado sobre um prisma acoplados ao canal de microfluídica, por onde passam as moléculas fluorescentes, e que serão ligados na estrutura do sensor por substâncias ligantes específicas e assim sendo excitadas por uma fonte (*Laser*)



externa [1] [13]. O processo de sensoriamento é baseado no monitoramento da variação nas propriedades da luminescência óptica do sensor devido as interações com os analitos de interesse e suas características dielétricas [13]. As SPPs são excitadas pela fluorescência de moléculas/partículas próximas a película de ouro, onde as componentes de onda do padrão de radiação dessas partículas ( que possuem componente paralela à interface do vetor de propagação igual a  $k_{X_{spp}}$ ) excitam as SPPs que irradiam através da camada de ouro para o prisma apresentando um diagrama de campo distante na região do prisma em formato de cone, com abertura igual a  $2\theta_{SPP}$ , detectados por um anteparo sensitivo tal que o ângulo de emissão  $\theta_{SPP}$  é correspondente ao ângulo de Kretschmann discutido anteriormente [12] [5].

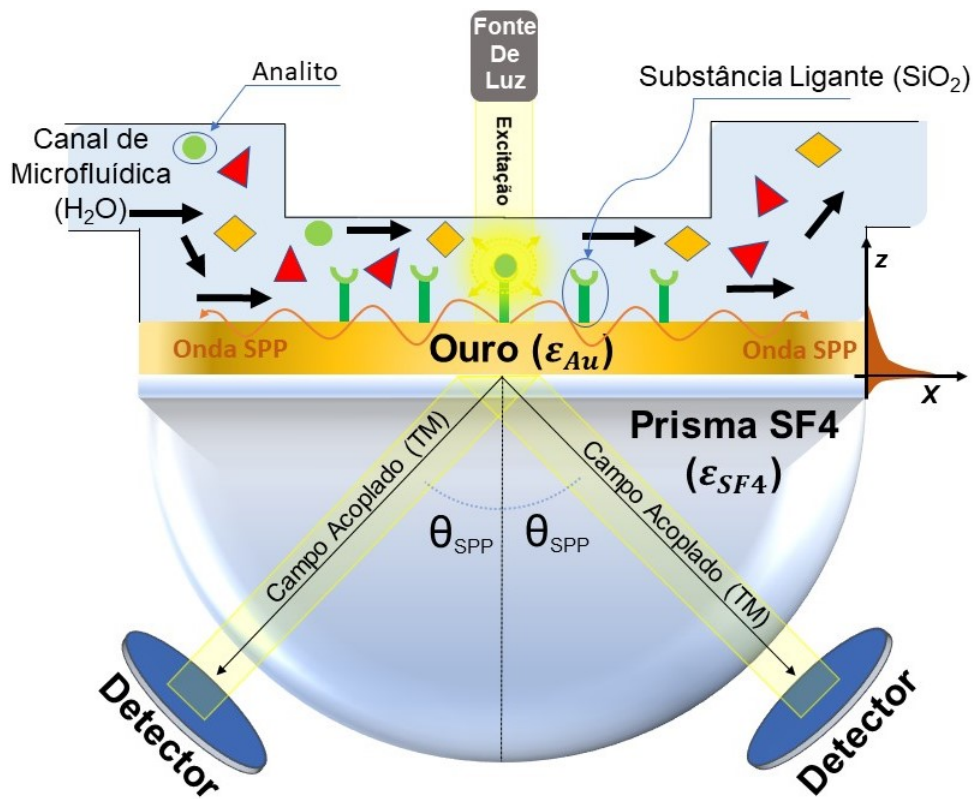


Figura 13 – Sensor SPR na configuração SPCE.

A fonte (*Laser*) de excitação é não polarizada, ao contrário da configuração Kretschmann, e a re-radiação óptica das partículas é também não polarizada, contudo após as interações da re-emissão das partículas e a excitação das ondas SPPs na interface meio-externo/Ouro parte desta onda de plasma se estende por entre o ouro até o prisma e neste se acopla em uma onda transversal magnética (TM) que surge em função da onda de plasma (SPP), ou seja, a luz que chega no detector é altamente polarizada no modo TM com ângulo  $\theta_{SPP}$  característico e depende do comprimento de onda de re-emissão das partículas ligadas ao sensor [13] [1]. A onda TM é explicada devido parte da emissão

óptica do emissor naturalmente ser composta por ondas neste modo [13]. Por isso, podemos entender que o sensor SPCE tem o processo de funcionamento reverso do sensor na configuração Kretschmann mas com resultados eletromagnéticos recíprocos entre os dois tipos de sensores.

### 3.1 Modelo Eletromagnético Equivalente do Sensor SPCE

As partículas excitadas comportam-se como radiadores ópticos em um comprimento de onda de ressonância específico associado a suas características físicas ou geométricas com dimensões menores que o comprimento de onda, por isso são comumente representadas por dipolos infinitesimais ou correntes elementares. Assim, o problema eletromagnético equivalente destes nanosensores plasmônicos pode ser representado por elementos radiadores excitados e situados em estruturas multicamadas (Figura 14), sendo que o processo de re-emissão de nanopartículas, inicialmente excitadas por uma fonte externa, é equivalente com a emissão de um dipolo/corrente elementar e do ponto de vista do eletromagnetismo uma nanopartícula pode ser descrito como um dipolo/linha de corrente radiando com comprimento de onda  $\lambda$  [13]. Nesse trabalho será adotado o comprimento de onda inicial de  $\lambda = 633nm$  ou variando no espectro de luz visível.

O sensor SPCE, para este trabalho é inicialmente simplificado em três camadas conforme a Figura 14: com uma linha de corrente localizado na camada de Ar a uma altura  $z = z'$  da camada fina de ouro, que por sua vez se localiza em cima de um prisma óptico SF4. Para validar o modelo criado e alguns resultados parciais, parâmetros como a permissividade dos materiais, frequência de emissão do dipolo e entre outros, foram fixados conforme as referências [12] [13] [14] [15]. Todas as camadas são não magnéticas ( $\mu_r = 1$ ) e a espessura da camada de ouro é  $d$ .

A equivalencia da fonte de corrente elementar será representado por uma fonte de corrente  $\bar{J}$  situado a uma altura  $z = z'$  ( $x = y = 0$ ), e considerando que a excitação induziu um dipolo vertical equivalente com  $\lambda = 633nm$ , tal que:

$$\mathbf{J} = \mathbf{J}_0 \delta(\mathbf{r}, \mathbf{r}_p) \quad (3.1)$$

linearmente relacionado ao campo elétrico total sobre a partícula por um fator de polarizabilidade  $\xi$  dado por:

$$\mathbf{J}_0 = \xi \mathbf{E}_{total} \quad (3.2)$$

$$\xi = \frac{6\pi\omega\epsilon_m}{k_m^3} \Gamma_1^e \quad (3.3)$$

Para determinar os momentos de dipolo induzido de um arranjo de  $N$  nanopartículas plasmônicas sobre um substrato multicamada, para cada nanopartícula deve ser feito

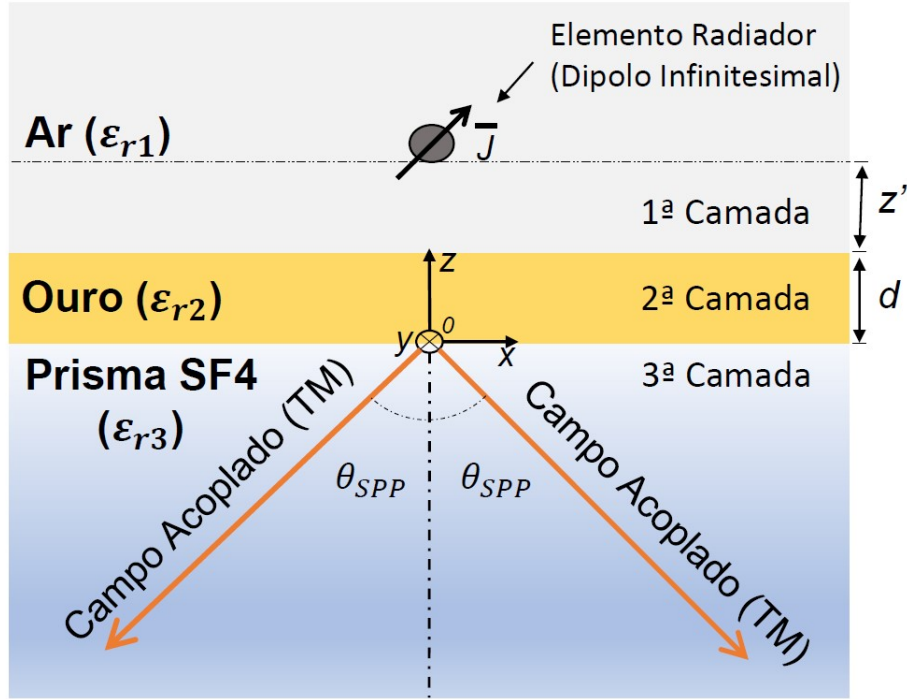


Figura 14 – Modelo eletromagnético equivalente do sensor SPCE com 3 camadas. A fonte de re-emissão (fonte de corrente) está localizada a uma altura  $z'$  da camada de ouro.

resolvendo o seguinte sistema de equações lineares, [Equação 3.1](#), [Equação 3.2](#) e [Equação 3.3](#) para  $p, q \in \{1, 2, \dots, N\}$  [\[13\]](#) [\[1\]](#), assim como também temos:

$$\mathbf{J} = \xi_p \left\{ \mathbf{E}^{ext.}(\mathbf{r}_p) + \mathbf{E}_{ref.}^{ext.}(\mathbf{r}_p) + \sum_{q=1, q \neq p}^N \mathbf{E}_{disp.}^q(\mathbf{r}_p) + \sum_{q=1}^N \mathbf{E}_{ref.}^q(\mathbf{r}_p) \right\} \delta(\mathbf{r}, \mathbf{r}_p) \quad (3.4)$$

Onde  $r_p$  representa a posição do dipolo  $\xi_p$  é a constante de polarização que depende do tipo de elemento considerado [\[13\]](#).

O campo elétrico total na [Equação 3.4](#) apresenta quatro termos. O primeiro representa a excitação externa (por exemplo o laser), o segundo é relativo a reflexão total que ocorre na estrutura do sensor (Ouro/Prisma) devido a excitação externa, o terceiro representa a interação individual de campo elétrico relativo a cada partícula (analito), ou seja, representa o campo elétrico re-irradiado por cada partícula que é somado através do princípio da superposição indicado pelo somatório e o quarto termo representa a reflexão total na estrutura do sensor (Ouro/Prisma) devido o campo elétrico re-irradiado por cada nanopartícula [\[13\]](#).

Em um sensor prático, como da [Figura 13](#) considera-se que o ouro seja depositado sobre uma lâmina de vidro óptico com as mesmas propriedades elétricas do prisma, então esta lâmina é acoplada opticamente ao prisma [\[13\]](#). No canal microfluídica da [Figura 13](#), os analitos estão suspensos e sobre a camada de ouro há a presença de uma substância ligante com afinidade para imobilizar nanopartículas específicas na superfície do sensor.

Por isso, a substância ligante também é utilizada como espaçador químico e separa as partículas da camada de ouro [1]. Para simular esse fato, é adicionado uma camada de dielétrico espaçador ( $\text{SiO}_2$ ) em cima da camada de ouro, que pode ser entendido como a substância que irá ligar os analitos ao sensor. A Figura 15 mostra o modelo simplificado do sensor para 4 camadas, onde as propriedades elétricas do ouro, ar e prisma são as mesmas da análise anterior e considerando a mesma equivalência de um dipolo vertical com uma fonte de corrente  $\bar{J}$  com comprimento de onda  $\lambda = 633\text{nm}$  à uma altura  $z = z'$  da camada de Ouro. Vale ressaltar que no estudo considerando a presença dessa camada dielétrica, a curva de ressonância sofre alterações em relação ao caso sem a camada.

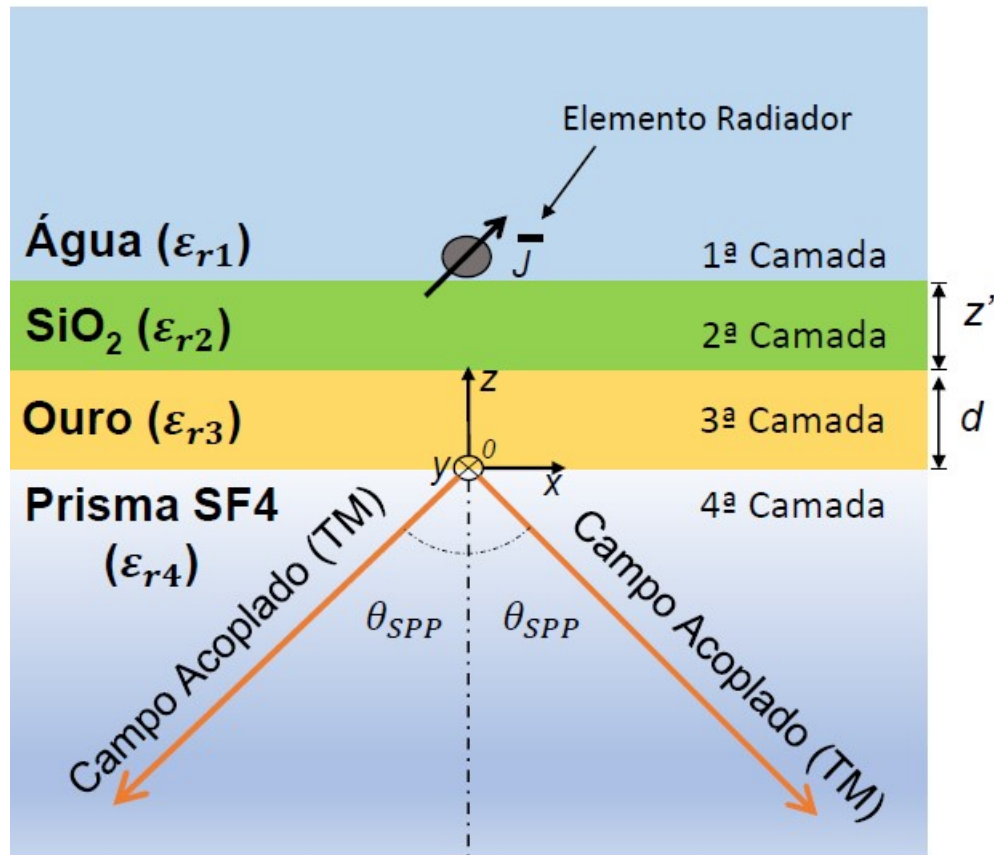


Figura 15 – Modelo eletromagnético equivalente do senso SPCE com 4 camadas. A camada de  $\text{SiO}_2$  corresponde a substância ligante.

## 4 Modelagem Numérica do Sensor SPCE em 2D

Calcular o comportamento de um problema físico complexo de forma analítica pode ser inviável para uma diversidade de ocasiões que não possuem homogeneidade ou linearidade em sua modelagem [12]. Para realizar as simulações e observar o comportamento das respostas do sensor SPCE proposto, foi necessário a utilização de cálculos matemáticos computacionais devido a complexidade dos problemas, isso torna mais rápido o desenvolvimento de melhorias e variações nos modelos que tem solução complexa. A modelagem do sensor SPR na configuração SPCE das geometrias das Figura 14 e Figura 15, foi realizada usando o *software* COMSOL Multiphysics®, que utiliza em seus cálculos o método numérico dos elementos finitos (FEM) para resolver e analisar seus resultados, como a resposta do sensor em um ambiente de simulação 2D, os campos próximos e distantes de elementos radiadores infinitesimais em estruturas multicamadas 2D. Vários outros trabalhos foram realizados com o uso do *software* [1] [12] [21] [30] aplicado a solução de sensores SPR, onde mostraram excelentes resultados tornando viável o uso do mesmo nesse trabalho.

### 4.1 Método dos Elementos Finitos

O Método dos elementos Finitos (*Finite Element Method* - FEM) foi proposto por Courant [31] em 1943 aplicado a problemas de análise estrutural, sendo que o método não era aplicado a problemas eletromagnéticos (EM) até 1968, desde então o método se estendeu para solução de problemas de guia de ondas, máquinas elétricas, dispositivos semicondutores, absorção de radiação EM por corpos biológicos, Plasmônica e etc [9]. Sua análise pode ser feita para problemas estáticos, no domínio do tempo ou da frequência [12], e com os avanços computacionais, o FEM passou a ser aplicado em diversos campos da engenharia como em transferência de calor, mecânica dos fluidos, eletromagnetismo e entre outros [30].

Embora outros métodos numéricos, como método das diferenças finitas (FDM) e o método dos momentos (MoM), sejam conceitualmente mais simples e fáceis de programar do que o FEM, o FEM é uma técnica numérica mais poderosa e versátil para lidar com problemas envolvendo geometrias complexas e meios não homogêneos [9], fazendo programas computacionais para uma grande quantidade de problemas. A análise de elementos finitos de qualquer problema envolve basicamente quatro etapas [9],

1. Discretizar a região da solução em um número finito de sub-regiões ou elementos

não sobrepostos,

2. Derivar equações governantes para um elemento típico
3. Montagem de todos os elementos na região da solução,
4. Resolução do sistema de equações obtido.

A discretização de uma geometria consiste na divisão da região de solução em subdomínios menores, chamados de elementos finitos, e os pontos comuns entre os elementos são denominados de nó ou pontos nodais, os quais são descritos por equações diferenciais e resolvidos por modelos matemáticos em cada nó formado pela malha resultante [9] [30] que é ilustrada na Figura 16. A discretização de uma região transforma um problema (Figura 16(b)) em vários outros mais simples e equivale as etapas 1 e 2 do FEM. Após isso é montado uma solução geral para todos os elementos na região e solucionado os sistemas de equações obtidos, etapas 3 e 4 do FEM.

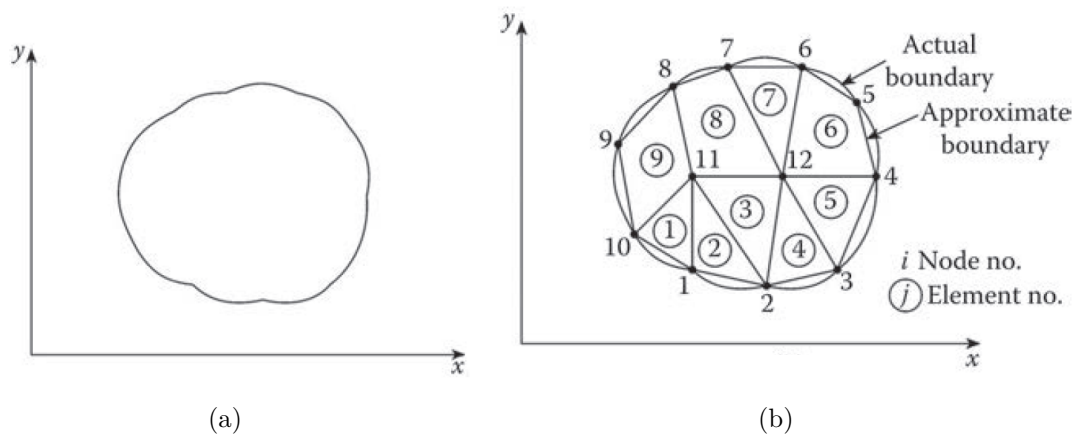


Figura 16 – Ilustração da aplicação da discretização de uma geometria 2D, (a) região de solução e (b) sua discretização por elementos finitos. Adaptado de [9]

A Figura 17 mostra alguns elementos típicos para problemas uni, bidimensionais e tridimensionais [9]. A escolha do tipo de elemento, de acordo com a geometria do problema, tem grande influência nos resultados obtidos, além do número de elementos em que a geometria é discretizada.

O conjunto dos nós e dos elementos é chamado de malha de elementos, onde em FEM a malha é um ponto chave na obtenção de resultados próximo do real, ou seja, a precisão do método depende de quão fina é a malha utilizada, tal que quanto mais elementos, mais próximo do modelo contínuo, mas em contrapartida maior o recurso computacional exigido [32]. A Figura 18 mostra exemplos de estruturas discretizadas usando elementos triangulares para domínio 2D e usando elementos tetraédricos 3D, sendo esses os elementos comumente usados por causa de sua flexibilidade para modelar



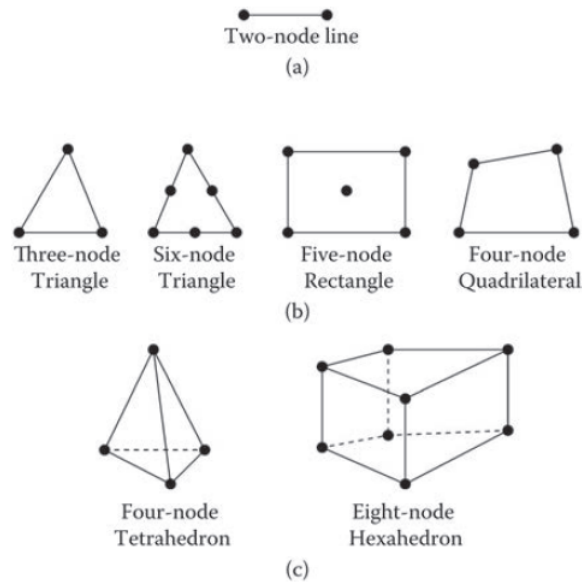


Figura 17 – Tipos de elementos finitos, (a) 1D, (b) 2D e (c) 3D. Adaptado de [9]

formas complexas [10]. Uma vantagem do FEM é que em domínios com formas complexas (contornos e aspectos irregulares) ao dividir em diversos subdomínios menores torna o processo de cálculo possível, o que seria muito difícil de ser analisado por inteiro [32].

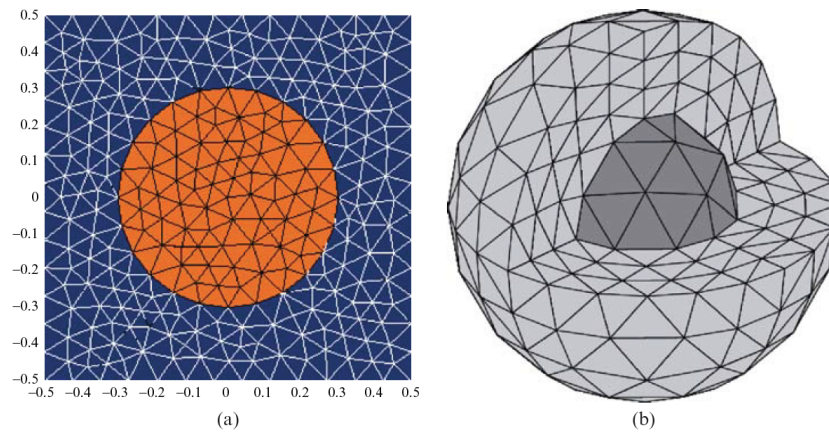


Figura 18 – Malha de elementos finitos com (a) elementos triangulares 2D e (b) elementos tetraédricos 3D. Adaptado de [10]

As malhas de discretização nos domínios da Figura 18 podem ser ainda mais refinadas, números de elementos muito maiores, e com isso os resultados serão mais precisos, o que aumentará o custo computacional. Um dos aspectos importantes do FEM diz respeito a sua convergência. Embora a utilização desse método seja com caráter aproximado, pode-se mostrar que, em uma malha consistente, à medida que a quantidade dos elementos tende ao infinito e, conseqüentemente, o tamanho dos elementos tende a zero, o resultado obtido se aproxima da solução real do sistema [32]. Todas as etapas de

análise e solução do FEM são descritas com detalhes em [9]-[10], onde o problema de discretização também é totalmente tratado.

## 4.2 COMSOL Multiphysics

Para solucionar e analisar o Sensor SPCE foi utilizado o *software* COMSOL Multiphysics 5.3a (Figura 19), que consiste em um *software* de simulação de uso geral, baseado em métodos numéricos avançados (como o FEM) para solução das equações diferenciais parciais dos fenômenos físicos estudados, com capacidades de modelagem multifísica e física única totalmente acopladas [11]. A interface gráfica (Figura 20) e a forma de utilização do *software* COMSOL Multiphysics é sempre a mesma, independentemente da aplicação de engenharia e fenômenos físicos, onde módulos complementares oferecem funcionalidades especializadas para eletromagnetismo, mecânica estrutural, acústica, mecânica dos fluidos, transferência de calor e engenharia química [11]. É possível definir dimensões de problemas em 0D; 1D e 1D assimétrico; 2D e 2D assimétrico e 3D além de uma lista de produtos LiveLink para uma interface direta com *software* CAD e outros de terceiros [11].



Figura 19 – Logotipo do *Software* COMSOL Multiphysics 5.3a. Direitos reservados a [11]

A interface da área de trabalho do COMSOL Multiphysics é mostrada na Figura 20, onde a mesma pode ser dividida em 5 janelas padrão de navegação, independentemente do tipo de aplicação, onde temos:

1. **A janela de criador de modelos (*Model Builder*):** Onde é a ferramenta em que você define o modelo e seus componentes, como, por exemplo, como resolvê-lo, a análise de resultados e criação de relatórios. É possível fazer isso criando uma estrutura de modelo. A estrutura de modelo reflete a estrutura de dados subjacente, o objeto do modelo, que armazena o estado do modelo incluindo as configurações para



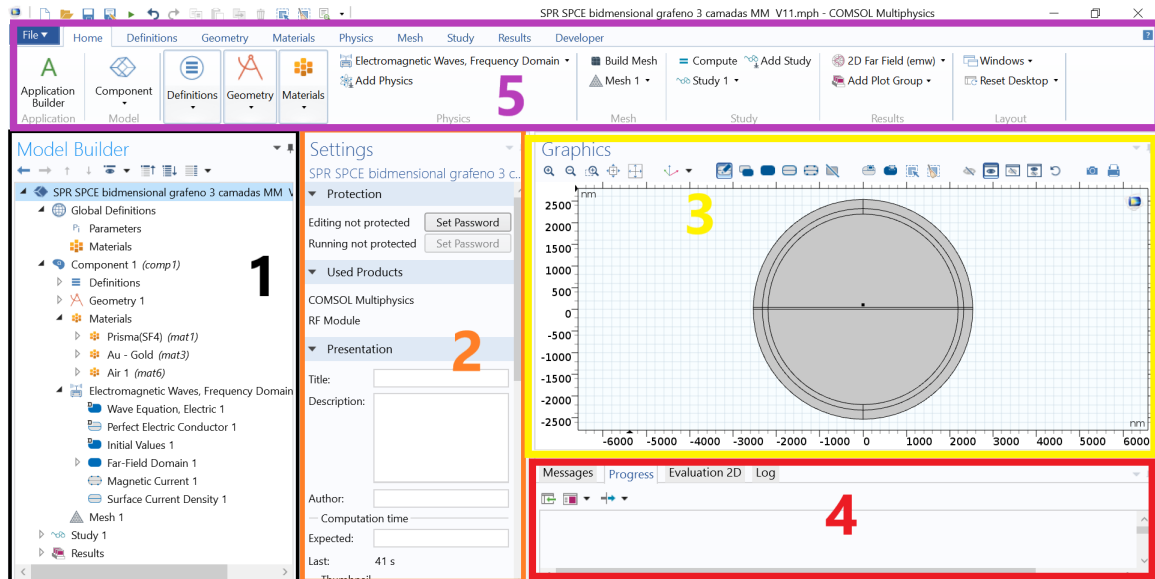


Figura 20 – Interface do *Software* COMSOL Multiphysics 5.3a. Direitos reservados a [11]

geometria, malha, física, condições limite, estudo, solucionadores, pós-processamento, e visualizações [11].

2. **A janela de configurações (*Settings*):** Esta é a janela principal para inserir todas as especificações do modelo, incluindo as dimensões de geometria, propriedade dos materiais, condições limite e condições iniciais, e qualquer outra informação que o solucionador irá precisar para continuar a simulação [11].
3. **A janela de Gráficos e diagramas (*Graphics*):** Essas são as janelas para o resultado gráfico. A janela de gráficos apresenta gráficos interativos para os nós de Geometria, Malha — As operações incluem girar, panorâmizar, aplicar zoom e selecionar. Um caso especial é a janela Diagrama de Convergência, uma janela Diagrama gerada automaticamente que mostra uma indicação gráfica da convergência do processo de solução enquanto um modelo é executado [11].
4. **Janelas de Informações :** As janelas de informações irão exibir informações vitais do modelo durante a simulação, tais como o tempo de solução, o andamento da solução, as estatísticas da malha, os registros do solucionador e, quando disponível, as tabelas de resultados [11].
5. **A janela faixa de opções:** A faixa de opções na parte superior da área de trabalho e fornece acesso aos comandos usados para concluir a maioria das tarefas de modelagem, as guias da faixa de opções têm botões e listas suspensas para controlar todas as etapas do processo de modelagem [11]. Um pouco acima dessa janela tem uma barra de acesso rápido como botões utilizados para abrir/salvar arquivos, desfazer/refazer, copiar/colar e excluir [11]. Há uma janela adicional em 5 que é a Ajuda Dinâmica que

fornece textos de ajuda contextuais sobre janelas e nós de estrutura de modelo. Se você apertar a janela Ajuda na sua área de trabalho, você irá obter ajuda dinâmica (em inglês somente) ao clicar em um nó ou em uma janela. A partir da janela Ajuda, você pode procurar por outros tópicos, tais como itens de menu [11].

A criação do modelo é feita usando a janela Criador de modelos, de forma linear, onde cria-se um modelo começando pela estrutura do modelo padrão, adicionando nós (sub-janelas) e editando as configurações dos nós. Todos os nós na estrutura do modelo padrão são nós pais de alto nível. Você pode clicar com o botão direito neles para ver uma lista de nós filhos ou sub-nós, que você pode adicionar abaixo deles. É desta forma que os nós são adicionados à estrutura. Quando você clicar em um nó filho, você irá ver as configurações de nó na janela Configurações. É aqui que você pode editar as configurações do nó [11]. Como já foi dito, em seção 3.1, o problema eletromagnético

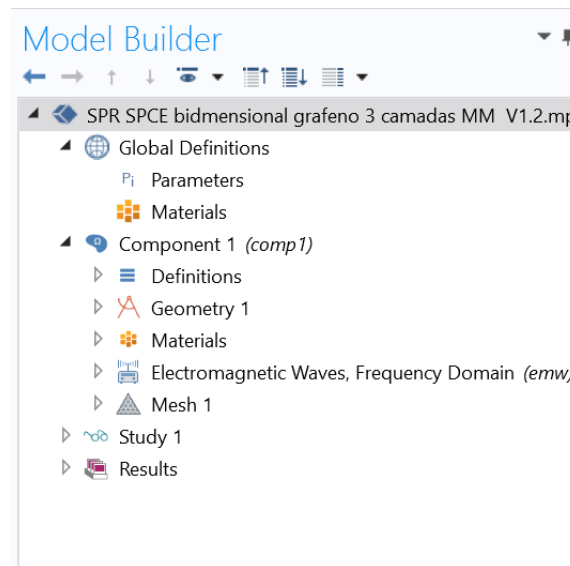


Figura 21 – Criador de modelo do COMSOL Multiphysics. Direitos reservados a [11].

equivalente destes nanosensores plasmônico pode ser representado por elementos radiadores excitados e situados em estruturas multicamadas, sendo que o processo de re-emissão de nanopartículas, inicialmente excitadas por uma fonte externa, é equivalente com a emissão de um dipolo ou correntes elementares com comprimento de onda  $\lambda$ .

#### 4.2.1 Definições Globais

Inicialmente define-se os parâmetros usados na modelagem do sensor, isso é feita em parâmetros das Definições Globais (*Global Definitions*), onde são definidos os parâmetros globais de modelagem do sistema, os quais são utilizados nas configurações ao longo da modelagem, como comprimento de onda, permissividade de um material ou dimensões geométricas. É recomendável definir as unidades corretamente, caso contrário o programa

pode identificar erros ou a solução não convergir. A [Tabela 1](#) mostra os parâmetros definidos para as simulações do sensor SPCE com 3 camadas e 4 camadas. Além disso, é possível definir variáveis que estarão em função de outros parâmetros.

Tabela 1 – Parâmetros utilizados na modelagem do sensor com 3 e 4 camadas no COMSOL Multiphysics.

| Nome     | Expressão       | Valor         | Descrição                             |
|----------|-----------------|---------------|---------------------------------------|
| lam      | 632.8[nm]       | 6.328E-7 m    | Comprimento de onda*                  |
| freq     | c_const/lam     | 4.7361E14 1/s | Frequência                            |
| pml      | lam/3           | 2.11E-7 m     | Espessura da camada PML               |
| ff       | lam/2           | 3.164E-7 m    | Espessura da camada <i>Far Field</i>  |
| r_esf    | 4*lam           | 2.532E-6 m    | raio da esfera da geometria do modelo |
| z'       | 20[nm]          | 20E-8 m       | Altura do dipolo/corrente magnética*  |
| er_pr    | 3.0615          | 3.0615        | Permissividade do prisma*             |
| er_Au    | -11.672-i*1.352 | -11.91-1.51j  | Permissividade do ouro*               |
| l_Au     | 50[nm]          | 5E-8 m        | Espessura da camada de ouro*          |
| er_SiO2  | 2.15            | 2.15          | Permissividade do $SiO_2$ *           |
| esp_SiO2 | 29.2[nm]        | 2.912E-8 m    | Espessura da Camada de $SiO_2$ *      |

Fonte: Produzido pelo autor.\*Valores inicialmente estabelecidos, podendo mudar de acordo com a comparação feita pelas referências.

#### 4.2.2 Componentes (*Component*)

O componente é uma parte fundamental do modelo e contém a geometria do problema estudado junto com sua interface física associada, malha e variáveis outras definições que são essenciais para a solução correta da modelagem. Aqui é definido como o problema estudado será modelado dentro do programa e é dividido em: Definições para o modelo, Geometria, matérias dos meios, a física aplicada no problema e no final a malha de discretização. A seguir serão apresentados os 2 modelos criados para a solução do sensor com 3 e 4 camadas, respectivamente. Os modelos são criados no nó *component* do Criador de modelos (*Model Builder*).

### 4.3 Modelo 1 - Sensor SPR na configuração SPCE com 3 camadas 2D

O sensor SPCE deste trabalho é inicialmente simplificado em três camadas conforme a [Figura 14](#): com o elemento radiador, modelado por um dipolo elétrico vertical (VED) como *Electric Point Dipolo* no *Software*, localizado na camada de Ar com uma altura inicial  $z' = 20nm$  (no plano  $xz$ ) da camada fina de ouro ( com espessura  $l = 50nm$ ), que

por sua vez se localiza em cima de um prisma óptico SF4. Vale ressaltar que a re-emissão tem comprimento de onda  $\lambda = 632.8nm$ . O modelo usa *component* com simulação em 2D, e sua geometria com 3 camadas criada usando os parâmetros e as propriedades elétricas das camadas da [Tabela 1](#) é mostrada na [Figura 22](#).

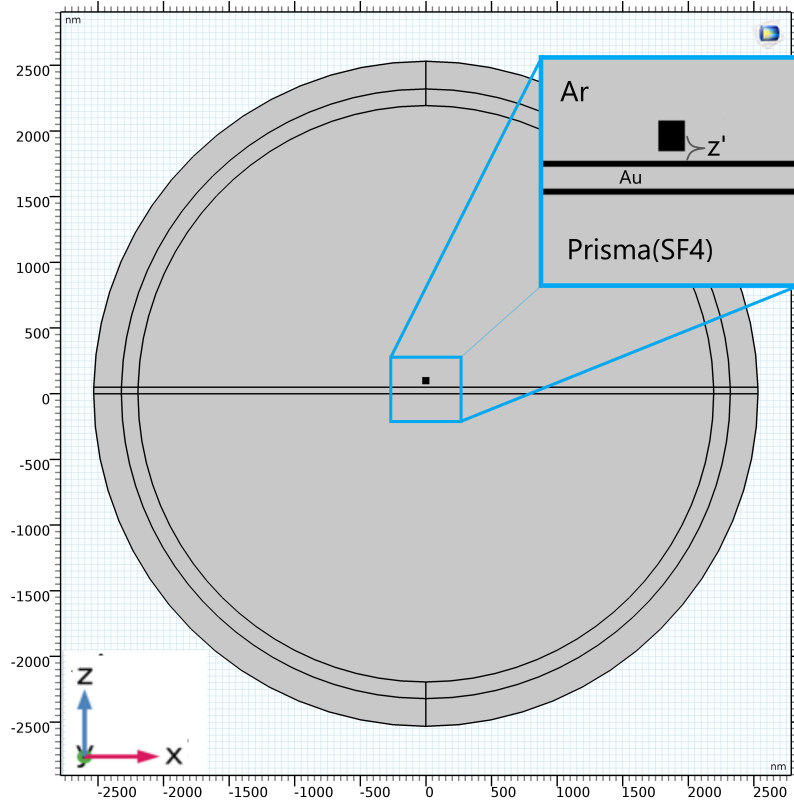


Figura 22 – Geometria do modelo do sensor com 3 camadas criado no COMSOL Multiphysics.

O domínio contínuo do sensor foi definido como uma geometria de uma esfera com raio  $a = 4 \cdot \lambda$  dividida em três camadas também esféricas, onde a camada mais externa foi definida como PML (*Perfectly Matched Layer*), e a segunda para fazer o cálculo padrão de campo distante (*Far field*), o núcleo da esfera é o domínio das físicas do sensor. A PML, [Figura 23](#), aplica uma escala de coordenada complexa a uma camada de domínios virtuais em torno da região física de interesse. Quando devidamente sintonizada, esta camada absorve toda a energia da onda de saída em problemas no domínio da frequência, sem qualquer incompatibilidade de impedância (causando reflexos espúrios) no limite [\[11\]](#). Sua função é absorver ondas incidentes sem produzir qualquer reflexão, de modo a simular uma fronteira aberta [\[32\]](#).

#### 4.3.1 Física aplicada ao Problema: Radio Frequência

A física aplicada no COMSOL multiphysics foi a de rádio frequência (*Radio Frequency- RF*) onde as interfaces de radiofrequência são usadas para calcular os campos

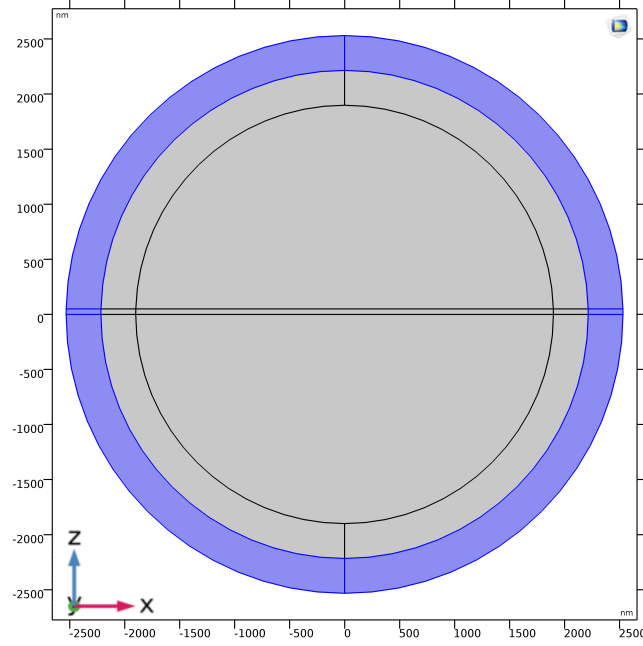


Figura 23 – Camada PML criada no modelo do sensor, destacada em azul.

elétricos e magnéticos em sistemas de alta frequência; ou seja, em sistemas onde o comprimento de onda é comparável ao tamanho do sistema. Essas interfaces físicas podem ser usadas para modelar campos eletromagnéticos transientes e harmônicos no tempo com formulações de vetor completo, onde o campo completo ou o campo espalhado é resolvido [11]. Os campos eletromagnéticos modelados para o sensor é o estudo de ondas eletromagnéticas no domínio da frequência (*Electromagnetic Waves, Frequency Domain*), onde é usada para resolver distribuições de campo eletromagnético de tempo harmônico. O estudo no Domínio da frequência é usado para simulações dirigidas por fontes com uma única frequência ou sequência de frequências [11], resolvendo a equação de onda no domínio do tempo harmônico, Equação 4.1 pré-definida no COMSOL, para o campo elétrico [11].

$$\nabla \times \mu^{-1}(\nabla \times \mathbf{E}) - k_0^2 \left( \varepsilon_r - \frac{j\sigma}{\omega\varepsilon_0} \right) \mathbf{E} = 0 \quad (4.1)$$

No modo RF são definidas algumas ferramentas importantes para o problema a ser resolvido, condições de contorno, tipo de fonte de excitação e valores iniciais utilizados. Vale demonstrar as ferramentas usadas na modelagem do sensor. Algumas ferramentas são aplicadas de modo padrão no modelo, exemplo: *Wave Equation, Electric* - onde é o recurso principal para esta interface física. A equação governante pode ser escrita na forma Equação 4.1 para os problemas de tempo harmônico; *Initial Values* - adiciona um valor inicial para o campo elétrico que pode servir como uma estimativa inicial para um solucionador não linear. A Figura 24 mostra a física RF aplicada para a solução eletromagnética do sensor.

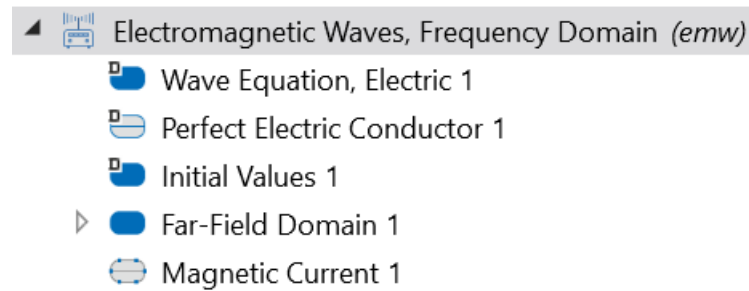


Figura 24 – Física RF aplicada na solução do comportamento do sensor.

#### 4.3.1.1 Condutor Elétrico Perfeito (*Perfect Electric Conductor*)

A condição de limite do condutor elétrico perfeito é um caso especial da condição de contorno do campo elétrico que define o componente tangencial do campo elétrico para zero, dessa forma se tem um material com condutividade infinita. É usado para modelar uma superfície metálica sem perdas (por exemplo, um plano de solo) ou como uma condição de contorno do tipo simetria, ou seja, metais com uma ótima condutividade, resultando em uma simulação bem mais rápida [32] [11]. Essa condição é previamente aplicada no contorno da região de cálculo para que ela seja delimitada na solução da equação de onda, evitando o cálculo a propagação infinita [12], conforme a Figura 25.

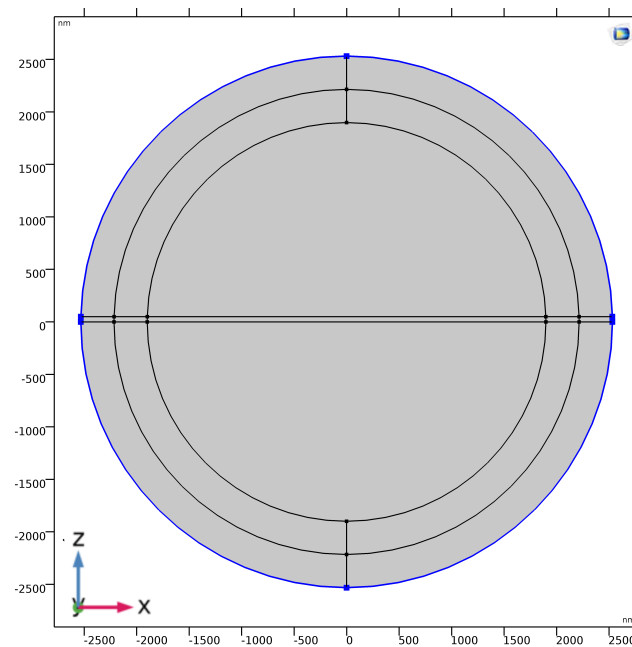


Figura 25 – Condição de contorno de um condutor elétrico perfeito aplicado no sensor.

#### 4.3.1.2 Domínio *Far-Field*

No sensor SPR é extremamente importante o comportamento do campo radiado, através do seu ângulo no prisma, para o monitoramento dos analitos, por isso os diagramas

de campos distantes devem ser estudados. Para configurar um cálculo de campo distante é adicionada uma ferramenta de *Far-Field Domain* e especificado os domínios de campo distante no sensor, conforme a [Figura 26](#).

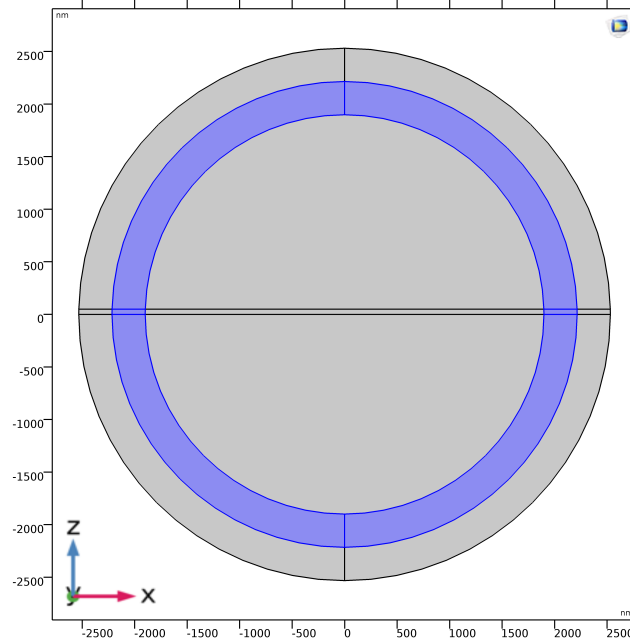


Figura 26 – Domínios para o cálculo do campo distante do sensor.

#### 4.3.1.3 Ponto de Dipolo Elétrico (*Electric Point Dipole*)

Essa Ferramenta adiciona na geometria um ponto de dipolo elétrico (elemento infinitesimal de corrente) em modelos 3D e 2D, sendo que, isso representa o caso limite de quando o comprimento  $d$  de um filamento de corrente elétrica carregando corrente uniforme  $I$  se aproxima de zero, enquanto mantém o produto entre  $I$  e  $d$ . O momento de dipolo é uma entidade vetorial com direção positiva definida pelo fluxo de corrente [\[11\]](#). Definiu-se uma especificação do VED com magnitude da corrente elétrica de  $p = 1 \text{ A} \cdot \text{m}$  com direção de momento  $n_p$  vertical no eixo  $a_z$ . A [Figura 27](#) mostra o elemento filamento de corrente elétrica aplicada no ponto referente a localização de um analito para simular a sua re- emissão e a excitação das SPPs no sensor SPCE.

#### 4.3.2 Discretização da Malha

As configurações de malha determinam a resolução da malha de elemento finito usada para discretizar o modelo. O método do elemento finito divide o modelo em elementos pequenos de formas geometricamente simples, em cada elemento finito um conjunto de funções polinomiais é usado para aproximar o campo eletromagnético e determina a resposta do sensor. É possível controlar o número, o tamanho e a distribuição dos elementos usando as configurações manuais de Tamanho e Distribuição [\[11\]](#). Ponto crucial na simulação física

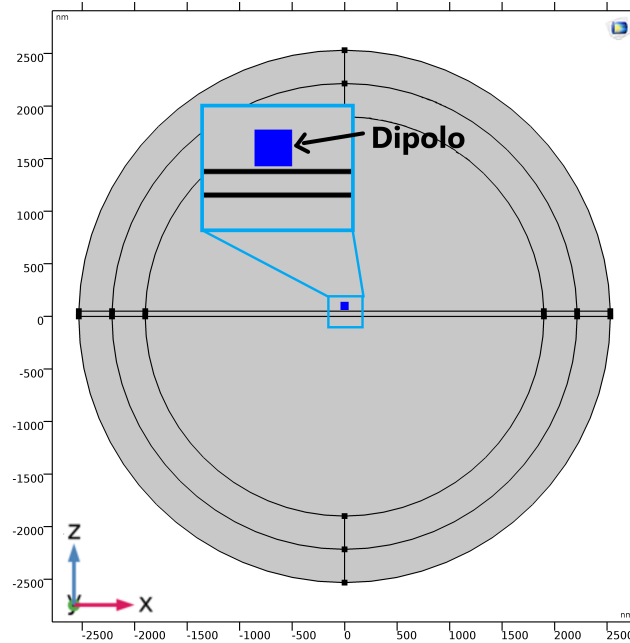


Figura 27 – Filamento de corrente elétrica aplicada em um ponto, simulando a re-emissão dos analitos sobre o sensor SPCE.

em métodos numéricos é a malha de discretização, pois ela define a precisão do resultado e a carga computacional exigida [12]. Refinar o tamanho da malha para melhorar a precisão computacional sempre envolve algum sacrifício na velocidade e, normalmente, exige um uso maior de memória [11].

Para uma solução mais precisa do sensor, foi escolhido uma malha do tipo malha controlada pela física (*physics-controlled mesh*), onde a malha pode ser gerada automaticamente, onde é levado em conta predefinições das características físicas e geométrica do modelo [12]. Foi escolhido uma malha com tamanho dos elementos extremamente finos (*extremely fine*). Em *Electromagnetic Waves, Frequency Domain* a malha controlada pela física dimensiona automaticamente o tamanho máximo do elemento da malha conforme o comprimento de onda muda em diferentes regiões dielétricas e magnéticas [11]. Ao escolher essa opção tem-se 4 opções para o parâmetro de controle (Tamanho máximo do elemento de malha). Do estudo (o padrão), definido pelo usuário, frequência ou comprimento de onda. Para qualquer um, é recomendável aplicar tamanho máximo do elemento de malha no espaço livre sendo  $1/5$  do comprimento de onda do vácuo para a frequência inserida, para o modelo o tamanho máximo foi de  $\lambda/15$ . O tamanho máximo do elemento de malha em meios dielétricos é aquele no espaço livre dividido pela raiz quadrada do produto da permissividade e permeabilidade relativas [11]. A discretização final do modelo é mostrado na **Figura 28** abaixo.

Para as malhas padrão controladas pela física, o *software* configura as sequências de malha automaticamente. A discretização para os domínios de *Far Field* e da física do sensor (prisma/ouro/Ar), foi feita com elemento do tipo *Free triangular* com refinamento



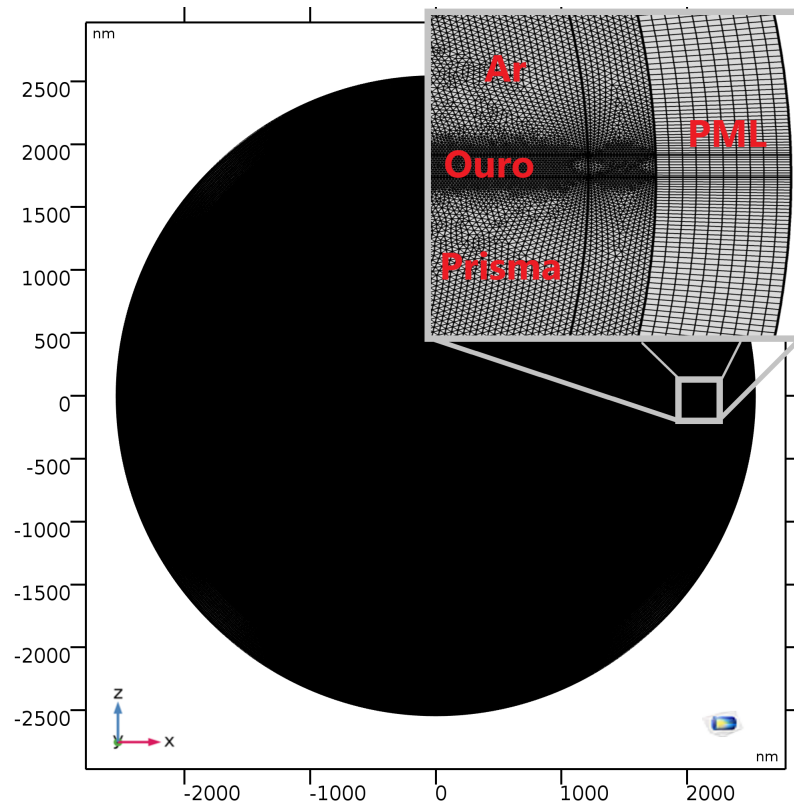


Figura 28 – Malha de Discretização do modelo do sensor SPCE feita no COMSOL Multiphysics®.

extremamente fino, já a discretização da camada PML foi definida uma malha quadrilateral 2D do tipo *Mapped* com distribuição com 10 camadas distribuídas com os elementos da malha ao longo da aresta de fronteira da camada de ouro. A malha completa consiste em 399580 elementos de domínio e 5670 elementos de limite.

#### 4.3.3 Estudo (*Study*) do modelo

A ferramenta *Study* contém todos os nós que definem como resolver o modelo, para o sensor modelado a etapa (*Step*) de estudo é de acordo com a física aplicada, ou seja, no *Frequency Domain*, [Figura 29](#). Também é usado a ferramenta *Parametric Sweep* para encontrar a solução em uma sequência de problemas quando se varia alguns parâmetros de interesse [\[11\]](#).

A simulação foi feita em um Notebook com memória RAM de 8GB com processador Intel(R) Core(TM) i7-7500U CPU @2.70GHz~2.90GHz, onde o tempo de computação foi entre 2 min à 8 min. Vale ressaltar que um dos benefício de modelagem em 2D é o baixíssimo custo computacional e tempo de computação muito reduzido em comparação com a modelagem em 3D. Todos os resultados serão analisados no [Capítulo 5](#).

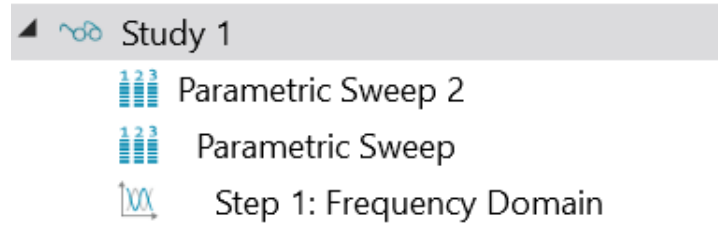


Figura 29 – Janela de estudo usado nas simulações.

#### 4.4 Modelo 2 - Sensor SPR na configuração SPCE com 4 camadas 2D

A modelagem do sensor com 4 camadas segue os mesmos passos dos modelos com 3 camadas, sendo que a adição de uma camada equivale ao dielétrico espaçador do sensor ( $SiO_2$ ), que pode ser entendido como a substância que irá ligar os analitos ao sensor, equivalendo a um modelo próximo do real (Figura 13). A análise do modelo com quatro camadas é o foco principal desse trabalho, essa análise será feita afim de se obter concórdância entre os resultados do sensor na configuração SPCE com resultados experimentais já obtidos em trabalhos realizados de sensores SPR na configuração Kretschmann [15], para isso a camada onde estarão localizados as nanopartículas será substituída por uma camada de água ( $H_2O$ ). A camada de  $SiO_2$  foi adicionada em cima da camada de ouro, com uma espessura equivalente a altura do VED com  $z' = 29.12 \text{ nm}$ . O modelo de 4 camadas criado no COMSOL Multiphysics®, com os mesmo parâmetros da Tabela 1 é mostrado na Figura 30 abaixo:

Os parâmetros de propriedades elétricas dos materiais  $\varepsilon_r$ , assim como espessura das camadas  $l$  e o comprimento de onda de excitação  $\lambda$  foram retirados de [15], onde são valores de parâmetros ópticos obtidos usando o procedimento experimental descrito em uma plataforma de sensoramento de SPR na configuração Kretschmann. Devido a reciprocidade eletromagnética do sensor Kretschmann e SPCE, esses valores foram fixados afim comparar os resultados finais do sensor SPCE e validar o modelo criado no COMSOL. A Tabela 2 mostra esses valores.

Tabela 2 – Propriedade dos materiais usados na modelagem do sensor de 4 Camadas.

| $\lambda$ | SF4 ( $\varepsilon_r$ ) | Ouro ( $\varepsilon_r$ ) | $l$      | $SiO_2$ ( $\varepsilon_r$ ) | $l$       | $H_2O$ ( $\varepsilon_r$ ) |
|-----------|-------------------------|--------------------------|----------|-----------------------------|-----------|----------------------------|
| 633[nm]   | 3.06                    | $-11.91 + j \cdot 1.51$  | 49.8[nm] | 2.15                        | 29.12[nm] | 1.77                       |
| 783[nm]   | 3.02                    | $-23.48 + j \cdot 1.79$  | 49.8[nm] | 2.13                        | 29.12[nm] | 1.76                       |

Fonte: Adaptado de [15]

A discretização do sensor com 4 camadas segue as mesmas especificações do modelo

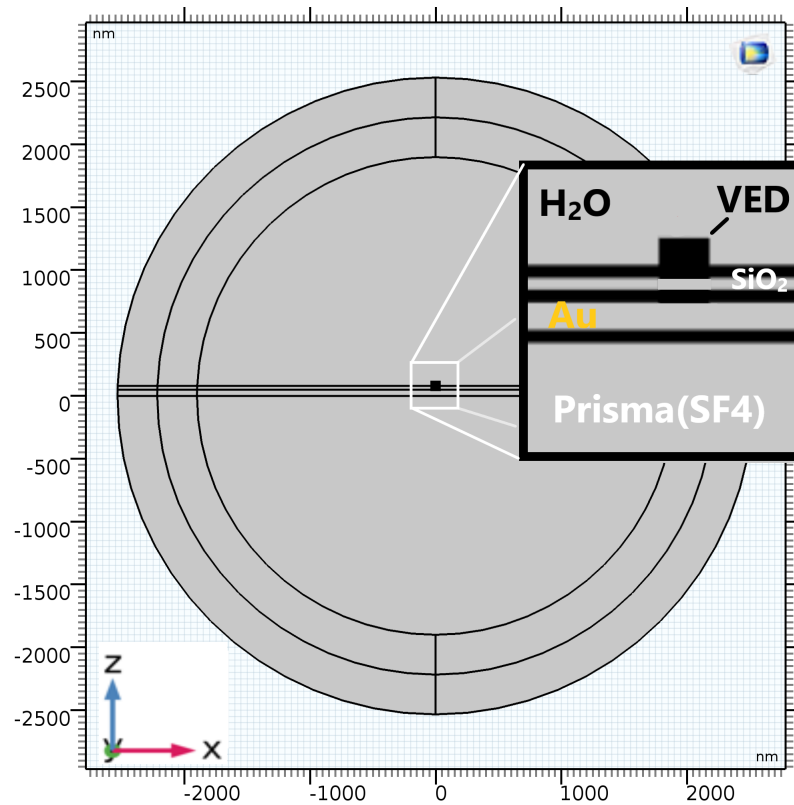


Figura 30 – Modelo do sensor com 4 camadas feito no COMSOL Multiphysics®.

com 3 camadas com malha do tipo malha controlada pela física ( *physics-controlled mesh*), com tamanho dos elementos extremamente fino (*extremely fine*). A malha completa consiste em 731164 elementos de domínio e 9177 elementos de limite. Nota-se que a malha de discretização no meio  $H_2O$  tem tamanhos de elementos de malha menores que em os mesmos domínios para o Ar no modelo de 3 camadas, pois em meios dielétricos o tamanho máximo é aquele no espaço livre ( $\lambda/15$ ) dividido pela raiz quadrada do produto da permissividade e permeabilidade relativas do meio. A simulação totalizou em média 3719856 de números de graus de liberdade resolvidos em um tempo de 2 min no *Study 1*. Todos os resultados serão discutidos no [Capítulo 5](#) a seguir.

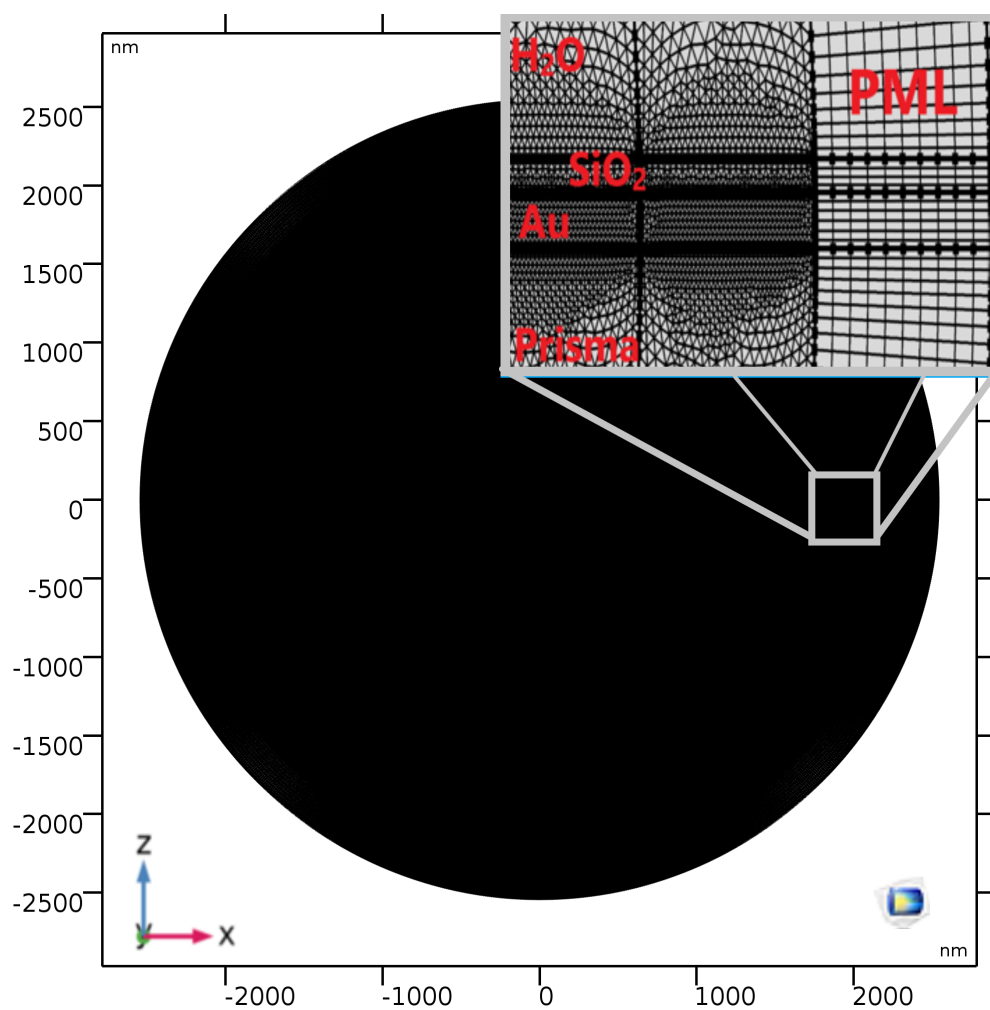


Figura 31 – Malha de discretização do Modelo do sensor com 4 camadas feito no COMSOL Multiphysics®.

## 5 Resultados e Discussões

Após a modelagem e solução numérica do sensor no *Study* os resultados são apresentados e armazenados na janela *Results* do COMSOL Multiphysics®, nesse capítulo serão apresentados todos os resultados para os tipos de modelo criado.

O objetivo foi analisar a resposta eletromagnética da estrutura multicamada para diferentes parâmetros como a posição (altura do dipolo) e frequência de radiação, para avaliar e validar o funcionamento do modelo e assim fazer a comparação com outras referências, monitorando principalmente os diagramas de campos distantes (*Far Field*) e campos próximos (campos totais  $H_y$  e  $E_z$ ) considerando também tipos de modos que são excitados no sensor em função das características das fontes dos elementos radiadores (comprimento de onda). Os modelos criados são todos em 2D, afim de tornar as simulações e obtenção de resultados mais práticos e mais rápidos, com pouco custo computacional. Os resultados obtidos foram comparados com resultados obtidos de outros trabalhos, como o método DCIM (Método das Imagens Complexas Discretas) [13], pelo método FEM usando o COMSOL Multiphysics® em 3D [12] e com resultados experimentais [15] usando o sensor na configuração Kretschmann, para fins de validação do modelo criado e seus resultados obtidos.

O problema eletromagnético equivalente destes nanosensores plasmônicos pode ser representado por elementos radiadores excitados e situados em estruturas multicamadas, sendo que o processo de re-emissão de nanopartículas, inicialmente excitadas por uma fonte externa, é equivalente com a emissão de um dipolo e do ponto de vista do eletromagnetismo uma nanopartícula pode ser descrito como um dipolo radiando com comprimento de onda  $\lambda$  [12] [13] [33]. O sensor SPCE para este trabalho é inicialmente simplificado em três camadas conforme a Figura 14 com um dipolo infinitesimal (VED), localizado na camada de Ar, em cima de uma camada fina de ouro, que por sua vez se localiza em cima de um prisma óptico SF4. Mais adiante o sensor é analisado para uma estrutura de 4 camadas, onde é incluída uma camada de  $SiO_2$  equivalente ao dielétrico espaçador do sensor e o meio externo considerado como água, conforme a Figura 15.

### 5.1 Análise e Validação do Sensor SPCE 2D com 3 Camadas

Para validar o modelo 2D criado e alguns resultados parciais, parâmetros como a permissividade dos materiais, comprimento de onda, e entre outros, foram fixados conforme a referência [12], com as seguintes propriedades elétricas de permissividades relativas da camada de Ar, ouro e prisma(SF4):  $\varepsilon_{r1} = 1$ ,  $\varepsilon_{r2} = -11.672 - j1.352$  e  $\varepsilon_{r2} = 3.0615$ , respectivamente. Todos os materiais são considerados não magnéticos

( $\mu_r = 1$ ). Com um VED localizado à uma altura  $z' = 20nm$  da camada de ouro (com espessura  $l = 50 nm$ ) operando com um comprimento de onda  $\lambda = 633 nm$ . A equivalência eletromagnética do sensor com 3 camadas (Figura 14), assim como seu modelo criado no COMSOL Multiphysics® (Figura 22) e sua discretização (Figura 28) foram apresentados no Capítulo 3 e Capítulo 4. O objetivo foi analisar a resposta eletromagnética do sensor com 3 camadas, monitorando principalmente os diagramas de campos distantes (*Far Field*) e as componentes de campo  $H_y$  ou  $E_z$  e comparado os resultados de  $\theta_{SPP}$  com [12]. A simulação teve um número de graus de liberdade de 2861749 resolvidos em um tempo de solução igual a 2 min. As Figura 32, Figura 33 e Figura 34 mostram os resultados obtidos da componente real  $E_z$  do campo elétrico, do modulo da fase de  $H_y$  e o diagrama de campo distante (*Far Field*) bidimensional obtidos no modelo 2D, comparados com os resultados obtidos em um modelo 3D da referência [12], respectivamente.

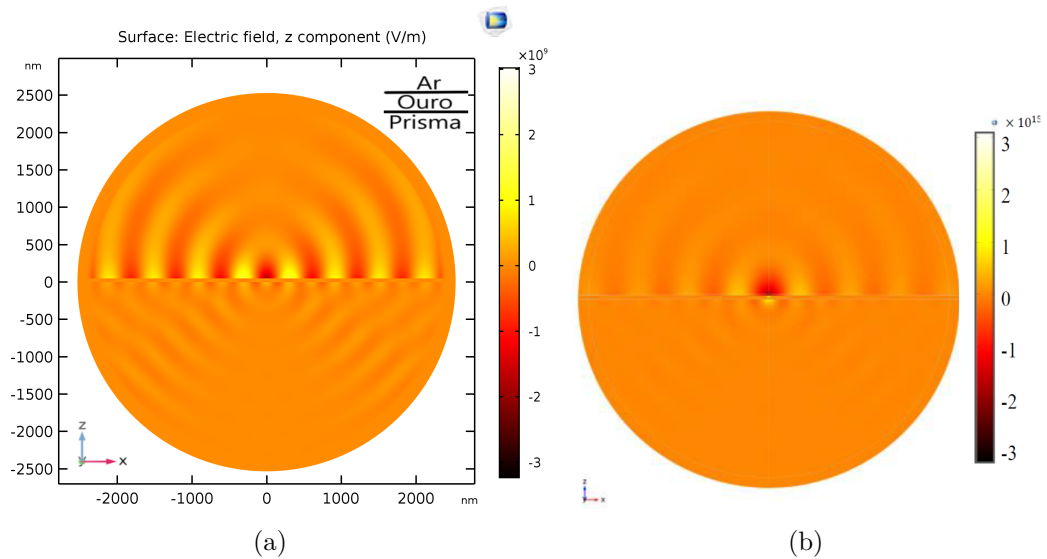


Figura 32 – Componente real  $E_z$  do campo elétrico para o sensor com 3 camadas obtido no COMSOL Multiphysics®: (a) Para o modelo 2D criado e (b) para o modelo 3D comparativo. Adaptado de [12].

É possível observar da Figura 32 a formação de plasma de superfície nas direções do eixo  $-x$  e  $+x$  acima da camada de ouro e que ondas planas Transversais Magnéticas (TM) surgem na camada do prisma. Sabe-se que os analitos avaliados irradiam luz não polarizada e apesar do emissor óptico/dipolo ser não polarizado, da Figura 33 nota-se que a luz que irá incidir no detector óptico será altamente polarizada no modo TM com um ângulo de acoplamento característicos dos radiadores presentes na primeira camada. Apesar da diferença nas intercedades dos campos obtidos em relação ao modelo 3D, no estudo de sensores SPR o resultado mais importante observado é a fase dos campos obtidos, que independente dos tipos de fonte de excitação usado e da dimensão do sensor (2D ou 3D), devem ser iguais. O ângulo das frentes de ondas planas, no modo TM, na camada do prisma é observado no gráfico de campo distante (*Far Field*). Esse ângulo fica em torno de

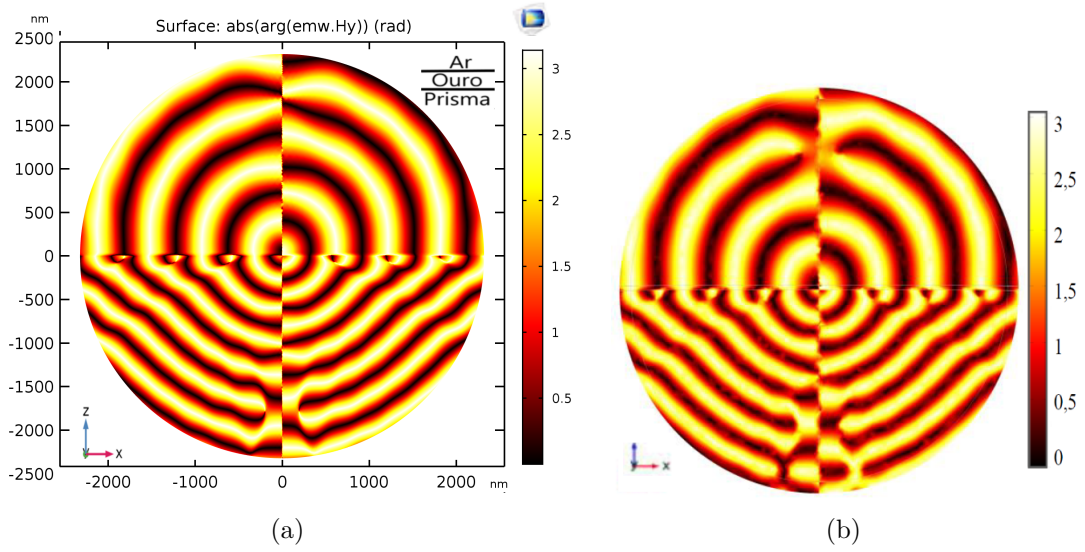


Figura 33 – Modulo da fase de  $H_y$  do campo magnético para o sensor com 3 camadas obtido no COMSOL Multiphysics®, (a) Para o modelo 2D criado, (b) Para o modelo 3D comparativo. Adaptado de [12].

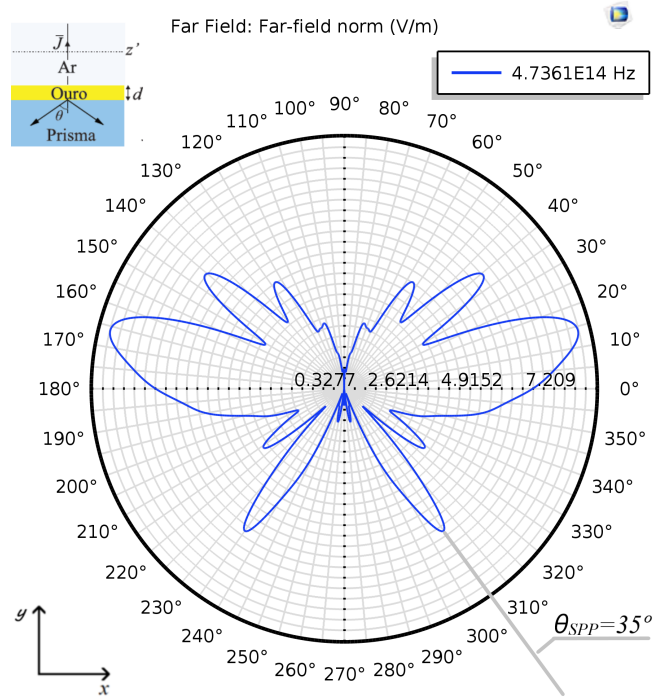


Figura 34 – Diagrama de *Far Field* bidimensional do sensor com 3 camadas obtido no COMSOL Multiphysics®.

$\theta_{SPP} \approx 35^\circ$ , como mostra a Figura 34, próximo da referência [12] com valor de ângulo de acoplamento  $\theta_{SPP} \approx 34.8^\circ$  obtido em um modelo 3D no COMSOL Multiphysics®. Ondas TM surgem na camada do prisma porque parte da emissão está no modo TM e excita uma onda SPP na superfície Ar/Ouro e a onda evanescente que ultrapassa a fina camada de ouro será irradiada no prisma com polarização no modo TM [13].



Os resultados obtidos foram bastante condizentes com os da referência [12] e mais importante ainda foi o baixo custo computacional do modelo 2D criado em relação ao modelo 3D usando em [12]. Os resultados obtidos em [12] além da alta necessidade de memória computacional (utiliza-se cerca de 28GB de RAM) também demandaram várias horas de processamento no COMSOL Multiphysics® (de 8 a 10 horas), sendo que no modelo 2D criado teve um tempo para solução de 2 min para uma malha extremamente fina controlada pela física.

Para a análise do modelo em função da altura  $z'$  da linha de corrente, foi usado o mesmo modelo da análise anterior, com os mesmos parâmetros, onde foi analisado os resultados para valores de  $z' = 20\text{ nm}$ ,  $50\text{ nm}$ ,  $100\text{ nm}$ ,  $150\text{ nm}$  e  $200\text{ nm}$ . Foi usado a opção *Parametric Sweep* do *Study* do COMSOL Multiphysics® para solucionar problemas com variação de parâmetros, onde a simulação durou 8 min e 19 s. A malha de discretização não pode ser muito refinada pois esse tipo de análise exige muito mais recurso computacional. A Figura 35 mostra os resultados de *Far Field* obtidos para o modelo 2D e a comparação com o resultado do modelo 3D da referência [12], obtendo-se ângulos de acoplamento bem próximos, observados pelos lóbulos inferiores na camada do prisma onde são direcionados em um ângulo de acoplamento  $\theta_{SPP}$  característicos das propriedades elétricas do sensor e dos analitos em sua superfície. Vale ressaltar que a identificação do ângulo no gráfico de *Far Field* é obtido de maneira visual e não é dado em uma escala mais precisa e exata.

A Figura 35(a) apresenta o diagrama de campo distante onde pode-se fazer uma análise da intensidade do campo distante para diferentes valores de  $z'$  e medir o ângulo de acoplamento  $\theta_{SPP}$  de acordo com a direção da linha de *Far Field* na região do prisma. Esses ângulos dão a direção de propagação da frente da onda plana (TM) no prisma, onde os ângulos para os modelos 2D e 3D é em torno de  $\theta_{SPP} \approx 35^\circ$ . Nota-se que a intensidade dos lóbulos inferiores e superiores, que dependem do acoplamento de campo no prisma e do campo total na camada de Ar respectivamente, diminuem com o aumento da altura da linha de corrente  $z'$ . Portanto, a onda SPP acopla-se cada vez melhor por campo próximo quando os elementos radiadores estiverem mais próximas do sensor SPCE e assim tornando-se mais fácil de identificar o ângulo de acoplamento  $\theta_{SPP}$  [12] [13].

Os resultados obtidos do modelo 2D criado em comparação com os do modelo 3D, apesar de terem uma perda nas intensidades nos campos eletromagnéticos obtidos e também no campo distante, tem uma boa concordância na análise do ângulo de acoplamento  $\theta_{SPP}$  o que é extremamente importante para caracterização dos analitos analisados no sensor plasmônico. Com isso, usou-se o modelo desenvolvido para simulações comparativas com resultados obtidos pelo método DCIM (*Método das Imagens Complexas Discreta*) criado pela referência [13]. Para isso, usou-se as mesmas propriedades elétricas de [13] para o sensor SPCE com três camadas, tal que as permissividades relativas do Ar, Ouro e do Prisma foram:  $\varepsilon_{r1} = 1$ ,  $\varepsilon_{r2} = -11.53 - j1.2$  e  $\varepsilon_{r3} = 2.3$ , respectivamente. O VED está



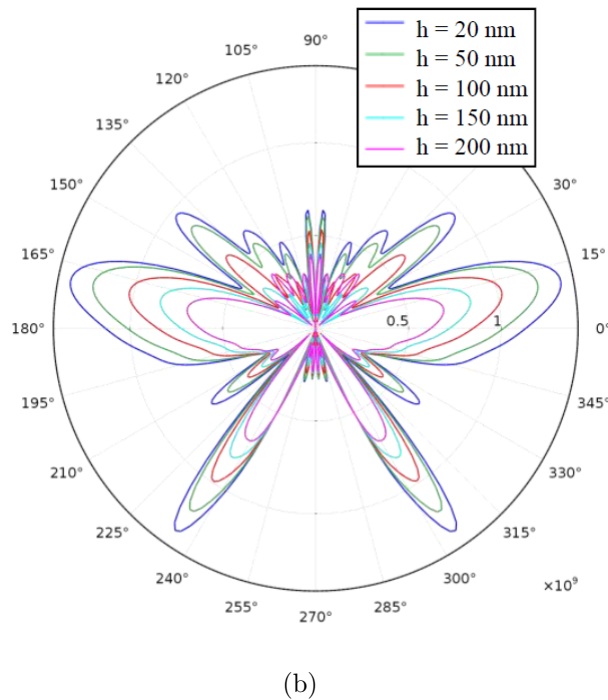
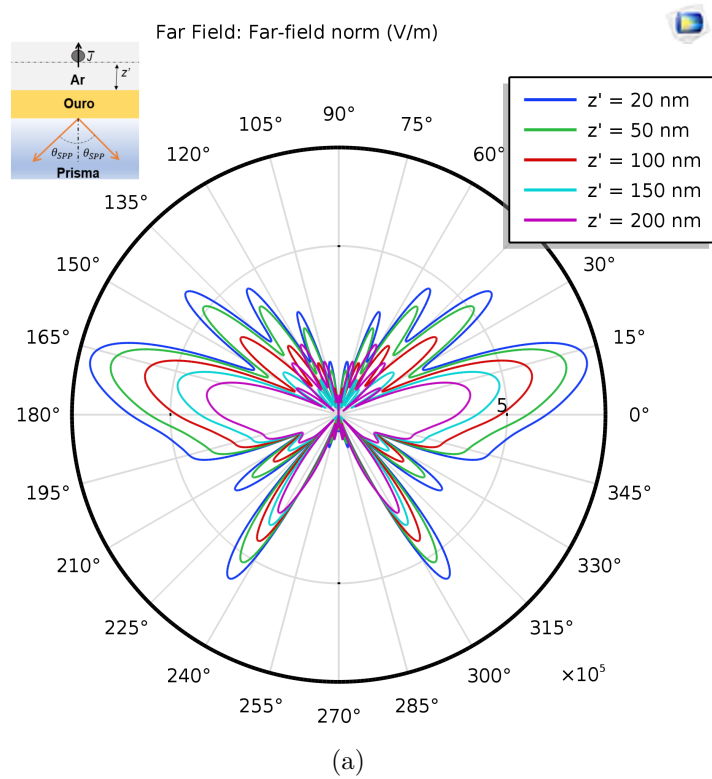


Figura 35 – Diagrama de campo distante bidimensional obtido no COMSOL Multiphysics®, para o sensor com 3 camadas variando a altura  $z'$ , (a) para o modelo 2D criado e (b) modelo 3D comparativo. adaptado de [12]

localizado à uma altura  $z' = 20 \text{ nm}$  da fina camada de Ouro com espessura de  $50 \text{ nm}$  e operando com um comprimento de onda  $\lambda = 633 \text{ nm}$ . As especificações de construção do modelo e da malha aplicada seguem os mesmos passos da comparação com o modelo 3D. A

simulação teve um número de graus de liberdade de 4551265 resolvidos em um tempo de solução igual a 2 min e 50 s.

A Figura 36(a) e Figura 36(b) mostram a parte real do campo elétrico  $E_z$  em dB obtido via DCIM e via um modelo 3D no COMSOL criados por Sousa [13]. A Figura 36(c) mostra o mesmo componente de campo em dB obtido pelo método numérico criado por K. A. Michalski [14]. Já a Figura 36(d) foi obtida pelo modelo 2D desse trabalho onde observa-se das figuras que o comportamento das ondas na camada do prisma se assemelha a ondas planas altamente direcionadas em um ângulo de acoplamento específico. Observa-se também que as distâncias entre as frentes de onda em todos os resultados são iguais, ou seja, mesmo comprimento de onda.

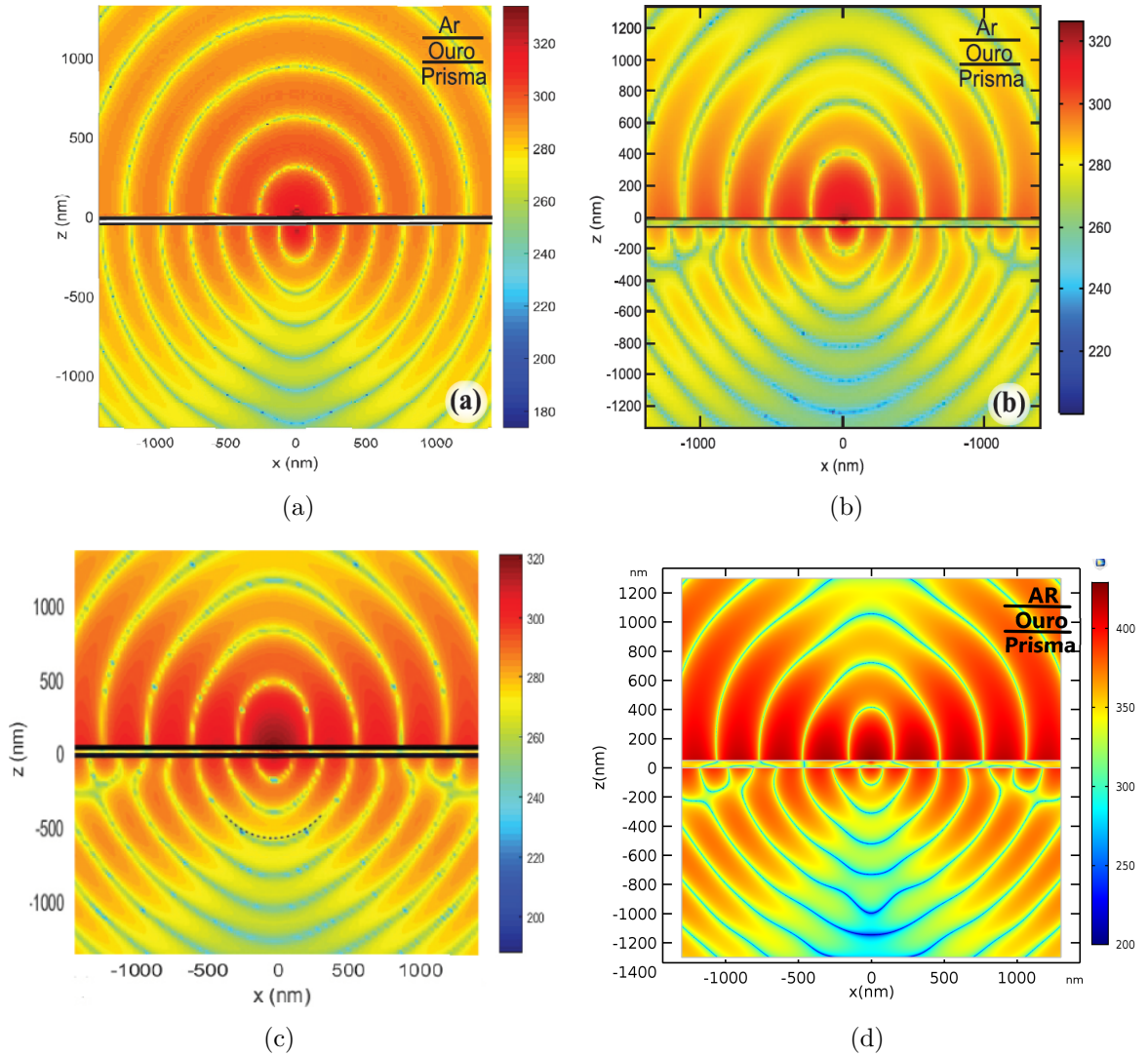


Figura 36 – Componente real  $E_z$  do campo elétrico em dB para o sensor com 3 camadas obtido via: (a) DCIM adaptado de [13], (b) para o modelo 3D COMSOL. Adaptado de [13], (c) método numérico de [14] e (d) modelo 2D criado no COMSOL.

A Figura 37(d) mostra a fase do campo elétrico  $E_z$  em radianos obtido pelo modelo

2D criado e comparado com resultados obtidos pelo método DCIM [13] (Figura 37.(a)), pelo método numérico feito em [14] (Figura 37.(b)) e pelo modelo 3D feito no COMSOL por [12] (Figura 37.(c)). Observa-se que os resultados obtidos são bem semelhantes em relação aos planos de fase, principalmente próximo a fonte de excitação. Os planos de fase do modelo 2D criado é mais próximo do modelo 3D, visto que o método de solução é igual e com o mesmo *Software*, mas com resolução de imagem bem mais refinada. O comportamento das ondas planas acopladas, no modo TM, que surgem na camada do prisma é bastante visível nas Figura 36 e Figura 37, onde a frente de onda na camada do prisma tem ângulo de acoplamento  $\theta_{SPP} \approx \pm 43.5^\circ$ .

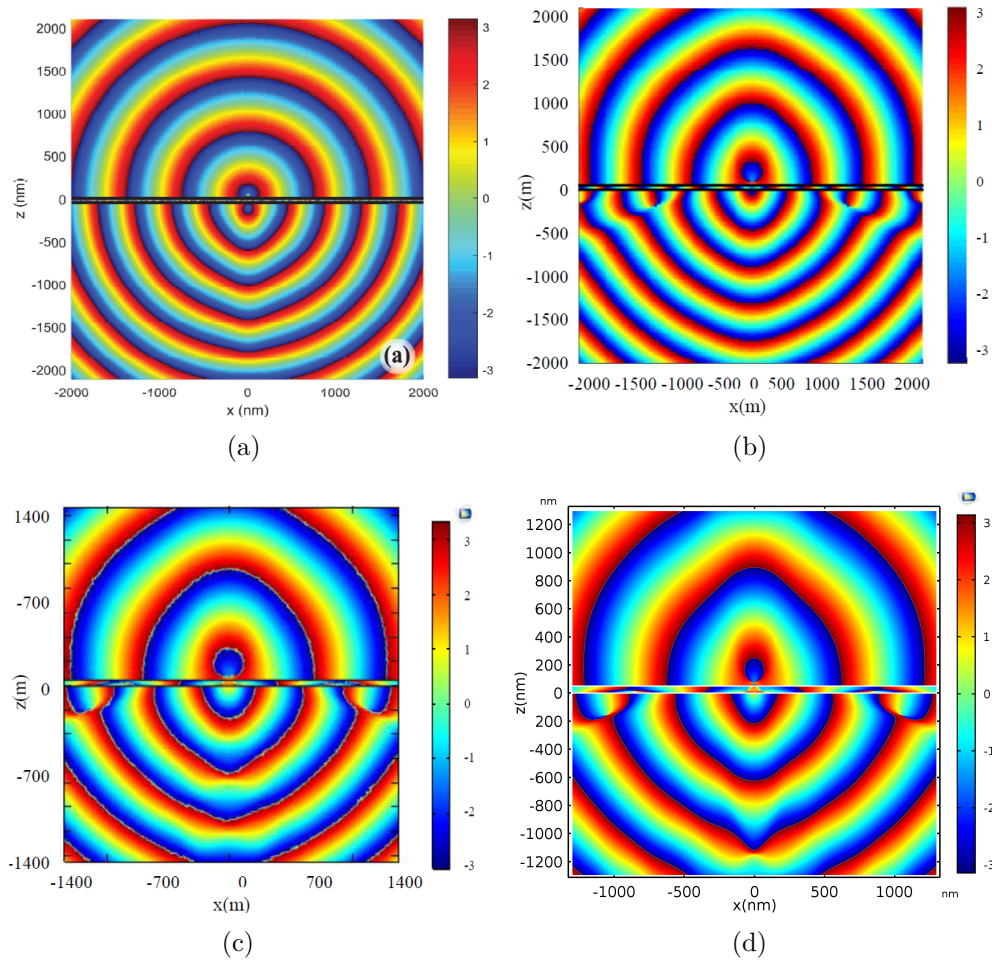


Figura 37 – Fase da componente  $E_z$  do campo elétrico em radianos para o sensor com 3 camadas obtido via: (a) DCIM adaptado de [13], (b) método numérico feito por [14], (c) obtido no COMSOL em um modelo 3D criado por [12] e (d) modelo 2D criado no COMSOL.

A Figura 38 mostra o diagrama de campo distante (*Far Field*) obtido para o modelo 2D criado em comparação com o resultado via DCIM feito por [13]. Observar-se que as intensidade das linhas de campo distante (lóbulos inferiores) na camada do prisma são altamente direcionadas em um ângulo de acoplamento característicos, sendo que para o modelo 2D via COMSOL é igual a  $\theta_{SPP} \approx \pm 43.5^\circ$  e para o método DCIM é  $\theta_{SPP} \approx \pm 43.7^\circ$ .

Os resultados obtidos em [Figura 32](#) a [Figura 38](#) mostram boa concordância e aproximação com os resultados das referências comparadas, principalmente na identificação do ângulo de acoplamento  $\theta_{SPP}$ , visto que a identificação do ângulo no gráfico de *Far Field* é obtido de maneira visual e não é dado em uma escala mais precisa e exata, sendo assim validando a metodologia e o formalismo do modelo 2D criado no COMSOL Multiphysics®. Com isso, o passo final desse trabalho será analisar o modelo com 4 camadas em relação a resultados experimentais para um sensor Kretschmann de 4 camadas.

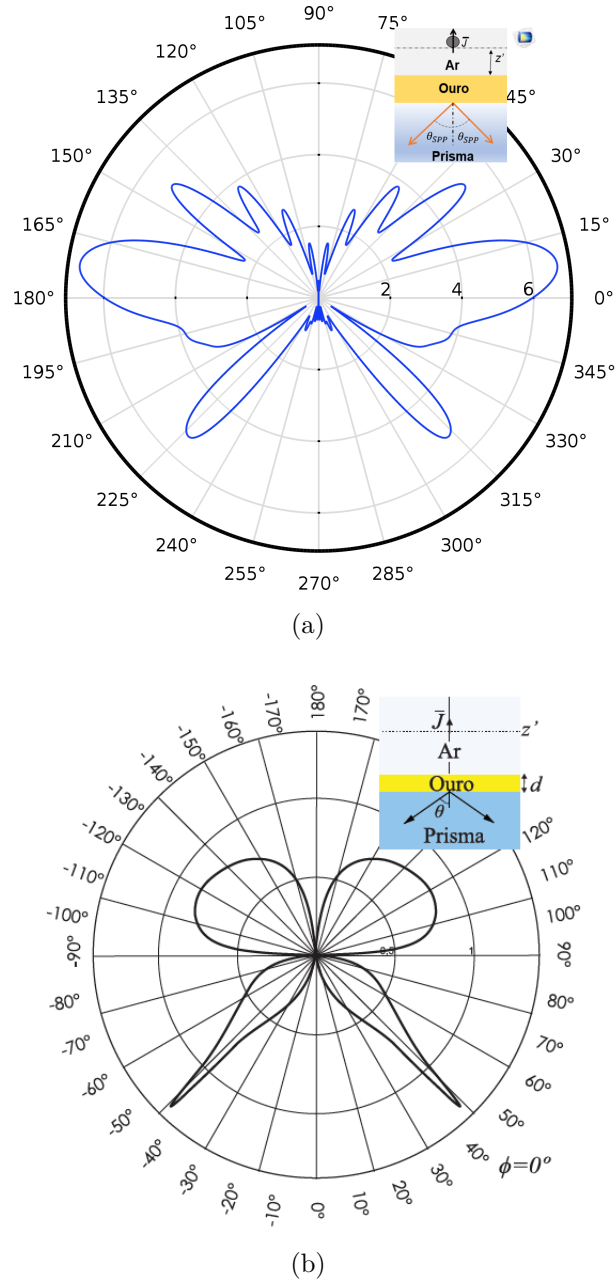


Figura 38 – Diagrama de campo distante (*Far Field*) para o sensor com 3 camadas obtido via: (a) modelo 2D criado com ângulo de acoplamento  $\theta_{SPP} \approx \pm 43.5^\circ$  e (b) DCIM adaptado de [\[13\]](#) com ângulos de acoplamentos quase idênticos para os dois métodos de solução,  $\theta_{SPP} \approx \pm 43.7^\circ$ .



## 5.2 Análise do Sensor SPCE 2D com 4 Camadas

A primeira análise do projeto foi a modelagem de uma estrutura com três camadas e para termos comparativos, os resultados obtidos foram bastante coerentes com as referências [12] [13]. A análise feita aqui é com o modelo de 4 camadas do sensor da Figura 13, sendo que a primeira camada onde estão localizadas as nanopartículas no canal microfluídica é composto de água ( $H_2O$ ) e a introdução da camada referente ao dielétrico espaçador ( $SiO_2$ ) no modelo totalizará as 4 camadas. O elemento espaçador (dielétrico espaçador), pode ser entendido como a substância que irá ligar os analitos ao sensor e essa análise será feita afim de se obter concordância entre os resultados do sensor na configuração SPCE com resultados experimentais [15] obtidos por trabalhos realizados em parceria de um sensor SPR na configuração Kretschmann. Parâmetros como a permissividade dos materiais  $\varepsilon_r$ , comprimento de onda  $\lambda$  de emissão do dipolo (VED), espessura das camadas  $l$  foram retiradas de [15], onde esses valores estão descritos na Tabela 2, tal que a altura  $z'$  do VED é dada pela espessura do dielétrico espaçador.

A equivalência eletromagnética do sensor com 4 camadas (Figura 15), o modelo criado no COMSOL Multiphysics® (Figura 30) e sua discretização (Figura 31) foram apresentados no Capítulo 3 e Capítulo 4. A simulação para os primeiros parâmetros da Tabela 2, onde  $\lambda = 633\text{ nm}$ , teve um número de grau de liberdade igual a 3719856 resolvidos em um tempo de solução igual a 1 min e 48 s. O objetivo foi analisar a resposta eletromagnética da estrutura multicamadas, monitorando principalmente os diagramas de campos distantes (*Far Field*) e comparando os resultados de  $\theta_{SPP}$  com os de [15]. As Figura 39 e Figura 40 mostram os resultados obtidos da componente  $E_z$  do campo elétrico com sua fase e o diagrama de campo distante (*Far Field*) em  $t = 0\text{ s}$ , respectivamente.

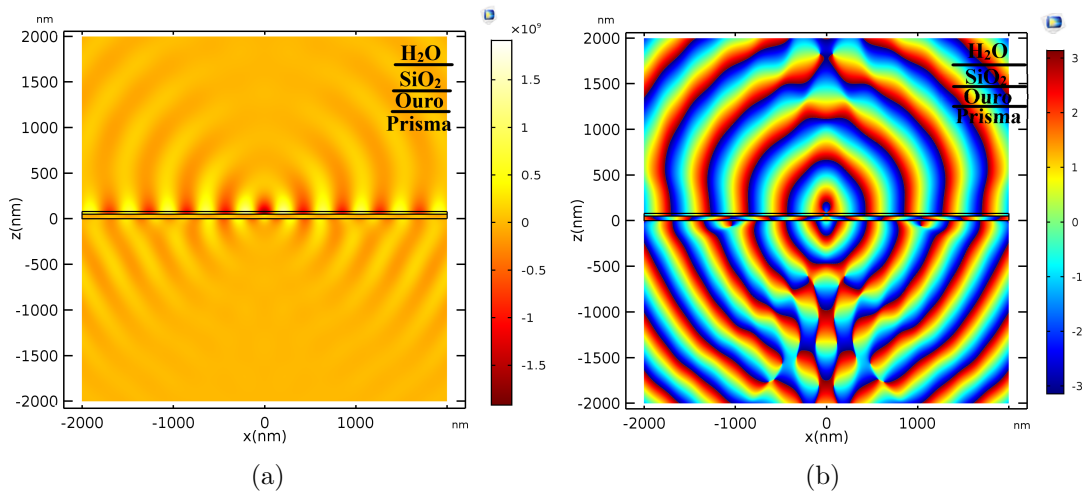


Figura 39 – Resultados obtidos para os primeiros parâmetros no modelo 2D com 4 camadas: (a) Componente  $E_z$  do campo elétrico e (b) Fase de  $E_z$ .

É possível observar da Figura 39 o surgimento de ondas SPPs acima da camada

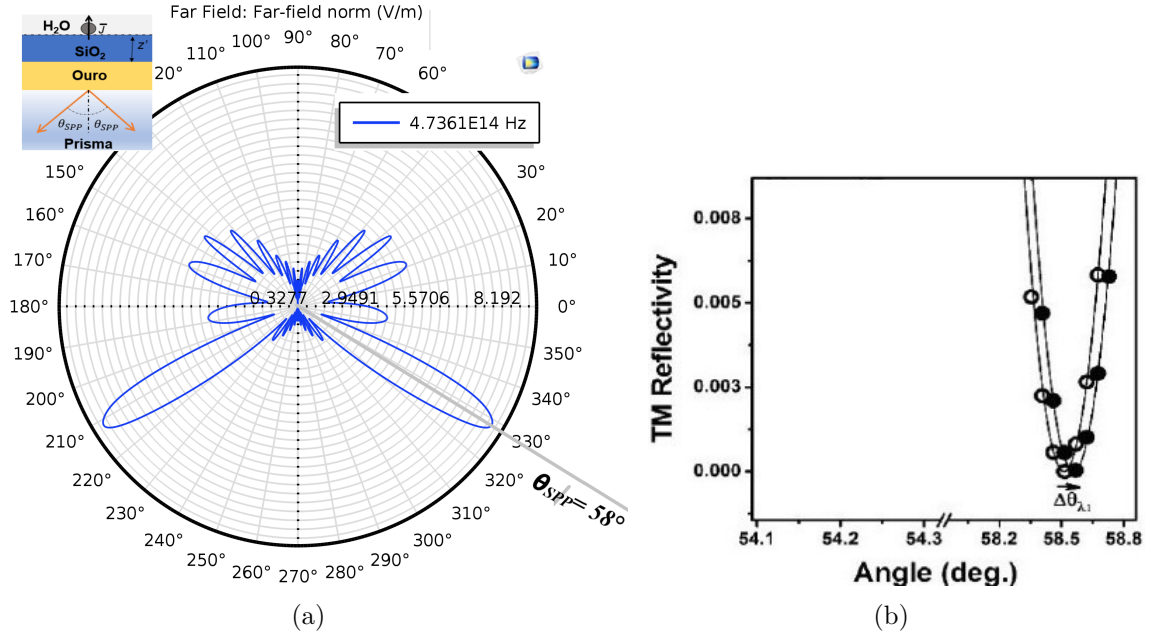


Figura 40 – (a) Diagrama de *Far Field* bidimensional do sensor 2D com 4 camadas obtido no COMSOL Multiphysics®, com ângulo de acoplamento  $\theta_{SPP} \approx 58^\circ$ . (b) Perfil experimental de ângulo mínimo SPR em  $\lambda_1 = 633 \text{ nm}$ , com ângulo de ressonância  $\theta \approx 58.5^\circ$ . Adaptado de [15]

de Ouro, tanto na camada de  $\text{SiO}_2$  como na camada de  $\text{H}_2\text{O}$ , e que as ondas planas diretamente polarizadas (modo TM) que surgem na camada do prisma tem um ângulo de acoplamento  $\theta_{SPP} \approx 58^\circ$  onde se pode observar com mais precisão do diagrama de campo distante da Figura 40(a). Observa-se que o ângulo obtido para os parâmetros referentes a  $\lambda = 633 \text{ nm}$  tem uma boa concordância com o mostrado na referência [15] para os mesmos parâmetros onde o ângulo de ressonância é  $\theta \approx 58.5^\circ$  (Figura 40(b)) obtido experimentalmente de um sensor SPR na configuração Kretschmann.

A simulação para os segundo parâmetros da Tabela 2, onde  $\lambda_2 = 783 \text{ nm}$ , teve um número de grau de liberdade igual a 3987522 resolvidos em um tempo de solução igual a 1 min e 59 s. A Figura 41 e a Figura 42(a), mostram os resultados obtidos da componente  $E_z$  com sua fase e o diagrama de campo distante, respectivamente, para a segunda análise do modelo com 4 camadas, onde é observável o surgimento de ondas SPPs acima da camada de ouro e as frentes das ondas planas acopladas na camada do prisma são altamente direcionadas em um ângulo de acoplamento  $\theta_{SPP} \approx 55^\circ$ . O resultado obtido para o ângulo de acoplamento, observado no gráfico de *Far Field* da Figura 42(a), para  $\lambda = 783 \text{ nm}$  teve boa concordância com o da referência [15], que obteve um ângulo de ressonância  $\theta \approx 54.2^\circ$  observado na Figura 42(b). Vale ressaltar que a observação do ângulo na Figura 42 é feita visualmente, sem uma escala precisa e mais exata.

Comparando os gráficos de *Far Field* para os dois comprimentos de onda (Figura 40 e Figura 42) observa-se que o melhor acoplamento das ondas SPPs é para o comprimento de

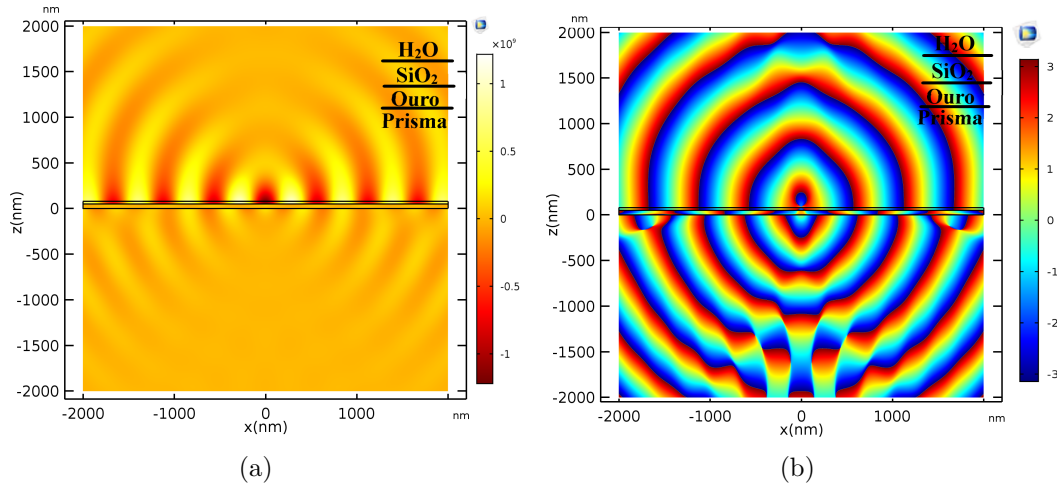


Figura 41 – Resultados obtidos para os segundos parâmetros no modelo 2D com 4 camadas: (a) Componente  $E_z$  do campo elétrico e (b) Fase de  $E_z$ .

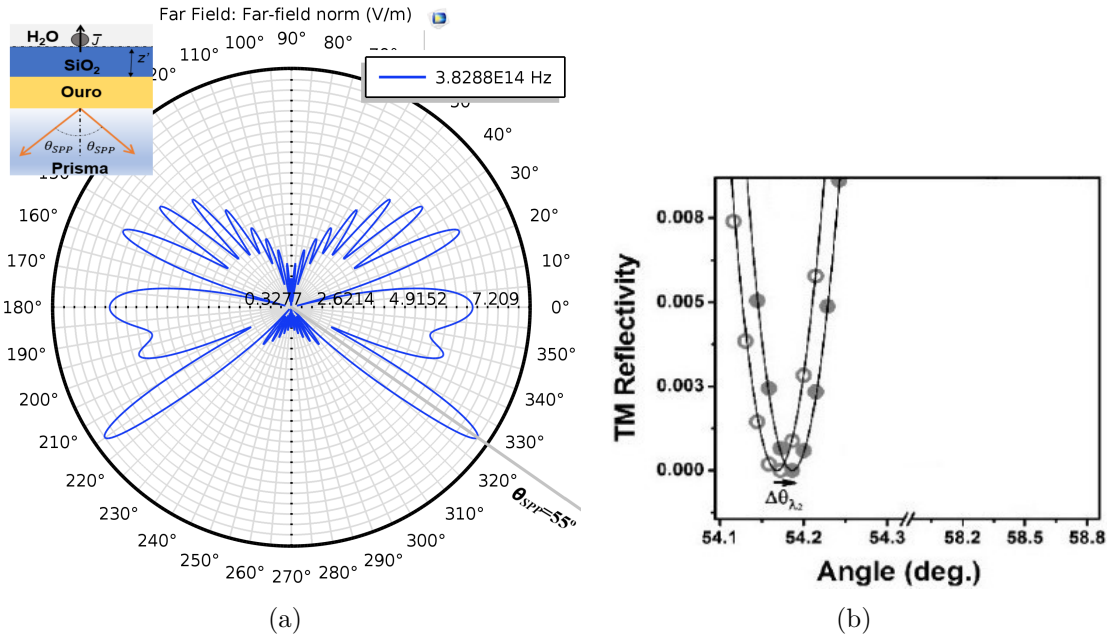


Figura 42 – (a) Diagrama de *Far Field* bidimensional do sensor 2D com 4 camadas para os segundos parâmetros obtido no COMSOL Multiphysics®, com ângulo de acoplamento  $\theta_{SPP} \approx 55^\circ$ . (b) Perfil experimental de ângulo mínimo SPR em  $\lambda_2 = 783 \text{ nm}$ , com ângulo de ressonância  $\theta \approx 54.2^\circ$ . Adaptado de [15]

onda  $\lambda_1 = 633 \text{ nm}$ , onde é possível observar que o campo irradiado na camada do prisma, entre os dois casos, se acopla com mais intensidade, sendo que são mais direcionados em apenas uma direção específica, para o primeiro gráfico de campo distante (*Far Field*).

## 6 Conclusão

Nesse trabalho, foi apresentada a solução numérica, por meio do método dos elementos finitos (FEM), de sensores plamônicos na configuração SPCE com 3 e 4 camadas usando o *Software* COMSOL Multiphysics® em modelagem 2D. Os principais resultados observados foram as componentes  $E_z$  do campo elétrico com sua fase, e principalmente os diagramas de campo distante (*Far Field*), onde obteve-se os ângulos de ressonância  $\theta_{SPP}$ , que é o principal resultado na análise de sensores SPR para caracterização e identificação dos analitos em sua superfície.

A primeira análise feita com o modelo 2D do sensor com 3 camadas foi para comparar com resultados de um modelo 3D criado utilizando o mesmo *Software* em [12] e validar o modelo criado. Apesar das componentes de campo obtidas terem uma escala de intensidade menor, os resultados obtidos foram bastantes condizentes em comparação a resultados obtidos em um modelo 3D feito por [12], onde o ângulo de acoplamento obtido  $\theta_{SPP} \approx 35^\circ$  foi bem próximo do obtido no modelo 3D de  $\theta \approx 34.8^\circ$ . No estudo de sensores multicamadas, independentemente do tipo da fonte de excitação ou do tipo de modelo (2D ou 3D), a fase da radiação que se acopla através do prisma deve ser igual e os principais comportamentos observados é o comprimento de onda  $\lambda$  das frentes de onda obtidos junto com a direção  $\theta_{SPP}$  da radiação na camada do prisma, que depende da estrutura e das propriedades elétricas do sensor SPCE. Vale ressaltar que a observação do ângulo  $\theta_{SPP}$ , obtidos através dos diagramas de *Far Field*, é feita visualmente e sem uma escala de precisão alta.

Analizando o sensor de 3 camadas para uma variação paramétrica da altura  $z'$  do elemento radiador sobre sua superfície, observou-se que a onda SPP acopla-se cada vez melhor por campo próximo quando os elementos radiadores estiverem mais próximas do sensor SPCE em  $z' = 20 \text{ nm}$  e assim tornando-se mais fácil de identificar o ângulo de acoplamento  $\theta_{SPP}$ .

O sensor 2D com 3 camadas também foi analisado e comparado com resultados obtidos usando outros métodos de solução como o DCIM. Os resultados observados foram bem próximos dos obtidos via DCIM, principalmente do ângulo de acoplamento que foram quase idênticos. A reciprocidade dos resultados obtidos validam o modelo 2D criado, tendo como principal ponto positivo o pequeno custo computacional para simulação e solução dos problemas resolvidos em sensores SPR, principalmente em relação ao modelo 3D que utiliza-se cerca de 28GB de RAM usando o mesmo *Software* e demandando várias horas de processamento (de 8 a 10 horas). Vale lembrar que o modelo 2D criado tem um tempo de processamento em torno de 2 min a 8 min .



A última etapa do trabalho foi analisar o mesmo modelo 2D para um sensor SPCE com 4 camadas, onde os resultados obtidos foram comparados com resultados experimentais obtidos em [15] para um sensor SPR na configuração Kretschmann. Os resultados obtidos foram satisfatórios e através da comparação com a referência [15], pôde-se validá-los junto ao modelo numérico feito no COMSOL Multiphysics®. Através dos resultados comprovou-se também a reciprocidade eletromagnética do sensor SPR na configuração SPCE com o sensor SPR na configuração Kretschmann.

Portanto, os resultados obtidos neste estudo foram satisfatórios, coerentes e consistentes. Com isso, esse trabalho pode servir de base para análise de sensores SPCE na detecção de nanopartículas ou nanopoluentes, pois os resultados obtidos mostram que o sensor SPCE, tem suas ondas irradiadas no prisma (no modo TM) altamente direcionadas em um ângulo específico ao incidir no detector.

## 6.1 Trabalhos Futuros

Com os conceitos adquiridos e aprimorados na área de Sensores Plasmônicos e na modelagem de estruturas multicamadas usando o *Software* COMSOL Multiphysics®, esse trabalho pode ser estendido para trabalhos futuros em:

- Analisar parametricamente o modelo para diferentes comprimentos de onda, na faixa óptica.
- Tentar otimizar o sensor, como melhorar sua sensibilidade. Através por exemplo da utilização de grafeno.
- Analisar as outras componentes de campo elétrico e as magnéticas.
- Comparar os resultados com outros métodos de solução, como por exemplo o Método dos Momentos (MoM), Método das Diferenças Finitas e etc.
- Modelar no COMSOL Multiphysics® outras configurações de sensores SPRs, como a Kretschmann ou Otto.

# Referências

- 1 CONCEIÇÃO, Y. G. da. *Análise Numérica de Sensor SPR na Configuração SPCE Baseado em Grafeno de Duas Camadas Pelo Método dos Elementos Finitos*. Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal do Pará, Instituto de Tecnologia, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Elétrica, Belém, 2021. Citado 10 vezes nas páginas [11](#), [21](#), [23](#), [25](#), [26](#), [27](#), [37](#), [39](#), [40](#) e [41](#).
- 2 SHIH, Y. M. *Modelagem de Nanoestruturas para Aplicações na Geração de Plasmons Polaritons de Superfície*. Dissertação (Mestrado) — Universidade de São Paulo, Escola de São Carlos, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Elétrica, 2009. Citado 7 vezes nas páginas [11](#), [19](#), [23](#), [27](#), [28](#), [29](#) e [35](#).
- 3 MAIER, S. A. *Plasmonics: Fundamentals and Applications*. Springer:New York.: [s.n.], 2007. Citado 12 vezes nas páginas [11](#), [19](#), [23](#), [25](#), [26](#), [27](#), [28](#), [29](#), [30](#), [31](#), [32](#) e [34](#).
- 4 ZAMAN, Q. *Surface Plasmon Resonance Spectroscopy for the Characterization of Nanoparticles, Organics Thin Films and 2-D Materials*. Tese (Doutorado) — Rio de Janeiro: PUC- Rio, Departamento de Física, RJ, 2019. Citado 4 vezes nas páginas [11](#), [31](#), [32](#) e [33](#).
- 5 NOVOTNY, L.; HECHT, B. *Principles of Nano-Optics*. Cambridge: New York: [s.n.], 2012. Citado 10 vezes nas páginas [11](#), [12](#), [21](#), [31](#), [32](#), [33](#), [34](#), [35](#), [36](#) e [37](#).
- 6 HECHT, B. et al. Local excitation, scattering, and interference of surface plasmons. *Phys. Rev. Lett.*, n. 77, p. 1889–1893, 1996. Citado 2 vezes nas páginas [11](#) e [33](#).
- 7 NOVOTNY, L.; HECHT, B.; POHL, a. D. W. Interference of locally excited surface plasmons. *J. Appl. Phys.* 81, p. 1798–1806, 1997. Citado 2 vezes nas páginas [11](#) e [33](#).
- 8 ROH, S.; CHUNG, T.; LEE, B. Overview of the characteristics of micro- and nano-structured surface plasmon resonance sensors. *Sensors*, p. 11(2):1565, 2011. Citado 2 vezes nas páginas [11](#) e [35](#).
- 9 SADIKU, M. N. *Computational Electromagnetics with MATLAB*. 5. ed. USA: CRC Press, 2019. Citado 5 vezes nas páginas [12](#), [41](#), [42](#), [43](#) e [44](#).
- 10 JIAN-MING, J. *Theory and computation of electromagnetic fields*. 2. ed. Department of Electrical and Computer Engineering, University of Illinois at Urbana Champaign: John Wiley e Sons, 2015. Citado 3 vezes nas páginas [12](#), [43](#) e [44](#).
- 11 COMSOL. *COMSOL Multiphysic: Simule projetos, dispositivos e processos do mundo real com o software multifísico da COMSOL*. 2021 BY COMSOL INC. Disponível em: <https://br.comsol.com/>. Acesso em: 03 julho 2020. Citado 10 vezes nas páginas [12](#), [44](#), [45](#), [46](#), [48](#), [49](#), [50](#), [51](#), [52](#) e [53](#).
- 12 FERRAZ, P. F. *Análise Numérica de Sensores de Ressonância Plasmônica no Modo de Emissão Acoplada*. Trabalho de conclusão de Curso, Faculdade de Engenharia Elétrica, Universidade Federal do Pará, Tucuruí: [s.n.], 2017. Citado 23 vezes nas páginas [12](#), [13](#), [19](#), [21](#), [28](#), [29](#), [30](#), [31](#), [35](#), [36](#), [37](#), [38](#), [41](#), [50](#), [52](#), [57](#), [58](#), [59](#), [60](#), [61](#), [63](#), [65](#) e [68](#).

- 13 SOUZA, N. W. P. de. *Análise de Sensores Plasmônicos Baseados em Nano Estruturas Estratificadas Utilizando o Método das Imagens Complexas Discretas*. Tese (Doutorado) — Universidade Federal do Pará, Instituto de Tecnologia, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Elétrica, Belém, 2018. Citado 15 vezes nas páginas [13](#), [19](#), [21](#), [35](#), [36](#), [37](#), [38](#), [39](#), [57](#), [59](#), [60](#), [62](#), [63](#), [64](#) e [65](#).
- 14 MICHALSKI, K. Extrapolation methods for sommerfeld integral tails. *IEEE Trans. Antennas Propag.*, v. 46, p. 1405–1418, 1998. Citado 5 vezes nas páginas [13](#), [21](#), [38](#), [62](#) e [63](#).
- 15 ZAMAN, Q. et al. Two-color surface plasmon resonance nanosizer for gold nanoparticles. *AOPTICS EXPRESS* 3200, v. 27, n. 3, Publicado: 4 Feb 2019. Citado 9 vezes nas páginas [13](#), [21](#), [38](#), [54](#), [57](#), [65](#), [66](#), [67](#) e [69](#).
- 16 RAETHER, H. *Surface Plasmon on Smooth and Rough Surfaces and on Gratings*. Spring-Verlag: Berlin: [s.n.], 1988. Citado 2 vezes nas páginas [19](#) e [23](#).
- 17 HOMOLA, J.; YEE, S. S.; GAUGLITZ., G. Surface plasmon resonance sensors: review. *sensors and actuators b*. n. 54, p. 3–15, 1999. Citado na página [19](#).
- 18 HOMOLA, J. Surface plasmon resonance sensors for detection of chemical and biological species. *Chem. Rev.*, v. 108, p. 462–493, 2008. Citado 2 vezes nas páginas [19](#) e [35](#).
- 19 OTTO, A. Excitation of non radiative surface plasma waves in silver by the method of frustrated total reflection. *Z. Physik* 216, p. 398–410, 1968. Citado na página [19](#).
- 20 KRETSCHMANN, E.; RAETHER, H. Radiative decay of non-radiative surface plasmons excited by light. *Z. Physik* 23, p. 2135–2136, 1968. Citado na página [19](#).
- 21 COSTA, J. S. *Análise de um Sensor Baseado em Ressonância de Superfície de Plasma Acoplado a um Arranjo Periódico de Nanopartículas Metálicas*. Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal do Pará, Instituto de Tecnologia, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Elétrica, Belém, 2016. Citado 7 vezes nas páginas [19](#), [30](#), [31](#), [32](#), [35](#), [36](#) e [41](#).
- 22 LAKOWICZ, J. R. et al. Directional surface plasmon-coupled emission: a new method for high sensitivity detection. *Biochemical and Biophysical Research Communications*, n. 307, p. 435–439, 2003. Citado na página [20](#).
- 23 BARNES, W. L. Fluorescence near interfaces: the role of photonic mode density. *Biochemical and Biophysical Research Communications*, n. 45, p. 661–699, 1998. Citado na página [21](#).
- 24 SOUZA, N. W. P. de; COSTA, K. Q.; DMITRIEV, V. Development of computational 3d mom algorithm for nanoplasmonics. *Journal of Microwaves, Optoelectronics and Electromagnetic Applications*, n. 12, p. 569–579, 2013. Citado na página [21](#).
- 25 SCHOLZ, B. J. et al. Extraction of surface plasmons in organic light-emitting diodes via high-index coupling. *Optics Express*, n. 20, 2012. Citado na página [21](#).
- 26 CRUZ, A.; et al. Modelo eletromagnético de sensor plasmônico acoplado a arranjo de nanopartículas via pgf 3D. *MOMAG 2018, Santa Rita do Sapucaí-MG. 13ºCBMag-Congresso Brasileiro de Eletromagnetismo*, v. 18, 2018. Citado na página [21](#).

- 27 ZIA, R. et al. Plasmonics: the next chip-scale technology. *Mater. Today*, v. 9, p. 20–27, 2006. Citado na página [23](#).
- 28 NOVOTNY, L.; HECHT, B. *Principles of Nano-Optics*. 2. ed. Cambridge: New York: [s.n.], 2012. Citado na página [23](#).
- 29 LYON, L. A.; MUSICK, M. D.; NATAN, a. M. J. Colloidal au-enhanced surface plasmon resonance immunosensing. *Analytical Chemistry*1, n. 24, p. 5177–5183, 1998. Citado na página [36](#).
- 30 SILVA, W. C. D. *Modelagem de Sensores Plasmônicos em TeraHetz Baseados em Grafeno*. Trabalho de conclusão de Curso, Faculdade de Engenharia Elétrica, Universidade Federal do Pará, Tucuruí: [s.n.], 2020. Citado 2 vezes nas páginas [41](#) e [42](#).
- 31 COURANT, R. Variational methods for the solution of problems of equilibrium and vibrations. *Bull. Am. Math. Soc.*, v. 49, p. 1–43, 1943. Citado na página [41](#).
- 32 SILVANO, G. L. *APLICAÇÕES DO COMSOL NO ESTUDO DE NANOPARTÍCULAS PLASMÔNICAS*. Trabalho de conclusão de Curso, Faculdade de Engenharia Elétrica, Universidade Federal do Pará, Tucuruí: [s.n.], 2013. Citado 4 vezes nas páginas [42](#), [43](#), [48](#) e [50](#).
- 33 MICHALSKI, K. A. *Application of the Complex Image Method to Electromagnetic Field Computation in Planar Uniaxial Multilayers*. department of Electrical and Computer Engineering, Texas A&M University, Texas, EUA: [s.n.], 2015. Citado na página [57](#).