



UFPA

ANÁLISE DO ESPALHAMENTO ELETROMAGNÉTICO DE RAYLEIGH EM NANOESFERAS CORE-SHELL

ANDRÉ FELIPE SOUZA DA CRUZ

2º Semestre / 2016

**UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARÁ
CAMPUS UNIVERSITÁRIO DE TUCURUÍ
TUCURUÍ-PARÁ**

André Felipe Souza da Cruz

Análise do Espalhamento Eletromagnético de Rayleigh em Nanoesferas Core-Shell

Discente: André Felipe Souza da Cruz
Análise do Espalhamento Eletromagnético de Rayleigh em
Nanoesferas Core-Shell

Trabalho de Conclusão de Curso (TCC) apresentado para obtenção do Grau de bacharel em Engenharia Elétrica, submetido à banca examinadora na Universidade Federal do Pará Campus Tucuruí, na área de concentração de Eletromagnetismo Aplicado - Telecomunicações.

Orientador: Dr. Karlo Queiroz da Costa

Tucuruí - Pará

-2017-

Souza da Cruz, André Felipe.

Análise do Espalhamento Eletromagnético de Rayleigh em Nanoesferas Core-Shell / André Felipe Souza da Cruz. – Tucuruí, 2017.

115f. ; 30 cm.

Monografia (Trabalho de Conclusão de Curso de Graduação em Engenharia Elétrica) – Faculdade de Engenharia Elétrica, Universidade Federal do Pará, 2017.

Orientador: Dr. Karlo Queiroz da Costa.

Espalhamento Eletromagnético. 2. Modelagem Analítica. 3. Extinction Cross-Section. I. André Felipe. Análise do Espalhamento Eletromagnético de Rayleigh em Nanoesferas Core-Shell.

André Felipe Souza da Cruz

Análise do Espalhamento Eletromagnético de Rayleigh em Nanoesferas Core-Shell

Este trabalho foi julgado em 01/2017 adequado para obtenção do Grau de Engenheiro Eletricista, e aprovado na sua forma final pela banca examinadora que atribuiu o conceito_____.

Dr. Karlo Queiroz da Costa

ORIENTADOR

Dr. Fabrício José Brito Barros

MEMBRO DA BANCA EXAMINADORA

M.Sc. Janílson Leão de Souza

MEMBRO DA BANCA EXAMINADORA

M.Sc. Jefferson Souza Costa

MEMBRO DA BANCA EXAMINADORA

DEDICATÓRIA

Dedico este trabalho primeiramente a Deus, que permitiu e iluminou o meu caminho durante esta caminhada, aos meus pais Rosivaldo e Eliane, por toda a ajuda e por sempre acreditarem em mim, aos meus irmãos Alexandre e Alessandro, por me apoiarem, a minha namorada Pâmela pela companhia e paciência durante as longas horas de estudo, e minha filha Eloisy por ser a fonte de energia de todo meu esforço.

AGRADECIMENTOS

Primeiramente a Deus, por todas as bênçãos e oportunidades que colocou em meu caminho, pela visão e força para que fossem feitas as escolhas necessárias.

À Universidade Federal do Pará, aos Professores Dr. Wellington S. Fonseca e M.Sc. Bruno Wallacy Martins Lima, pelas oportunidades e orientações iniciais nesta jornada, ao Colegiado de Professores da Faculdade de Engenharia Elétrica do Campus de Tucuruí (FEE-CAMTUC), pelo conhecimento provido, sem o qual este trabalho não seria possível, em especial ao orientador deste trabalho Dr. Karlo Q. da Costa, pela paciência e disposição durante a orientação deste e outros trabalhos.

Aos antigos integrantes do Laboratório de Engenhocas, Gabriel S. Silva, Matheus Santos, Ayrton José, Alan Lima e todos os outros.

Aos antigos monitores do projeto de Nivelamento Acadêmico do CAMTUC, Pedro Henrique, João Pedro, Sunara Melo, Vanessa Santos e todos os outros.

Aos parceiros do Laboratório de Eletromagnetismo (LEMAG-CAMTUC) Rafael C. Santos e Piaga F. Ferraz.

Aos meus colegas de classe da turma de Engenharia Elétrica EE13, Cássio Moraes, Isaac Gadelha, Gabriel Silva, Rafael Santos, Filipe Fernandes, Piaga Franco, Yuri Pimentel, Thiago Rocha, Domingos Franciel Ribeiro, Luiz Felipe Zampiva, Allan Silva Jr., Wallace Farias, Wendell Xavier, Jorge Lucas Vilela, Alexandre Mousinho, Manelson Moraes, Wellington Oliveira, Marcos Geovane Lima, Pamela Rodrigues, Anne Keise Melo, Isadora Barros, Thayanne Bandeira e todos os outros que passaram e deixaram sua contribuição.

Aos meus antigos colegas do curso Técnico em Eletrotécnica, Alcenir Campelo, Alex Baumer, Caio Cesar, Diego Rodrigues, Wallan Dias, Anastaciane Martins, Vanessa Menezes, Samara Pereira, e todos os outros que deixaram saudade.

Aos amigos de outras jornadas, em especial Duarte Leite, Francileno Trindade, Luciana Oliveira, Silas Conde, Pablo Virgolino e ao meu *Senpai* Pedro Bruno Neri, que me apoiaram e incentivaram para que eu chegasse aqui hoje.

A minha família, aos meus pais Sr. Rosivaldo S. Cruz e Sr.^a Eliane M. S. Cruz, por tudo que me ofereceram e principalmente pela orientação para que eu seguisse nesta área do conhecimento desde cedo. A minha namorada Pâmela V. Freitas, pela paciência, companheirismo e sempre acreditar em min, e a sua família. Agradeço a todos que fizeram parte desta longa caminhada, e por fim a aqueles que direta ou indiretamente contribuíram para êxito deste trabalho.

“Somente um principiante que não sabe nada sobre ciência diria que a ciência descarta a fé. Se você realmente estudar a ciência, ela certamente o levará para mais perto de Deus.”

JAMES CLERK MAXWELL

RESUMO

O estudo de nanopartículas metálicas tem sido de grande importância no desenvolvimento de dispositivos de sensoriamento em nanoestruturas, e aplicações em nanofotônica. Neste trabalho é apresentado um estudo teórico da interação entre uma onda eletromagnética e uma nanoestrutura de ouro com geometria esférica, possuindo esta uma fina camada dielétrica de sílica (*core-shell*). Considera-se que o diâmetro efetivo da partícula é muito menor que o comprimento de onda do campo elétrico incidido, caracterizando o espalhamento quase estático de Rayleigh. Utilizando um modelo analítico através da equação de Laplace foi verificada a interação entre o campo de uma carga pontual e a nanoesfera, entre um campo uniforme e uma nanoesfera, e entre um campo uniforme e uma nanoesfera *core-shell*. Em seguida, utilizando um modelo numérico, foi verificada a interação do campo elétrico entre duas nanoesferas *core-shell*, em função da distância entre elas. Para a nanopartícula isolada, foram comparados os parâmetros de eficiência em seções transversais de espalhamento, absorção e extinção, com dados experimentais de curvas de Absorvância. Os resultados mostram as mudanças resultantes das interações na faixa do espectro variando de 450nm a 750nm, e utilizando a modelagem abordada é verificada a faixa de validade do método quase estático para as dimensões das partículas.

Palavras-chave – Espalhamento de Rayleigh, Nanopartículas de ouro, *Core-Shell*, Modelagem Analítica, *COMSOL Multiphysics 5.2®*.

ABSTRACT

The study of metallic nanoparticles has been of great importance to development of sensing devices in nanostructures, and applications in nanophotonics. This work is a theoretical study of the interaction between an electromagnetic wave and a gold nanostructure with spherical geometry, which has a thin dielectric layer of silica. It is considered that the effective diameter of the part is much smaller than the wavelength of the electric field, characterizing the almost static Rayleigh scattering. Using an analytical model through the Laplace equation, an interaction between the field of a point charge and a nanosphere, between a uniform field and a nanosphere, and between a uniform field and a core-shell nanosphere was verified. Then, using a numerical model, an interaction of the electric field between two core-shell nanospheres was verified, as a function of the distance between them. For an isolated nanoparticle, the efficiency parameters in scattering, absorption and extinction cross sections were compared with experimental data of Absorbance curves. The results show the changes resulting from interactions in the spectrum range ranging from 450nm to 750nm, and using the modeling approach is verified the range of validity of the almost static method for the dimensions of the particles.

Keywords – Rayleigh Scattering, Gold Nanoparticles, Core-Shell, Analytical Modeling, COMSOL Multiphysics5.2®.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1	Partículas com depósitos sobre sua camada Fonte: (http://nanocomposix.com/).	17
Figura 2	Ilustração de um sensor SPR. Fonte: [15].....	18
Figura 3	Solução Concentrada. Fonte: (http://nanocomposix.com/).....	18
Figura 4	Análise proposta. Fonte: Autor.	19
Figura 5	Placa metálica polarizada.....	28
Figura 6	Geometria para propagação SPP em uma simples interface metal-dielétrico.....	30
Figura 7	Geometria para propagação SPP em uma simples interface metal-dielétrico acoplada a um prisma.....	30
Figura 8	Surgimento da RSPL em uma NPM. Fonte: Autor.....	31
Figura 9	Ressonância da RSPL para uma NPM de raio $R=50\text{nm}$. Fonte: Autor.....	31
Figura 10	Soluções contendo nanoesferas.....	32
Figura 11	Imagem nanoscópica: (a) Nanoesferas em colóide; (b) Nanoesferas do tipo <i>Core-Shell</i> em colóide.....	32
Figura 12	Interação eletromagnética pelo modelo de Mie. Fonte: Autor.....	33
Figura 13	Interação eletromagnética pelo modelo de Rayleigh. Fonte: Autor.....	33
Figura 14	Esfera de ouro interagindo com o campo de uma carga pontual.....	34
Figura 15	Esfera de ouro interagindo com o campo uniforme orientando na direção \hat{a}_z	39
Figura 16	Esfera de ouro interagindo com o campo de uma carga pontual distante.....	44
Figura 17	Core-Shell em um campo homogêneo e uniforme.....	46
Figura 18	Permissividade Relativa para três raios de NPM: (a) Parte Real, (b) Parte Imaginária.....	56
Figura 19	Permissividade Relativa da Sílica.....	57
Figura 20	Conjunto de nanopartículas separadas uniformemente por uma distância d	58
Figura 21	Definição da geometria na modelagem do problema.....	59
Figura 22	Geometria do Problema: (a) Configuração A; (b) Configuração B.....	60
Figura 23	Discretização da malha triangular.....	60
Figura 24	Polarizabilidades Interna e Externa: (a) $ \alpha $, $a = 5\text{nm}$; (b), $\angle\alpha$, $a = 5\text{nm}$; (c) $ \alpha $, $a = 15\text{nm}$; (d), $\angle\alpha$, $a = 15\text{nm}$; (e) $ \alpha $, $a = 35\text{nm}$; (f), $\angle\alpha$, $a = 35\text{nm}$; (g) $ \alpha $, $a = 50\text{nm}$; (h), $\angle\alpha$, $a = 50\text{nm}$	63
Figura 25	Eficiência Transversal: (a) $a = 5\text{nm}$; (b) $a = 15\text{nm}$; (c) $a = 35\text{nm}$; (d) $a =$	64

	50nm.....	
Figura 26	Modulo do Campo Elétrico $ \vec{E}(r, \theta) $: (a) $a = 5nm, \Delta = 0nm$; (b) $a = 5nm, \Delta = 5nm$; (c) $a = 5nm, \Delta = 10nm$; (d) $a = 15nm, \Delta = 0nm$; (e) $a = 15nm, \Delta = 5nm$; (f) $a = 15nm, \Delta = 10nm$; (g) $a = 35nm, \Delta = 0nm$; (h) $a = 35nm, \Delta = 5nm$; (i) $a = 35nm, \Delta = 10nm$; (j) $a = 50nm, \Delta = 0nm$; (k) $a = 50nm, \Delta = 5nm$; (l) $a = 50nm, \Delta = 10nm$	66
Figura 27	Modulo do Campo Magnético $ \vec{H}(r, \theta) $: (a) $a = 5nm, \Delta = 0nm$; (b) $a = 5nm, \Delta = 5nm$; (c) $a = 5nm, \Delta = 10nm$; (d) $a = 15nm, \Delta = 0nm$; (e) $a = 15nm, \Delta = 5nm$; (f) $a = 15nm, \Delta = 10nm$; (g) $a = 35nm, \Delta = 0nm$; (h) $a = 35nm, \Delta = 5nm$; (i) $a = 35nm, \Delta = 10nm$; (j) $a = 50nm, \Delta = 0nm$; (k) $a = 50nm, \Delta = 5nm$; (l) $a = 50nm, \Delta = 10nm$	67
Figura 28	Potencial Elétrico $V(r, \theta)$: (a) $a = 5nm, \Delta = 0nm$; (b) $a = 5nm, \Delta = 5nm$; (c) $a = 5nm, \Delta = 10nm$	68
Figura 29	Fase do Campo Elétrico $\angle \vec{E}(r, \theta)$: (a) $a = 5nm, \Delta = 0nm$; (b) $a = 5nm, \Delta = 5nm$; (c) $a = 5nm, \Delta = 10nm$	69
Figura 30	Campo Elétrico Vetorial: $a = 50nm, \Delta = 10nm$	69
Figura 31	Campos total de uma partícula $a = 15nm$ e $\Delta = 10nm$: (a) Elétrico; (b) Magnético.....	70
Figura 32	Intensidade dipolar: (a) $r = a = 5nm$ (b) $r = b = 5nm + \Delta$ (c) $r = a = 15nm$ (d) $r = b = 15nm + \Delta$ (e) $r = a = 35nm$ (f) $r = b = 35nm + \Delta$ (g) $r = a = 50nm$ (h) $r = b = 50nm + \Delta$	71
Figura 33	Absorvância para NPM (a)Esfera $a = 10nm$, (b)Core-Shell $a = 10nm$ e $\Delta = 10nm$	72
Figura 34	Campo Elétrico no Acoplamento de duas Partículas: (a) $d = 20nm$ (b) $d = 5nm$	73
Figura 35	Campo Elétrico no Acoplamento de duas Partículas: (a) $d = 20nm$, (b) $d = 5nm$	74
Figura36	Modulo do Campo Elétrico $ \vec{E}(r, \theta) $: (a) $d_q = 20nm, M = 1$; (b) $d_q = 20nm, M = 2$; (c) $d_q = 20nm, M = 3$; (d) $d_q = 50nm, M = 1$; (e) $d_q = 50nm, M = 2$; (f) $d_q = 50nm, M = 3$; (g) $d_q = 80nm, M = 1$; (h) $d_q = 80nm, M = 2$; (i) $d_q = 80nm, M = 3$; (j) $d_q = 110nm, M = 1$; (k) $d_q = 110nm, M = 2$; (l) $d_q = 110nm, M = 3$	75
Figura37	Validade do Método: Parâmetro $x(R, \lambda)$	77
Figura A1	Esfera com centro na origem.....	79
Figura B1	Sistema de coordenadas esférico.....	93

LISTA DE TABELAS

Tabela 1	Constantes utilizadas no modelo de Lorentz Drude.....	71
Tabela 2	Constantes utilizadas no modelo de Sellmeier.....	72
Tabela 3	Dimensões das partículas utilizadas.....	72

LISTA DE ABERVIATURAS E SIGLAS

NPM	Nanopartícula Metálica (<i>Metallic Nanoparticle</i>)
SPR	Ressonância Plasmônica de Superfície (<i>Surface Plasmon Resonance</i>)
SPP	Polarização Plasmônica de Superfície (<i>Surface Plasmon Polaritons</i>)
SPL	Plasmônica Superfície Localizada (<i>Surface Plasmon Located</i>)
RSPL	Ressonância Plasmônica de Superfície Localizada (<i>Resonance Surface Plasmon Located</i>)
FDTD	Método das Diferenças Finitas do domínio do tempo (<i>Finite-Difference Time-Domain</i>)
MOM	Método dos Momentos (<i>Method of Moments</i>)
FEM	Métodos dos Elementos Finitos (<i>Finite Element Method</i>)
FDM	Métodos das Diferenças Finitas (<i>Finite Difference Method</i>)
EDO	Equação Diferencial Ordinária (<i>Ordinary Differential Equation</i>)
EDP	Equação Diferencial Parcial (<i>Partial Differential Equation</i>)

LISTA DE SÍMBOLOS

\vec{D}	Densidade de Campo Elétrico
\vec{E}	Intensidade de Campo Elétrico
\vec{B}	Densidade de Campo Magnético
\vec{H}	Intensidade de Campo Magnético
\vec{j}	Densidade de Corrente
\vec{K}	Vetor de Onda
\vec{P}	Polarização
\vec{M}	Magnetização
\vec{p}	Momento de Dipolo
ρ	Densidade de Cargas
ϵ_0	Permissividade do Espaço Livre
μ_0	Permeabilidade do Espaço Livre
ϵ_r	Permissividade Relativa
μ_r	Permeabilidade Relativa
χ	Susceptibilidade Elétrica
α	Polarizabilidade
f	Frequência
ω	Frequência Angular
ω_0	Frequência Angular Fundamental do modelo de Lorentz-Drude
ω_p	Frequência do Plasma do modelo de Lorentz-Drude
γ	Frequência de Amortecimento do modelo de Lorentz-Drude
Γ_0	Frequência de Amortecimento Especifica do modelo de Lorentz-Drude
c	Velocidade da Luz
τ	Constante de Tempo
R	Raio genérico de uma esfera
λ	Comprimento de Onda
e	Carga do Elétron
A	Constante Experimental do Modelo de Sellmeier
B	Constante Experimental do Modelo de Lorentz-Drude

B_n	Coeficiente de Sellmeier
C_n	Coeficiente de Sellmeier
ε_∞	Permissividade para frequência infinita do modelo de Lorentz-Drude
v_f	Velocidade de Fermi
d	Distância entre Nanopartículas
d_q	Distância entre a origem do sistema de coordenadas e uma carga pontual
σ	Condutividade AC do modelo de gás de elétrons livres.
σ_0	Condutividade DC do modelo de gás de elétrons livres.
δ	Profundidade Pelicular
\tilde{n}	Indicie de Refração Complexo
η	Indicie de Refração Real
κ	Coeficiente de Extinção
α_{ext}	Coeficiente de Extinção (Absorção) da Lei de Beer's
C_{sca}	Seção transversal de Espalhamento (<i>Scattering Cross-Section</i>)
C_{abs}	Seção transversal de Absorção (<i>Absorption Cross-Section</i>)
C_{ext}	Seção transversal de Extinção (<i>Extinction Cross-Section</i>)
Q_{sca}	Eficiência de Espalhamento (<i>Scattering Efficiency</i>)
Q_{abs}	Eficiência de Absorção (<i>Absorption Efficiency</i>)
Q_{ext}	Eficiência de Extinção (<i>Extinction Efficiency</i>)
A_b	Absorvância
I	Intensidade Incidente
I_0	Intensidade Transmitida
L	Espessura da amostra contendo nanopartículas.
N	Numero de nanopartículas por unidade de volume.
n	Numero de elétrons.
Δ	Espessura da camada dielétrica no <i>Core-shell</i>
a	Raio do núcleo da nanopartícula.
b	Raio efetivo da nanopartícula do tipo <i>Core-Shell</i>
V_c	Potencial elétrico do campo constante.
V_e	Potencial elétrico da esfera
V_q	Potencial elétrico da carga pontual
q	Carga pontual

SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO.....	17
2. INTERAÇÃO ELETROMAGNETICA NOS METAIS.....	21
2.1. Função Dielétrica do gás de elétrons livres.....	21
2.2. Fenômeno Plasmônico nos metais.....	28
2.3. Superfície Plasmônica Polarizada (SPP).....	30
2.4. Ressonância de Superfície Plasmônica Localizada (RSPL).....	31
3. INTERAÇÃO ELETROMAGNÉTICA QUASE ESTÁTICA DE RAYLEIGH EM NANOESFERAS.....	34
3.1. Nanoesfera de ouro em um campo produzido por uma carga pontual.....	34
3.1.1 Potencial elétrico proveniente da interação.....	34
3.1.2 Campo elétrico dentro e fora da esfera.....	39
3.2. Nanoesfera de ouro em um campo uniforme.....	39
3.2.1. Potencial elétrico proveniente da interação.....	39
3.2.2. Momento de dipolo e Polarizabilidade.....	42
3.2.3. Campo elétrico resultante da interação.....	42
3.2.4. Aproximação do campo de uma carga pontual a um campo uniforme.....	43
3.2.5. Campo eletromagnético na aproximação quase estática do problema.....	45
3.3. Nanopartícula do tipo Core-Shell em um campo uniforme.....	46
3.3.1. Potencial elétrico nas regiões da partícula.....	46
3.3.2. Momentos de dipolo e Polarizabilidades.....	50
3.3.3. Campo eletromagnético resultante da interação.....	51
4. PERMISSIVIDADE RELATIVA DOS MATERIAIS E SEÇÕES TRANSVERSAIS DE DISPERSÃO.....	52
4.1. Seções Transversais de Espalhamento, Absorção e Extinção.....	52
4.2. Absorbância de um Conjunto de Nanopartículas.....	54
4.3. Permissividade Complexa do Ouro – Modelo de Lorentz Drude.....	55
4.4. Permissividade Relativa da Sílica – Modelo de Sellmeier.....	56
5. MODELAGEM NUMÉRICA DO INTER-ACOPAMENTO ELETROMAGNÉTICO ENTRE DUAS PARTÍCULAS NO COMSOL.....	58
5.1 Problema Do Interacoplamento entre Nanopartículas.....	58

5.2	Solução Através de Simulação Numérica no COMSOL Multiphysics®.....	59
6.	RESULTADOS E DISCUSSÕES.....	61
6.1	Polarizabilidades Interna e Externa.....	62
6.2	Eficiência das Seções Transversais de Dispersão.....	64
6.3	Campos Elétrico e Magnético na interação NPM-Campo Uniforme.....	65
6.4	Máxima Intensidade do Campo Elétrico na superfície do Núcleo e da camada de Sílica em uma NPM Core-Shell.....	71
6.5	Comparação da Absorbância de um conjunto de NPM.....	72
6.6	Campo Elétrico no Inter-Acoplamento entre NPM.....	73
6.7	Campo Elétrico na Interação NPM-Campo de uma Carga Pontual.....	75
6.8	Validade do Modelo Quase Estático de Rayleigh.....	77
	CONSIDERAÇÕES FINAIS E CONCLUSÕES.....	78
	APENDICE A – MODELAGEM ANALÍTICA DO PROBLEMA GERAL.....	79
A.1.	Resolução da EDP de Laplace com simetria azimutal pelo método de separação de variáveis.....	79
A.2.	Equação diferencial homogênea linear.....	80
A.2.1.	Solução na forma de combinação linear de exponenciais.....	80
A.3.	Equação diferencial de Cauchy-Euler.....	81
A.3.1.	Solução pelo método de séries de Frobenius.....	81
A.3.2.	Solução para a primeira raiz da equação indicial.....	82
A.3.3.	Solução para a segunda raiz da equação indicial.....	83
A.4.	Equação diferencial de Legendre.....	85
A.4.1.	Solução pelo método de séries de Frobenius.....	85
A.4.2.	Polinômios de Legendre de primeiro tipo.....	89
A.4.3.	Polinômios de Legendre de segundo tipo.....	90
A.5.	Solução para equação de Laplace.....	92
	APENDICE B – RELAÇÕES EM COORDENADAS ESFÉRICAS.....	93
	APENDICE C – PROGRAMAS NO MATLAB.....	96
	TRABALHOS PUBLICADOS DURANTE A GRADUAÇÃO.....	116
	REFERENCIAL TEÓRICO.....	118

1. INTRODUÇÃO

Nos últimos anos, os estudos sobre nanopartículas metálicas têm levantado interesses nos campos da ciência aplicada, isso se deve a seus atributos físicos e químicos, e mais especificamente, suas propriedades especiais em aplicações na eletrônica, ótica e eletromagnetismo [1,2,3,4,5]. O desenvolvimento de um grande número de técnicas têm possibilitado a obtenção de diferentes tamanhos e formas geométricas, desde prismas a cilindros, além de aproximações à forma esférica. Recentemente, reações químicas em soluções compostas tem sido um procedimento bastante utilizado na produção de nanoesferas metálicas, e deste processo destaca-se a presença de uma fina camada dielétrica envolvendo a estrutura, esta, denominada agente surfactante, que em geral, é um polímero que se liga à superfície da nanopartícula durante a reação química, controlando sua taxa de crescimento e proporcionando estabilidade à amostra, além de oferecer proteção contra choques mecânicos entre as nanopartículas metálicas (NPM) (Fig. 1) [2,3]. Este tipo de partícula metálica com uma fina camada dielétrica superficial é denominado *core-shell*.

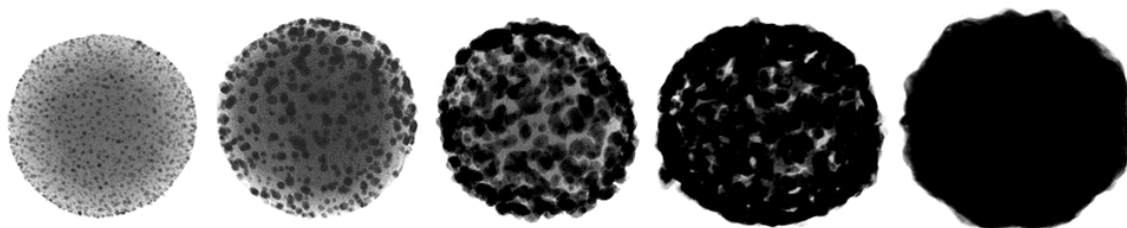


Figura 1: Partículas com depósitos sobre sua camada (Fonte: <http://nanocomposix.com/>)

A variação do tamanho e forma da NPM em uma amostra dificulta a interpretação de medidas de caracterização e identificação da mesma. Existem algumas variedades de métodos de medição e caracterização das NPM, visto que suas propriedades ópticas estão fortemente relacionadas às dimensões da NPM e características construtivas do meio onde a mesma está inserida. O estudo da interação eletromagnética entre a estrutura e uma fonte pode prover informações interessantes sobre sensoriamento destas NPM [2].

A interação entre metais e ondas, na faixa ótica, produz um comportamento oscilatório na nuvem de elétrons livres em fase oposta ao do campo incidente, tal efeito está diretamente relacionado à componente real negativa da função complexa dielétrica do metal, consequência da oscilação dos elétrons em 180° com o campo incidente, o resultado desta interação é conhecido como onda plasmônica [4,5]. Os efeitos plasmônicos nos metais sugerem diferenças entre os regimes de micro-ondas (RF) e ondas óticas, visto que, no regime de ondas óticas, os metais são considerados condutores imperfeitos [5].

Nanopartículas de ouro têm sido utilizadas como sondas óticas moleculares, o que têm criado grandes perspectivas no desenvolvimento de dispositivos de sensoriamento (Fig. 2), isso se deve à característica plasmônica ressonante do ouro na faixa visível do espectro. Estes estudos têm contribuído de forma significativa ao desenvolvimento de biosensores, imagens moleculares e tratamentos foto térmico de doenças [1,6]. Nanopartículas de ouro, que são excitadas por uma fonte laser de comprimento de onda próximo da banda de ressonância da superfície plasmônica (SPR), podem eficientemente converter a energia dos fótons em energia térmica, levando à destruição de células biológicas como tumores, e bactérias [6,7].

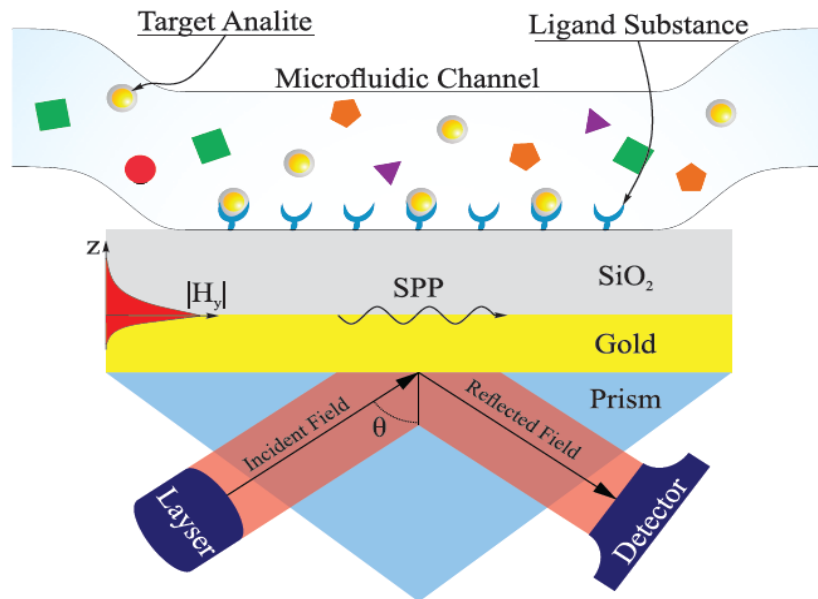


Figura 2: Ilustração de um sensor SPR. Fonte: [15]

Quando uma amostra de material, sólida ou líquida, contém uma dispersão de partículas nanométricas, o meio é definido como coloide, ou solução concentrada (Fig. 3) [2]. A Absorvância (ou Absorbância) é um parâmetro que associa o coeficiente de extinção de um conjunto de nanopartículas às características do coloide, este parâmetro está relacionado ao fenômeno de Ressonância Plasmônica de Superfície Localizada (RSPL) [2].



Figura 3: Solução Concentrada. Fonte: <http://nanocomposix.com/>

A análise da banda de absorção da RPSL pode prover informações sobre as dimensões e a estrutura da nanopartícula metálica, desde que as características geométricas e constituintes das partículas e do meio influenciam diretamente na largura de banda de ressonância plasmônica [6,7]. A presença da camada dielétrica altera a posição espectral, e desta forma, deve ser considerada nos modelos matemáticos [8,9]. A interação entre uma partícula de raio efetivo R e um feixe óptico, pode ser analisada usando uma aproximação quase estática, desde que as dimensões da partícula sejam muito menores que o comprimento de onda do campo incidido, ou seja, $R \ll \lambda$, neste caso a fase do campo eletromagnético harmônico é praticamente constante em relação à partícula, além de possibilitar o cálculo da distribuição do campo espacial total por um problema simplificado da eletrostática [5,8,9]. Este método é conhecido como problema quase estático ou espalhamento de Rayleigh, que é uma aproximação do modelo geral pelas equações de Maxwell, o espalhamento de Mie.

Neste trabalho é apresentado um estudo analítico da interação entre uma partícula com geometria esférica, com núcleo de ouro, e um campo eletromagnético utilizando o modelo quase estático de Rayleigh, onde são verificados os efeitos da presença, ausência e variação da espessura da camada dielétrica sobre as NPM isoladas. Uma segunda análise é apresentada para verificar o acoplamento eletromagnético entre duas NPM do tipo core-shell, para isso foi utilizado o software *COMSOL Multiphysics 5.2* (Fig. 4) [10]. O objetivo geral deste trabalho é demonstrar a modelagem matemática deste problema clássico do eletromagnetismo, através de um modelo quase estático amplamente difundido, verificando os parâmetros de campo, espalhamento e absorção resultantes da interação, e por fim demonstrar a faixa de validade do método adotado. Posteriormente são comparadas as curvas de absorbância obtidas teoricamente com dados experimentais oferecidos por [11]. A importância deste trabalho para a área de eletromagnetismo aplicado é verificada como forma de contribuição de pesquisa para o desenvolvimento de dispositivos de sensoriamento e tratamento de partículas, servindo como método analítico para o entendimento do comportamento de parte dos fenômenos eletromagnéticos inerentes a este campo de desenvolvimento tecnológico.

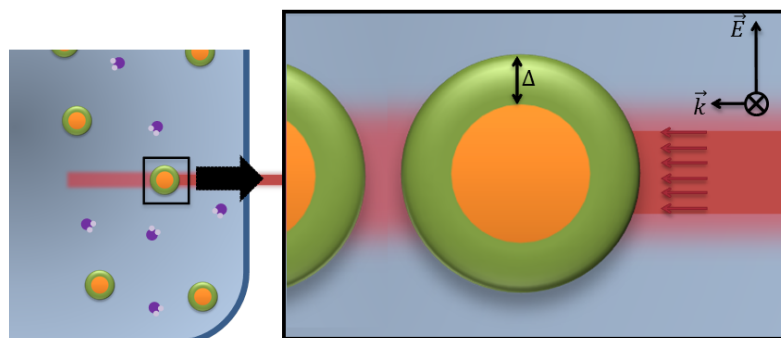


Figura 4: Análise proposta. Fonte: Autor.

Metodologicamente, o trabalho é iniciado apresentando a abordagem clássica da interação entre os metais e a luz, em seguida é apresentado o problema geral onde se definirá o potencial elétrico nas regiões internas e externas a uma partícula esférica, e posteriormente são apresentadas as soluções particulares para cada interação entre a estrutura e uma fonte fixa, em seguida é apresentado um breve resumo sobre o modelamento das características construtivas das nanopartículas em conjunto com os parâmetros de espalhamento e absorção. Subsequentemente é apresentado o método numérico utilizado no *COMSOL Multiphysics 5.2*, e finalmente, são apresentados os resultados. Para a fundamentação matemática, destacam-se as principais bibliografias consultadas na elaboração deste trabalho, *Mathematical Methods For Physicists* por G. B. Arfken, e H. J. Weber, e *Electromagnetic Theory* por J. A. Stratton. Para o embasamento teórico a respeito dos efeitos plasmônicos e parâmetros de dispersão foram utilizados *Plasmonics: Fundamentals and Applications* por S. A. Maier, e *Absorption and Scattering of Light by Small Particles* por C. F. Bohren e D. R. Huffman. A modelagem do problema geral de Laplace em coordenadas esférica com simetria azimutal está na forma do apêndice A, e o acervo teórico necessário para o entendimento de sistemas em coordenadas esféricas está no apêndice B como auxílio ao leitor. O trabalho encontra-se estruturado em seis capítulos:

O capítulo 1 é introdutório, nele são apresentados a justificativa, o objetivo geral, e a estruturação do trabalho.

O capítulo 2 apresenta o estudo base do fenômeno de superfícies plasmônicas polarizadas, escrevendo a resposta eletromagnética dos metais através das equações de Maxwell.

O capítulo 3 apresenta a solução para os problemas de valores de contorno para, uma esfera e uma carga pontual próxima, uma esfera e um campo uniforme, e uma esfera *core-shell* e um campo uniforme.

O capítulo 4 apresenta a modelagem matemática dos materiais utilizados neste trabalho, assim como o cálculo dos parâmetros de dispersão.

O capítulo 5 apresenta a modelagem numérica no *COMSOL Multiphysics 5.2*.

O capítulo 6 apresenta os resultados obtidos para o acervo modelado analiticamente, numericamente e comparações com dados experimentais, assim como a verificação da convergência do método.

Finalmente, são apresentadas as considerações finais a vista dos resultados obtidos. Ademais se encontram as referências bibliográficas utilizadas para a elaboração do trabalho e os códigos-fonte dos programas utilizados nas simulações em anexo no apêndice C.

2. INTERAÇÃO ELETROMAGNÉTICA NOS METAIS

Neste capítulo é realizada uma revisão sobre o estudo base do fenômeno de polarização de ondas plasmônicas, para isso, partiremos das equações de Maxwell que são a base fundamental da modelagem destas interações, introduzindo o conceito de excitação fundamental da condução da nuvem de elétrons livres em um corpo maciço, um volume plasmônico [4,5,13].

Os efeitos eletromagnéticos nos metais surgem de maneiras diferentes entre os regimes de micro-ondas (RF) e ondas óticas, e em estruturas metálicas na ordem de alguns nanômetros pode ser descrita sem a necessidade de introduzir mecânica quântica, uma vez que a alta densidade de portadores resulta em pequenos espaços dos níveis de energia dos elétrons em comparação com as excitações térmicas à temperatura ambiente [5].

Como já é conhecido, abaixo da faixa visível do espectro, os metais são altamente reflexivos impossibilitando a propagação de ondas eletromagnéticas em seu interior, desde que seja negligenciada a fração do campo que penetra o metal, neste regime, eles possuem condutividade muito elevada ($\sigma \rightarrow \infty$). No entanto, suas características comuns (alta refletividade e condutividade) passam a serem descartadas à medida que a frequência é aumentada para a faixa do espectro visível, acima do infravermelho, e finalmente, em frequências próximas ao ultravioleta, os metais apresentam características dielétricas relevantes [13]. Para metais nobres, como ouro e prata, a transição entre bandas eletrônicas leva a forte absorção no regime óptico, junto à mudança de fase da corrente induzida em relação ao campo incidente (onda plasmônica). Estas propriedades dispersivas podem ser descritas através de funções dielétricas complexas [5,13].

2.1 FUNÇÃO DIELÉTRICA DO GÁS DE ELÉTRONS LIVRES

A definição do modelo de permissividade complexa $\varepsilon(\omega)$ de um material pode ser encontrada a partir das equações de Maxwell, que na forma diferencial são (1) a (4).

$$\nabla \cdot \vec{D} = \rho_{ext} \quad (1)$$

$$\nabla \cdot \vec{B} = 0 \quad (2)$$

$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \quad (3)$$

$$\nabla \times \vec{H} = \vec{J}_{ext} + \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} \quad (4)$$

Para as condições de contorno aplicadas, a existência de correntes e cargas externas, $(\vec{J}_{ext}, \rho_{ext})$, assim como internas, (\vec{J}, ρ) , são modeladas no total por (5) e (6).

$$\rho_{total} = \rho_{ext} + \rho \quad (5)$$

$$\vec{J}_{total} = \vec{J}_{ext} + \vec{J} \quad (6)$$

Os quatro campos macroscópicos são ligados pelas relações construtivas (7) e (8) para materiais lineares, homogêneos e isotrópicos.

$$\vec{D} = \epsilon_0 \vec{E} + \vec{P} \quad (7)$$

$$\vec{H} = \frac{1}{\mu_0} \vec{B} - \vec{M} \quad (8)$$

Considerando meios não magnéticos, são eliminadas as contribuições da magnetização \vec{M} , reduzindo a representação do modelo ao efeito da polarização \vec{P} , que descreve o momento de dipolo elétrico por unidade de volume dentro do material. Este é causado pelo alinhamento dos dipolos microscópicos com o campo elétrico e está relacionado à densidade de cargas internas por (9) e (11) [5,12].

$$\nabla \cdot \vec{D} = \rho_{ext} \quad (9)$$

$$\nabla \cdot (\epsilon_0 \vec{E} + \vec{P}) = \rho_{total} - \rho \quad (10)$$

$$\nabla \cdot \vec{P} = -\rho \therefore \nabla \cdot \vec{E} = \frac{\rho_{total}}{\epsilon} \quad (11)$$

O princípio de conservação de cargas, $\nabla \cdot \vec{J} = -\frac{\partial \rho}{\partial t}$, requer que internamente a relação entre as cargas e a densidade de corrente seja (12).

$$\vec{J} = \frac{\partial \vec{P}}{\partial t} \quad (12)$$

A grande vantagem desta aproximação é que o campo elétrico macroscópico inclui todos os efeitos de polarização. A divergência do campo pode ser verificada em (13).

$$\nabla \cdot \vec{E} = \frac{\rho_{total}}{\epsilon_0} \quad (13)$$

Neste momento, a análise limita-se a um meio linear, isotrópico e não magnético. As relações construtivas são (14) e (15).

$$\vec{D} = \epsilon_0 \epsilon \vec{E} \quad (14)$$

$$\vec{B} = \mu_0 \mu \vec{H} \text{ (Com } \mu = 1) \quad (15)$$

Para o material em questão, podemos escrever as relações entre polarização, densidade de corrente e campo elétrico, e a equação da continuidade por (16), (17) e (18) [5,12].

$$\vec{D} = \epsilon_0 \vec{E} + \vec{P} \quad (16)$$

$$\vec{P} = \epsilon_0 (1 - \epsilon) \vec{E} = \epsilon_0 \chi \vec{E} \quad (17)$$

$$\vec{J} = \sigma \vec{E} \quad (18)$$

Em seguida, é mostrada a relação entre a permissividade ε e a condutividade σ , demonstrando que o fenômeno eletromagnético nos metais pode ser descrito por está relação para qualquer quantidade. Devemos levar em conta a não localidade no tempo e espaço pela relação linear generalizada para a permissividade e condutividade dadas por (19) e (20).

$$\vec{D}(\vec{r}, t) = \varepsilon_0 \int dt' d\vec{r}' \varepsilon(\vec{r} - \vec{r}', t - t') \vec{E}(\vec{r}', t') \quad (19)$$

$$\vec{J}(\vec{r}, t) = \int dt' d\vec{r}' \sigma(\vec{r} - \vec{r}', t - t') \vec{E}(\vec{r}', t') \quad (20)$$

que descrevem a resposta impulsiva para relação linear [5]. Assume-se, implicitamente, assumido que toda escala de comprimento são significativamente maiores que a rede espacial do material, assegurando homogeneidade, isto é, respostas impulsivas não dependem absolutamente das coordenadas espaciais e temporais, mas sim da diferença entre elas, que para uma resposta local, pode ser representada pela função de Dirac.

As equações (19) e (20) podem ser significativamente simplificadas pela transformada espectral de Fourier (21).

$$\mathfrak{F}\{x(t)\} = \int dt' d\vec{r}' e^{-j(\omega t - \vec{K} \cdot \vec{r})} \quad (21)$$

substituindo a convolução por uma simples operação algébrica [5].

Portanto, o campo é decomposto em ondas planas individuais componentes do vetor de onda \vec{K} com frequência angular ω no domínio de Fourier, as equações (19) e (20) tornam-se (22) e (23).

$$\vec{D}(\vec{K}, \omega) = \varepsilon_0 \varepsilon(\vec{K}, \omega) \vec{E}(\vec{K}, \omega) \quad (22)$$

$$\vec{J}(\vec{K}, \omega) = \sigma(\vec{K}, \omega) \vec{E}(\vec{K}, \omega) \quad (23)$$

Aplicando a transformada espectral de Fourier às equações (16) e (18), obtêm-se (24) e (25).

$$\vec{D}(\vec{K}, \omega) = \varepsilon_0 \vec{E}(\vec{K}, \omega) + \vec{P}(\vec{K}, \omega) \quad (24)$$

$$\vec{J}(\vec{K}, \omega) = -j\omega \vec{P}(\vec{K}, \omega) \quad (25)$$

Fazendo as devidas substituições de (22) a (23) em (24) a (25), as relações tornam-se (26) e (27).

$$\varepsilon_0 \vec{E}(\vec{K}, \omega) + \vec{P}(\vec{K}, \omega) = \varepsilon_0 \varepsilon(\vec{K}, \omega) \vec{E}(\vec{K}, \omega) \quad (26)$$

$$-j\omega \vec{P}(\vec{K}, \omega) = \sigma(\vec{K}, \omega) \vec{E}(\vec{K}, \omega) \quad (27)$$

Por fim, é proposta uma função que relaciona permissividade e condutividade em (28).

$$\varepsilon(\vec{K}, \omega) = 1 + j \frac{\sigma(\vec{K}, \omega)}{\omega \varepsilon_0} \quad (28)$$

Na interação entre a ondas EM com frequência na faixa do espectro visível e metais, a forma geral da resposta dielétrica $\varepsilon(\vec{K}, \omega)$ para o limite espacial local através de $\varepsilon(\vec{K} = 0, \omega) = \varepsilon(\omega)$. A simplificação é válida contanto que o comprimento de onda λ seja significativamente maior que as dimensões da estrutura, fazendo esta ser caracterizada como uma célula unitária, permitindo caminhos livres para os elétrons. Em geral, é o que ocorre em frequências na faixa do ultravioleta.

A equação (28) apresenta certa arbitrariedade na separação de cargas ligadas e livres, que é inteiramente devido à convenção adotada, em baixas frequências, $\varepsilon(\omega)$ é usualmente adotado para descrever a resposta de cargas ligadas a um campo condutor, levando a uma polarização elétrica, o qual descreve a contribuição de cargas livres para o fluxo de corrente. Em frequências ópticas, contudo, a distinção entre cargas livres e ligadas é desfocada, por exemplo, para semicondutores altamente dopados, a resposta para elétrons de valências ligados poderia ser agrupada em uma constante dielétrica estática $\delta\varepsilon$, e a resposta para elétrons de condução por $\sigma(\omega)$, levando a função dielétrica (28) à (29).

$$\varepsilon(\omega) = \delta\varepsilon + j \frac{\sigma(\vec{K}, \omega)}{\omega \varepsilon_0} \quad (29)$$

Em geral, $\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + j\varepsilon_2(\omega)$ e $\sigma(\omega) = \sigma_1(\omega) + j\sigma_2(\omega)$ são funções complexas dependentes da frequência. Em frequências ópticas, ε pode ser determinado experimentalmente através de estudos de refletividade e índice de refração complexo $\tilde{n}(\omega)$ do material (30).

$$\tilde{n}(\omega) = n(\omega) + j\kappa(\omega) = \sqrt{\varepsilon(\omega)} \quad (30)$$

Portanto:

$$\varepsilon_1(\omega) = n^2(\omega) - \kappa^2(\omega) \quad (31)$$

$$\varepsilon_2(\omega) = 2n(\omega)\kappa(\omega) \quad (32)$$

$$\kappa(\omega) = \frac{\varepsilon_2(\omega)}{2n(\omega)} \quad (33)$$

$$n^2(\omega) = \frac{\varepsilon_1(\omega) \pm \sqrt{\varepsilon_1^2(\omega) + \varepsilon_2^2(\omega)}}{2} \quad (34)$$

Onde κ é denominado coeficiente de extinção, e determina a absorção óptica de uma onda eletromagnética através de um meio. Este está ligado ao coeficiente de extinção da lei de Beer's, que descreve a atenuação exponencial da intensidade de um feixe de luz propagado através de um meio via (35) [5,13].

$$I(x) = I_0 e^{-\alpha_{ext}x} \quad (35)$$

$$\alpha_{ext}(\omega) = \frac{2\kappa(\omega)\omega}{c} \quad (36)$$

Portanto, a parte imaginária $\varepsilon_2(\omega)$ para funções dielétricas determina a quantidade extinta no meio, posteriormente verificaremos que esta é proveniente de absorção. Para $|\varepsilon_1(\omega)| \gg |\varepsilon_2(\omega)|$, a parte real $n(\omega)$ do índice de refração, quantificando a redução da velocidade de fase da onda propagante devido à polarização do material, é determinada principalmente por $\varepsilon_1(\omega)$. Voltando à expressão (29), verifica-se que a parte real de $\sigma(\omega)$ contribui para a quantidade absorvida, enquanto a parte imanaria contribui para a polarização.

Combinando as equações de Maxwell rotacionais, a solução para uma onda se propagando sem estímulos externos ($\vec{J}_{ext} = 0$) pode ser relacionada por (37) e (38).

$$-\frac{1}{\mu_0} \nabla \times \left(\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \right) = -\frac{1}{\mu_0} \nabla \times (\nabla \times \vec{E}) = \frac{\partial^2 \vec{D}}{\partial t^2} \quad (37)$$

$$\nabla \times (\nabla \times \vec{E}) = -\mu_0 \varepsilon \varepsilon_0 \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} \quad (38)$$

Através de propriedades da álgebra linear e aplicando a transformada de Fourier (21):

$$\vec{K} \left(\vec{K} \cdot \vec{E}(\omega, \vec{K}) \right) - K^2 \vec{E}(\omega, \vec{K}) = -\varepsilon(\omega, \vec{K}) \frac{\omega^2}{c^2} \vec{E}(\omega, \vec{K}) \quad (39)$$

lembrando que $c = 1/\sqrt{\varepsilon_0 \mu_0}$. Dois casos precisam ser distinguidos dependendo da direção de polarização do campo Elétrico, para ondas transversais e longitudinais. Para o primeiro caso, $\vec{K} \cdot \vec{E} = 0$, produzindo a relação de dispersão genérica (40).

$$K^2 = \varepsilon(\omega, \vec{K}) \frac{\omega^2}{c^2} \quad (40)$$

Para ondas longitudinais, implica em $\varepsilon(\vec{K}, \omega) = 0$, significando que as oscilações coletivas longitudinais ocorrem apenas em frequências correspondentes para zeros de $\varepsilon(\omega)$.

Em uma ampla faixa da frequência, as propriedades óticas dos metais podem ser explicadas pelo modelo de plasma, onde o gás de elétrons livres da densidade numérica " η " move-se contra um fluxo fixo de núcleos de íons positivos [5,13]. Para metais nobres, a transição de inter-banda ocorre no espectro visível, enquanto que para metais alcalinos, esta faixa se estende acima do ultravioleta, limitando a validade desta aproximação. No modelo de plasma, detalhes sobre a rede potencial e interações elétron-elétron não são levados em conta, ao invés disso, simplesmente são incorporados dentro dos efeitos da massa ótica " m " de cada elétron [5]. A oscilação dos elétrons em resposta ao campo eletromagnético aplicado e seu movimento são amortecidos via oscilações ocorridas com frequência característica $\gamma = \frac{1}{\tau}$, onde τ é conhecido como tempo de relaxação do gás de elétrons livres, com valores típicos na ordem de 10^{-14} s em temperatura ambiente, correspondendo a $\gamma = 100THz$ [5].

A partir da teoria clássica, uma simples expressão que descreve o movimento de um elétron a um campo elétrico externo é dada por (41) [5].

$$m \frac{d^2 \vec{x}}{dt^2} + m\gamma \frac{d\vec{x}}{dt} = -e\vec{E} \quad (41)$$

Assumindo a dependência harmônica de $E(t)e^{-j\omega t}$, (41) torna-se (43).

$$m(-j\omega)^2 \vec{X}(-j\omega) + m\gamma(-j\omega) \vec{X}(-j\omega) = -e\vec{E}(-j\omega) \quad (42)$$

$$\vec{X}(-j\omega) = \frac{e}{m(\omega^2 + j\omega\gamma)} \vec{E}(-j\omega) \quad (43)$$

lembrando que se a mudança para $E(t)e^{j\omega t}$ pode ser realizada a partir da multiplicação de j por -1 . O deslocamento dos elétrons contribui para a polarização macroscópica (45).

$$\vec{P} = -ne\vec{X} \quad (44)$$

$$\vec{P} = -\frac{ne^2}{m(\omega^2 + j\omega\gamma)} \vec{E} \quad (45)$$

Da relação (16), pode-se escrever (46).

$$\vec{D} = \varepsilon_0 \left(1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + j\omega\gamma} \right) \vec{E} \quad (46)$$

Onde $\omega_p^2 = \frac{ne^2}{m\varepsilon_0}$ é a frequência do plasma do gás de elétrons. Portanto, pode-se obter o resultado desejado, a função dielétrica do gás de elétrons (47).

$$\varepsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + j\omega\gamma} = 1 - \frac{\omega_p^2 \tau^2}{1 + \omega^2 \tau^2} + j \frac{\omega_p^2 \tau^2}{\omega(1 + \omega^2 \tau^2)} \quad (47)$$

A partir deste ponto verificaremos o comportamento do material na faixa de frequência $\omega < \omega_p$, onde o metal mantém suas características. Para frequências próximas de ω_p , o produto $\omega\tau \gg 1$, nos levando a negligenciar o amortecimento. Assim, (47) é predominantemente real, levando à função para o plasma de elétrons não amortecido (48).

$$\varepsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \quad (48)$$

Note que o comportamento dos metais nobres nesta faixa é completamente alterado pelas transições de inter-banda, que a partir deste ponto leva ao acréscimo de ε_2 . Para baixas frequências, onde $\omega\tau \ll 1$, conseqüentemente $\varepsilon_2 \gg \varepsilon_1$, as partes reais e imaginária do índice de refração tornam-se (50) [5].

$$n^2(\omega) \cong \kappa^2(\omega) \quad (49)$$

$$n(\omega) \cong \kappa(\omega) \cong \sqrt{\frac{\varepsilon_2(\omega)}{2}} = \sqrt{\frac{\omega_p^2 \tau}{2\omega}} \quad (50)$$

Note que nesta região os metais são principalmente absorventes, com coeficiente de absorção (51) dependente do termo de condutividade DC $\sigma_0 = n e^2 \tau / m = \omega_p^2 \tau \epsilon_0$.

$$\alpha = \sqrt{\frac{2\omega\omega_p^2\tau}{c^2}} = \sqrt{2\mu_0\sigma_0\omega} \quad (51)$$

A lei de Beer's da extinção (absorção) implica que para baixas frequências, os campos dentro dos metais decaem com característica exponencial $e^{-\frac{z}{\delta}}$, onde δ é a profundidade pelicular (52) [5,12].

$$\delta = \frac{2}{\alpha} = \frac{c}{\kappa\omega} = \sqrt{\frac{2}{\sigma_0\omega\mu_0}} \quad (52)$$

Uma discussão mais rigorosa pode ser feita relacionando o tamanho do caminho livre dos elétrons à profundidade pelicular, onde a mudança de outros parâmetros como temperatura pode resultar em fenômenos conhecidos como efeito de anomalia superficial [5].

Se for usado σ ao invés de ϵ para descrever a resposta dielétrica dos metais, reconhece-se que o regime absorvente é predominantemente função da parte real, onde a velocidade das cargas livres responde em fase com o campo incidente. Em um regime DC, efeitos de relaxação das cargas livres são, contudo, convenientemente descritos via condutividade DC real, enquanto que a resposta das cargas ligadas é colocada na constante dielétrica ϵ_B . Em altas frequências ($1 \leq \omega\tau \leq \omega_p\tau$), o índice de refração complexo é predominantemente imaginário (Levando o coeficiente de reflexão $R \cong 1$), fazendo σ adquirir a característica mais complexa, embasando o reconhecimento da ligação entre cargas livres e ligadas [14,15,17].

A partir deste ponto, verificaremos um importante exemplo de um metal real em um campo plasmônico. No modelo de elétrons livres, $\epsilon \rightarrow 1$ para $\omega \gg \omega_p$. Para metais nobres nesta faixa (onde a resposta é dominada por elétrons livres), uma extensão deste modelo é necessária, uma vez que a banda cheia próxima da superfície de Fermi provoca um ambiente altamente polarizado. Esta polarização residual, devido aos núcleos dos íons positivos em oposição, pode ser descrita pela adição do termo $\vec{P}_\infty = \epsilon_0(\epsilon_\infty - 1)\vec{E}$, onde \vec{P}_∞ agora representa exclusivamente a polarização devido aos elétrons livres. Portanto, este efeito é descrito pela constante dielétrica ϵ_∞ , que usualmente assume valores de $1 \leq \infty \leq 10$, e podemos escrever a função dielétrica na forma:

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_\infty - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + j\omega\gamma} \quad (53)$$

A validade desta afirmação é limitada para a descrição do gás de elétrons, e fora desta faixa começa a sofrer divergências por efeitos transições de inter-banda. O resultado obtido é instrutivo para ligar a função dielétrica do plasma de elétrons livres ao modelo clássico de Drude para condutividade AC do metal, $\sigma(\omega)$. Isto pode ser alcançado por reconhecer que a equação (41) pode ser escrita como (54).

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = -\frac{1}{\tau}\vec{p} - e\vec{E} \quad (54)$$

onde $\frac{d\vec{p}}{dt} = m \frac{d^2\vec{x}}{dt^2}$ é o momento de dipolo individual do gás de elétrons. A partir dos mesmos argumentos apresentados anteriormente, torna-se possível chegar a uma expressão da condutividade AC (55).

$$\sigma(\omega) = \frac{ne}{m} p(\omega) = \frac{\sigma_0}{1 - j\omega\tau} \quad (55)$$

Comparando as equações (47) e (56), obtém-se (56), como forma de comparação à (28).

$$\varepsilon(\omega) = 1 + j \frac{\sigma(\omega)}{\omega\varepsilon_0} \quad (56)$$

2.2 FENÔMENO PLASMÔNICO NOS METAIS

A relação demonstrada anteriormente é conhecida como modelo de Drude da resposta ótica dos metais. A significância física da excitação em ω_p pode ser entendida ao se considerar a oscilação da condução do gás de elétrons em oposição ao núcleo fixo positivo dos íons em uma placa de plasma. Esquemáticamente como indicado na Fig. 5.

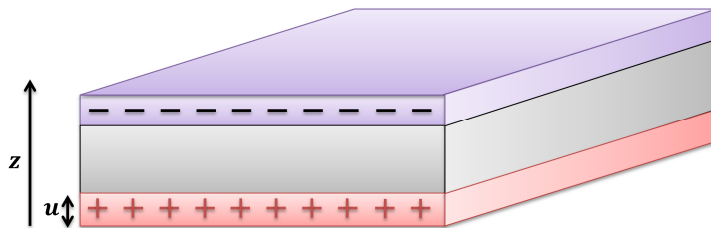


Figura 5 – Placa metálica polarizada. Fonte: Adaptado de [5].

Um deslocamento coletivo da nuvem de elétrons por uma distância u proporciona uma densidade superficial de cargas $\sigma = \pm neu$ nos limites da placa, é então estabelecido um campo elétrico homogêneo internamente $\vec{E} = \frac{neu}{\varepsilon_0} \hat{a}_z$. Assim os elétrons deslocados experimentam uma força restauradora, onde o movimento pode ser descrito pela equação do movimento (57), que em conjunto com a expressão do campo elétrico.

$$\frac{d^2\vec{u}}{dt^2} + \omega_p^2 u = 0 \quad (57)$$

A frequência do plasma ω_p pode assim ser reconhecida como frequência natural da oscilação do gás de elétrons livres. Note que nas definições temos assumido que os elétrons se movimentam em fase, assim ω_p corresponde à frequência de oscilação no limite do maior comprimento de onda, em $\vec{K} = 0$. O quanta destas cargas oscilantes é chamado plasmon (ou volume plasmônico). Devido à natureza longitudinal da excitação, o volume plasmônico não se acopla a ondas eletromagnéticas transversais e apenas pode ser excitado por impactos entre partículas. Outra consequência disto é que o seu decaimento ocorre apenas por transferência de energia através de elétrons isolados, um processo conhecido como amortecimento de Landau [5,14]. Experimentalmente, a frequência do plasma em metais típicos é determinada através de experimentos de espectroscopia por perda de elétrons, nestes elétrons são passados através de finas folhas metálicas. Na maioria dos metais, a frequência do plasma esta no regime ultravioleta, onde ω_p é na ordem de $5 - 15eV$, dependendo dos detalhes de banda da estrutura [2,14]. Em adição, é possível demonstrar que tal oscilação longitudinal também pode ser excitada em dielétricos, caso o qual os elétrons de valência oscilam coletivamente em relação aos núcleos dos íons. De fato, existe uma classe inteira de oscilações longitudinais em frequências mais altas com vetores de onda finitos.

Para alguns metais nobres, como ouro e prata, efeitos de inter-banda começam a ocorrer para energias correspondentes a $\lambda \cong 1\mu m$ [5]. Acima do limiar da borda da banda, fótons são eficientes em induzir transições de inter-banda, onde elétrons da banda inferior à superfície de Fermi são excitados para bandas mais altas. Teoricamente, este efeito pode ser descrito usando a mesma aproximação usada para banda de transição direta em semicondutores. Para fins práticos, a grande vantagem do modelo de Drude está na facilidade de ser incorporado no domínio temporal baseado em soluções numéricas pelas equações de Maxwell, tais como o método das diferenças finitas no domínio do tempo (FDTD), no cálculo direto de correntes induzidas. As inadequações para este modelo podem ser superadas resolvendo-se (58) [5,14].

$$m \frac{d^2 \vec{x}}{dt^2} + m\gamma \frac{d\vec{x}}{dt} + m\omega_0^2 \vec{x} = -e\vec{E} \quad (58)$$

Transições de inter-banda serão assim descritas usando a imagem clássica de um elétron ligado com frequência de ressonância ω_0 , podendo ser usado para calcular o resultado da polarização. Existem outras formas para se obter $\epsilon(\omega)$, e cada uma dessas formas recebe um termo oscilador de Lorentz na forma (59) do resultado dos elétrons livres [5,14].

$$\epsilon_{oscilador}(\omega) = \frac{A_i}{\omega_i^2 - \omega^2 - j\gamma_i\omega} \quad (59)$$

2.3 SUPERFÍCIE PLASMÔNICA POLARIZADA (SPP)

Como temos abordado até este ponto, para a excitação do fenômeno plasmônico é necessário que algumas condições construtivas e geométricas sejam atendidas. O fenômeno de superfície plasmônica polarizada (SPP) pode ser descrito como excitações eletromagnéticas propagantes na interface entre um dielétrico e um condutor, sendo este confinado e evanescente na direção perpendicular ao condutor. Estas ondas eletromagnéticas superficiais surgem através do acoplamento dos campos eletromagnéticos às oscilações do plasma de elétrons condutor.

A geometria mais simples, capaz de sustentar a SPP, é formada por uma única interface plana entre um dielétrico, não absorvente no espaço médio ($z < 0$) com permissividade $\varepsilon_2(\omega)$, e um condutor adjacente no espaço médio ($z > 0$) descrito pela função dielétrica $\varepsilon_1(\omega)$ (Fig. 6).

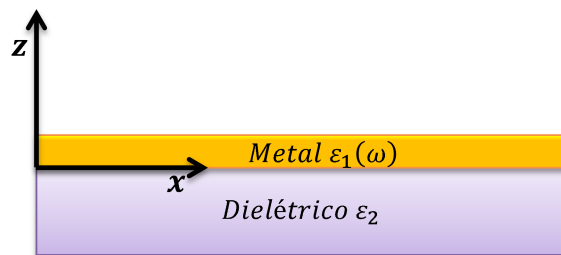


Figura 6 – Geometria para propagação SPP em uma simples interface metal-dielétrico. Fonte: Autor.

Uma das técnicas especiais utilizadas para produzir uma excitação SPP consiste na utilização de um prisma dielétrico acoplado à estrutura metal-dielétrico, sendo este incidido por um laser de comprimento de onda definido (Fig. 7). Esta estratégia possibilita análises tridimensionais da excitação SPP, excitadas por ondas esféricas [5,15,16].

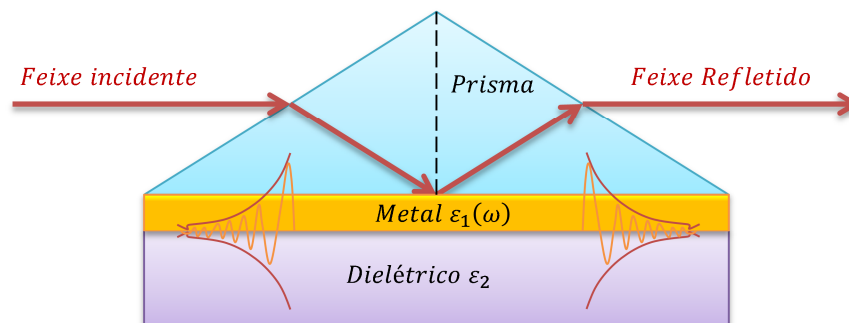


Figura 7 – Geometria para propagação SPP em uma simples interface metal-dielétrico acoplada a um prisma, excitada por ondas esféricas. Fonte: Autor.

Nesta geometria, o surgimento das ondas plasmônicas de superfície dependem diretamente do ângulo de incidência θ_i do feixe de luz, que para variados ângulos, faz surgir modos eletromagnéticos distintos na estrutura [5,15,16].

2.4 RESSONÂNCIA DE SUPERFÍCIE PLASMÔNICA LOCALIZADA (RSPL)

O fenômeno eletromagnético de Superfície Plasmônica Localizada (SPL) consiste em excitações não propagantes da condução de elétrons em nanoestruturas metálicas acopladas a campos eletromagnéticos. É verificado que estes modos surgem naturalmente do problema de espalhamento de uma pequena nanopartícula em um campo oscilante. A superfície curvada da partícula exerce uma força de restauração efetiva na condução de elétrons, onde a ressonância pode surgir, levando à amplificação do campo dentro e próximo à partícula, este é caracterizado como Ressonância de Superfície Plasmônica Localizada (RSPL). Outra consequência da superfície curvada é que a ressonância plasmônica pode ser excitada por iluminação direta da luz (Fig. 8), em contraste com a propagação SPP onde são aplicadas técnicas de acoplamento [2,5,8,9].

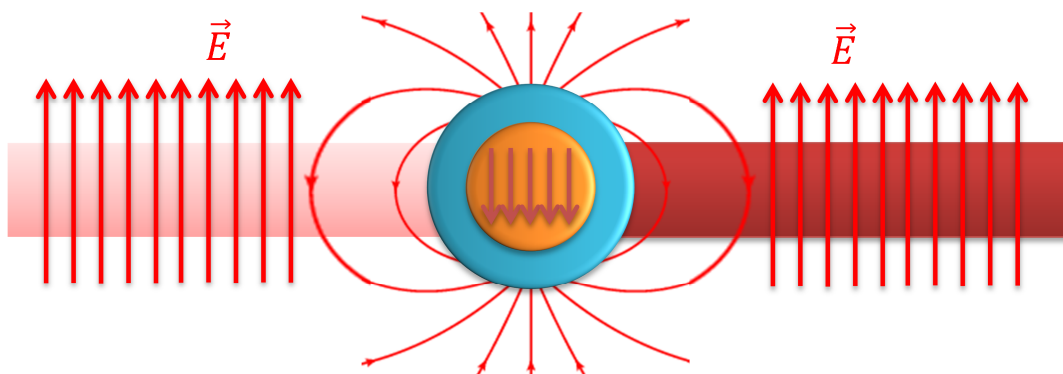


Figura 8 – Surgimento da RSPL em uma NPM. Fonte: Autor.

São feitos diversos estudos físicos sobre a excitação da RSPL nos metais, através de interações entre partículas metálicas e ondas eletromagnéticas, de maneira a encontrar a condição de ressonância da interação. Para metais nobres, como ouro e prata, a condição de ressonância é atendida na região visível do espectro eletromagnético, uma notável consequência disso é a coloração exibida por estas partículas na transmissão e reflexão da luz, devido à amplificação da absorção e espalhamento em função do tamanho da NPM (Fig. 9).

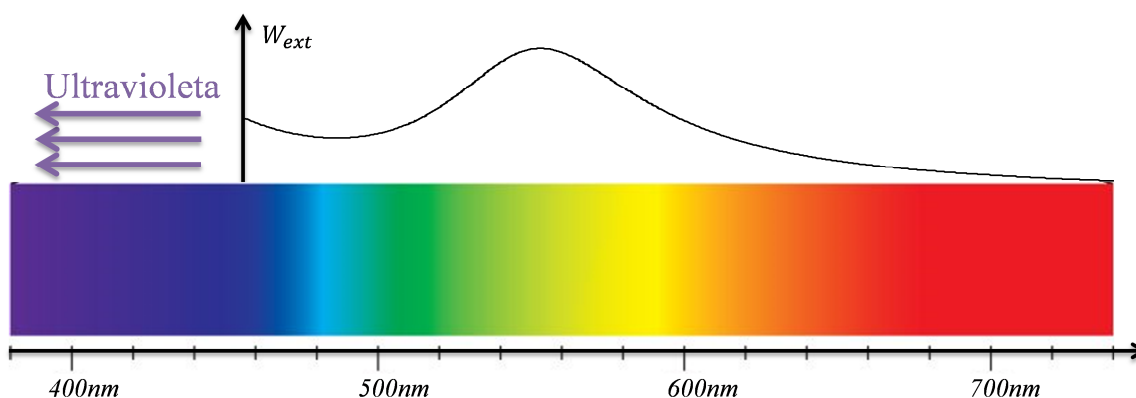


Figura 9 – Ressonância da RSPL para uma NPM de raio $R=50\text{nm}$. Fonte: Autor.

Este efeito pode ser visualizado em colóides contendo nanopartículas metálicas (Fig. 10), que dependendo de suas características construtivas e dimensionais exibem cores diferentes no espectro visível.



Figura 10 – Soluções contendo nanoesferas. Fonte: <http://nanocomposix.com/collections/gold-spheres>

Sobre estas partículas pode haver a presença de uma fina película protetora com a função de estabilizar quimicamente a estrutura e oferecer proteção mecânica (Fig. 11). Tendo em vista que o fenômeno de RSPL em nanopartículas varia com a geometria e dimensão das mesmas, a presença de camadas sobre estas partículas altera a posição espectral da RSPL, e por isso esta deve ser considerada em análises teóricas do fenômeno.

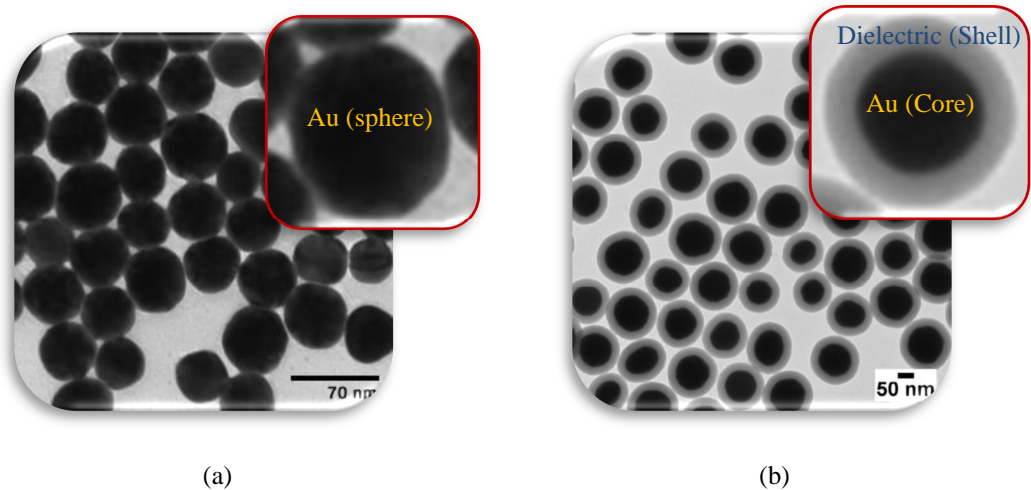


Figura 11 – Imagem nanoscópica: (a) Nanoesferas em colóide; (b) Nanoesferas do tipo *Core-Shell* em colóide.

Fonte: <http://nanocomposix.com/collections/gold-spheres>

Quando um feixe de luz interage com um conjunto de nanopartículas em um colóide com uma alta densidade, há o processo de espalhamento coletivo e inter-acoplamento eletromagnético entre os modos excitados por estas NPM. A análise deste fenômeno é por vezes complicada possuindo solução aproximada por métodos numéricos.

No entanto, considerando uma baixa densidade de partículas em suspensão em uma solução, o que ocorre em muitos casos, o inter-acoplamento e as interações entre as NPM deixam de ser efetivas, e o caso pode ser analisado por meio de uma solução analítica exata e na forma fechada.

Como uma partícula isolada, a solução geral para a interação de um campo eletromagnético e uma estrutura esférica é encontrada a partir das equações de Maxwell, nesta são excitados modos harmônicos provenientes da rápida mudança de fase que a partícula enxerga na interação com a onda eletromagnética. Este modelo é conhecido como espalhamento de Mie (Fig. 12), e possui em sua estrutura complexas equações de Bessel esféricas que correspondem ao modos harmônicos excitados.



Figura 12 – Interação eletromagnética pelo modelo de Mie. Fonte: Autor

Em contrapartida, a interação entre uma nanopartícula de dimensões R e um campo eletromagnético com comprimento de onda λ pode ser estudada através de uma aproximação simplificada da eletrostática desde que $\lambda \gg R$, ou seja, as dimensões da nanopartícula sejam muito menores que o comprimento de onda do campo incidente, excitando modos comuns como dipolar e uniforme que podem ser modelados sem a necessidade de funções complexas, esta aproximação é conhecida como espalhamento quase estático de Rayleigh (Fig. 13).

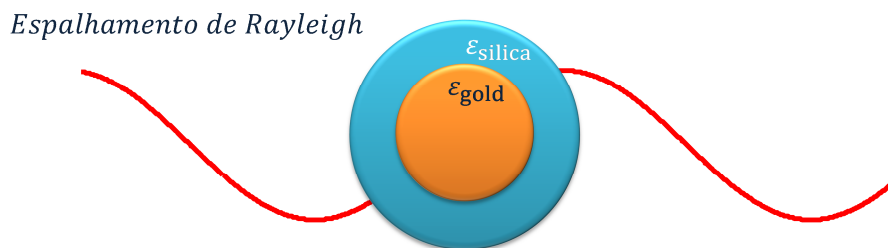


Figura 13 – Interação eletromagnética pelo modelo de Rayleigh. Fonte: Autor

A modelagem deste problema geral é feito a partir da equação diferencial parcial (EDP) de Laplace em coordenadas esféricas, e foi realizada analiticamente estando disponível na forma do apêndice A. Utilizando da solução geral, no próximo capítulo é apresentada a modelagem e solução do problema de valor de contorno para as interações propostas.

3. INTERAÇÃO ELETROMAGNÉTICA QUASE ESTÁTICA DE RAYLEIGH EM NANOESFERAS

Utilizando o resultado geral definido em (A108) (Apêndice A), partiremos agora para os problemas de valor de contorno com o intuito de determinar a resposta eletromagnética das interações, lembrando que o principal objetivo é determinar a interação entre uma partícula *core-shell* e um campo eletromagnético pelo modelo de Rayleigh. Como análises auxiliares, resolveremos primeiramente dois problemas bastante difundidos na teoria clássica, a interação entre uma esfera e o campo de uma carga pontual, e a interação entre uma esfera e um campo uniforme [20]. Obtidas estas análises, partiremos para o problema principal.

3.1 NANOESFERA DE OURO EM UM CAMPO PRODUZIDO POR UMA CARGA PONTUAL

Primeiramente, verificaremos a interação entre uma esfera de ouro, de raio a com permissividade $\varepsilon = \varepsilon_{gold}(\omega)$ cujo centro está localizado na origem do sistema de coordenadas, e uma carga elétrica pontual q localizada em $z = d_q$ com $d_q > a$ no eixo z , ambos estão em volta de um meio homogêneo e isotrópico com capacidade indutiva (permissividade) ε_m (Fig. 14). Desejamos determinar o potencial dentro e fora da esfera:

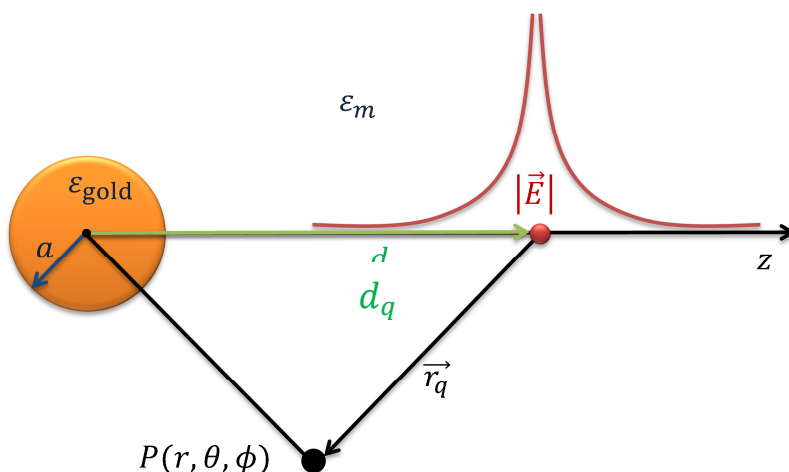


Figura 14 – Esfera de ouro interagindo com o campo de uma carga pontual. Fonte: Autor.

3.1.1 POTENCIAL ELÉTRICO PROVENIENTE DA INTERAÇÃO

Em qualquer ponto fora da esfera, $r > a$, o potencial resultante da interação será dado por (60), onde V_q é o potencial produzido pela carga pontual localizada em $z = d_q$, e V_e é o potencial produzido pela distribuição de cargas na esfera.

$$V_{out}(r, \theta) = V_q(r, \theta) + V_e(r, \theta) \quad (60)$$

Encontrar o potencial $V_e(r, \theta)$, se resume em resolver a equação de Laplace com simetria azimutal. A solução para esse problema foi determinada como foi explicado anteriormente. Podemos determinar o potencial elétrico em um ponto P a uma distância r_q de uma carga pontual, considerando que no infinito o potencial é zero, utilizando a expressão do campo elétrico produzido por uma carga pontual [12]:

$$\vec{E} = \frac{q}{4\pi\epsilon_m} \frac{\hat{a}_r}{r^2} \quad (61)$$

Segundo a referência [12], o potencial em qualquer ponto é a diferença de potencial entre esse ponto e um ponto escolhido, no qual o potencial é arbitrado como zero (referência). Definido que em um campo eletrostático o potencial não depende do caminho de integração, o potencial pode ser determinado aplicando-se a integral de linha ao campo elétrico na direção de \hat{a}_r :

$$V_q = \int_{\infty}^{r_q} \vec{E} \cdot d\vec{l} = \frac{q}{4\pi\epsilon_m} \frac{1}{r_q} \quad (62)$$

Deseja-se expressar o potencial V_q em função das coordenadas esféricas, para isso é aplicada a lei dos cossenos [19]:

$$r_q = \sqrt{r^2 + d_q^2 - 2rd_q \cos \theta} \quad (63)$$

Faremos agora duas análises para (63), retirando em evidência r de modo a extrair-lo da raiz para obter a situação $r > d_q$, e, em paralelo a esta estratégia, é retirado em evidência d_q para obter a situação $r < d_q$, de modo a se encontrar estruturas apropriadas para a análise do problema:

$$r_q = \begin{cases} r \sqrt{1 + \left(\frac{d_q}{r}\right)^2 - 2\left(\frac{d_q}{r}\right) \cos \theta}; \text{ para } r > d_q \\ d_q \sqrt{1 + \left(\frac{r}{d_q}\right)^2 - 2\left(\frac{r}{d_q}\right) \cos \theta}; \text{ para } r < d_q \end{cases} \quad (64)$$

Observe que o potencial elétrico proveniente da distribuição de cargas na esfera é dado na forma de um somatório de polinômios de Legendre, sendo assim, será conveniente buscar uma expressão semelhante já que o princípio da superposição será aplicado, de fato se analisarmos uma esfera no limite em que o raio se torna muito pequeno, a ideia do potencial elétrico através de polinômios de Legendre para uma carga pontual é visivelmente possível [20]. A partir disso, há um interesse pela estrutura:

$$(1 + t^2 - 2tx)^{-\frac{1}{2}} = \sum_{n=0}^{\infty} P_n(x)t^n \quad (65)$$

Fazendo as devidas substituições:

$$V_q = \begin{cases} \frac{q}{4\pi\epsilon_m r} \frac{1}{r} \left(1 + \left(\frac{d_q}{r} \right)^2 - 2 \left(\frac{d_q}{r} \right) \cos \theta \right)^{-\frac{1}{2}} ; \text{para } r > d_q \\ \frac{q}{4\pi\epsilon_m d_q} \frac{1}{d_q} \left(1 + \left(\frac{r}{d_q} \right)^2 - 2 \left(\frac{r}{d_q} \right) \cos \theta \right)^{-\frac{1}{2}} ; \text{para } r < d_q \end{cases} \quad (66)$$

A partir de (66), obtemos o potencial resultante pela carga pontual em duas situações:

$$V_q = \begin{cases} \frac{q}{4\pi\epsilon_m r} \frac{1}{r} \sum_{n=0}^{\infty} P_n(\cos \theta) \left(\frac{d_q}{r} \right)^n ; \text{para } r > d_q \\ \frac{q}{4\pi\epsilon_m d_q} \frac{1}{d_q} \sum_{n=0}^{\infty} P_n(\cos \theta) \left(\frac{r}{d_q} \right)^n ; \text{para } r < d_q \end{cases} \quad (67)$$

Perceba que a série de potencia para o caso $r > d_q$ diverge para $\left(\frac{d_q}{r} \right) > 1$, ou seja, ela diverge para $d_q > r$, e analogamente para o caso $d_q > r$ a série diverge para $\left(\frac{r}{d_q} \right) > 1$, que ocorre em $r > d_q$. Note que há divergência das duas séries no caso $d_q = r$, que é equivalente ao potencial em um ponto singular.

Nossa análise será feita na região onde se encontra a esfera centrada na origem, dessa forma o potencial de V_q será dado pela expressão $r < d_q$:

$$V_q = \frac{q}{4\pi\epsilon_m d_q} \frac{1}{d_q} \sum_{n=0}^{\infty} P_n(\cos \theta) \left(\frac{r}{d_q} \right)^n \quad \text{para } r < d_q \quad (68)$$

O potencial V_e proveniente da interação entre o corpo de geometria esférica é conhecido, e é dado na forma da solução da equação de Laplace (A108):

$$V_e(r, \theta) = \begin{cases} \sum_{n=0}^{\infty} [a_n r^n + b_n r^{-(n+1)}] P_n(\cos \theta) & \text{com } r < a \\ \sum_{n=0}^{\infty} [c_n r^n + d_n r^{-(n+1)}] P_n(\cos \theta) & \text{com } r > a \end{cases} \quad (69)$$

Determinou-se o potencial para todos os pontos no espaço, assim retiramos os termos que geram singularidade em nosso problema, dessa forma, eliminamos o termo $c_n r^n$ de nossa expressão, já que a ideia de potencial infinito em $r \rightarrow \infty$, é descartada. Podemos dizer também que a distribuição de cargas não gera potencial no infinito, assim:

$$V_e(r, \theta) = \sum_{n=0}^{\infty} [d_n r^{-(n+1)}] P_n(\cos \theta) \quad \text{com } r > a \quad (70)$$

Pelo princípio da superposição, fora da esfera com $r < d_q$, o potencial é dado por:

$$V_{out}(r, \theta) = \sum_{n=0}^{\infty} \left[\frac{q}{4\pi\epsilon_m d_q} \frac{1}{d_q} \left(\frac{r}{d_q} \right)^n + d_n r^{-(n+1)} \right] P_n(\cos \theta) \quad (71)$$

Dentro da esfera (meio com permissividade ϵ_{gold}), encontramos um ponto singular para V_e em $r = 0$, por isso os termos de b_n são nulos para todo n . O potencial dentro da esfera é dado por:

$$V_{in}(r, \theta) = \sum_{n=0}^{\infty} [a_n r^n] P_n(\cos \theta) \quad (72)$$

Dessa forma o potencial dentro e fora da esfera é dado por:

$$V(r, \theta) = \begin{cases} \sum_{n=0}^{\infty} [a_n r^n] P_n(\cos \theta) & \text{para } r < a \\ \sum_{n=0}^{\infty} \left[\frac{q}{4\pi\epsilon_m d_q} \frac{1}{d_q} \left(\frac{r}{d_q} \right)^n + d_n r^{-(n+1)} \right] P_n(\cos \theta) & \text{para } a < r < d_q \end{cases} \quad (73)$$

O campo elétrico é obtido a partir da operação de gradiente em coordenadas esféricas:

$$\vec{E}_{in} = E_{n_{in}} \hat{a}_r + E_{t_{in}} \hat{a}_\theta = -\nabla V_{in} = -\frac{\partial V_{in}}{\partial r} \hat{a}_r - \frac{1}{r} \frac{\partial V_{in}}{\partial \theta} \hat{a}_\theta \quad (74)$$

$$\vec{E}_{out} = E_{n_{out}} \hat{a}_r + E_{t_{out}} \hat{a}_\theta = -\nabla V_{out} = -\frac{\partial V_{out}}{\partial r} \hat{a}_r - \frac{1}{r} \frac{\partial V_{out}}{\partial \theta} \hat{a}_\theta \quad (75)$$

Aplicamos as condições de fronteira (76) e (77) na interface ouro-meio externo (meio um e meio dois) [12]:

$$p_s = \epsilon E_{n_{in}} - \epsilon_m E_{n_{out}} \quad , p_s = 0, \quad -\epsilon \frac{\partial V_{in}}{\partial r} \Big|_{r=a} = -\epsilon_m \frac{\partial V_{out}}{\partial r} \Big|_{r=a} \quad (76)$$

$$E_{t_{in}} = E_{t_{out}} \quad \therefore -\frac{1}{r} \frac{\partial V_{in}}{\partial \theta} \Big|_{r=a} = -\frac{1}{r} \frac{\partial V_{out}}{\partial \theta} \Big|_{r=a} \quad (77)$$

Onde $\epsilon = \epsilon_{gold}$. Derivando as expressões do potencial (71) e (72):

$$\frac{\partial V_{in}}{\partial r} = \sum_{n=0}^{\infty} [a_n n r^{n-1}] P_n(\cos \theta) \quad (78)$$

$$\frac{\partial V_{out}}{\partial r} = \sum_{n=0}^{\infty} \left[\frac{q}{4\pi\epsilon_m} n \frac{r^{n-1}}{d_q^{n+1}} - d_n (n+1) r^{-(n+2)} \right] P_n(\cos \theta) \quad (79)$$

$$\frac{\partial V_{in}}{\partial \theta} = -\sum_{n=0}^{\infty} [a_n r^n] P'_n(\cos \theta) \sin \theta \quad (80)$$

$$\frac{\partial V_{out}}{\partial \theta} = -\sum_{n=0}^{\infty} \left[\frac{q}{4\pi\epsilon_m} \frac{1}{d_q} \left(\frac{r}{d_q} \right)^n + d_n r^{-(n+1)} \right] P'_n(\cos \theta) \sin \theta \quad (81)$$

Conhecidas as derivadas parciais, aplicamos a condição de fronteira (77):

$$\frac{1}{r} \left(\sum_{n=0}^{\infty} [a_n r^n] P'_n(\cos \theta) \sin \theta \right)_{r=a} = \frac{1}{r} \left(\sum_{n=0}^{\infty} \left[\frac{q}{4\pi \varepsilon_m d_q} \frac{1}{\left(\frac{r}{d_q}\right)^n} + d_n r^{-(n+1)} \right] P'_n(\cos \theta) \sin \theta \right)_{r=a} \quad (82)$$

$$a_n = \frac{q}{4\pi \varepsilon_m d_q} \frac{1}{n+1} + d_n a^{-(2n+1)} \quad (83)$$

Pela condição (76):

$$-\varepsilon \left(\sum_{n=0}^{\infty} [a_n n r^{n-1}] P_n(\cos \theta) \right)_{r=a} = -\varepsilon_m \left(\sum_{n=0}^{\infty} \left[\frac{q}{4\pi \varepsilon_m} n \frac{r^{n-1}}{d_q^{n+1}} - d_n (n+1) r^{-(n+2)} \right] P_n(\cos \theta) \right)_{r=a} \quad (84)$$

$$a_n = \frac{q}{4\pi \varepsilon d_q} \frac{1}{n+1} - d_n \left(\frac{n+1}{n} \right) \left(\frac{\varepsilon_m}{\varepsilon} \right) a^{-(2n+1)} \quad (85)$$

Desejamos determinar a_n e d_n , para isso resolveremos o sistema de equações, igualando (83) e (85), e assim determinando os coeficientes:

$$a_n = \frac{q}{4\pi d_q} \frac{1}{n+1} \left\{ \frac{(2n+1)}{(n\varepsilon + (n+1)\varepsilon_m)} \right\} \quad (86)$$

$$d_n = \frac{q}{4\pi} a^n \left(\frac{a}{d_q} \right)^{n+1} \left[\frac{\varepsilon_m - \varepsilon}{\varepsilon_m} \right] \left[\frac{n}{n\varepsilon + (n+1)\varepsilon_m} \right] \quad (87)$$

Substituindo as constantes a_n e d_n em (71) e (72), o potencial dentro e fora da esfera na região $r < d_q$:

$$V(r, \theta) = \begin{cases} \frac{q}{4\pi \varepsilon_m d_q} \sum_{n=0}^{\infty} \left[\left(\frac{r}{d_q} \right)^n \left\{ \frac{(2n+1)\varepsilon_m}{(n\varepsilon + (n+1)\varepsilon_m)} \right\} \right] P_n(\cos \theta) & r < a \\ \frac{q}{4\pi \varepsilon_m} \sum_{n=0}^{\infty} \left[\left[\frac{n(\varepsilon_m - \varepsilon)}{n\varepsilon + (n+1)\varepsilon_m} \right] \frac{a^{2n+1}}{d_q^{n+1} r^{n+1}} + \frac{r^n}{d_q^{n+1}} \right] P_n(\cos \theta), & d_q > r > a \end{cases} \quad (88)$$

Onde o termo (68) pode ser isolado no campo potencial externo para representar a parcela de campo originado da carga pontual:

$$V_{out}(r, \theta) = V_e(r, \theta) + \frac{q}{4\pi \varepsilon_m} \sum_{n=0}^{\infty} \left[\left[\frac{n(\varepsilon_m - \varepsilon)}{n\varepsilon + (n+1)\varepsilon_m} \right] \frac{a^{2n+1}}{d_q^{n+1} r^{n+1}} \right] P_n(\cos \theta) \quad (89)$$

A segunda parcela da equação (196) representa o campo proveniente da indução de cargas, e é facilmente visível que ele se anula na ausência da carga pontual q .

3.1.2 CAMPO ELÉTRICO DENTRO E FORA DA ESFERA

A partir de (74), (75) e o potencial elétrico definido em (88), o campo elétrico dentro e fora da esfera na região $r < d$:

$$\vec{E}_{in}(r, \theta) = - \left[\sum_{n=0}^{\infty} n \frac{q}{4\pi\epsilon_m d_q^{n+1}} \left\{ \frac{(2n+1)\epsilon_m}{(n\epsilon + (n+1)\epsilon_m)} \right\} r^{n-1} P_n(\cos \theta) \right] \hat{a}_r \quad (90)$$

$$+ \left[\sum_{n=0}^{\infty} \frac{q}{4\pi\epsilon_m d_q^{n+1}} \left\{ \frac{(2n+1)\epsilon_m}{(n\epsilon + (n+1)\epsilon_m)} \right\} r^{n-1} P_n'(\cos \theta) \sin \theta \right] \hat{a}_\theta$$

$$\vec{E}_{out}(r, \theta) = \left[\frac{q}{4\pi\epsilon_m} \sum_{n=0}^{\infty} \left[\left[\frac{n(\epsilon_m - \epsilon)}{n\epsilon + (n+1)\epsilon_m} \right] \frac{(n+1)a^{2n+1}}{d_q^{n+1} r^{n+2}} - n \frac{r^{n-1}}{d_q^{n+1}} \right] P_n(\cos \theta) \right] \hat{a}_r \quad (91)$$

$$+ \left[\frac{q}{4\pi\epsilon_m} \sum_{n=0}^{\infty} \left[\left[\frac{n(\epsilon_m - \epsilon)}{n\epsilon + (n+1)\epsilon_m} \right] \frac{a^{2n+1}}{d_q^{n+1} r^{n+2}} + \frac{r^{n-1}}{d_q^{n+1}} \right] P_n'(\cos \theta) \sin \theta \right] \hat{a}_\theta$$

3.2 NANOESFERA DE OURO EM UM CAMPO UNIFORME

Analisaremos agora os efeitos da interação entre uma esfera de ouro, de raio a com permissividade $\epsilon = \epsilon_{gold}$ imersa em um meio dielétrico com constante dielétrica ϵ_m , e um campo elétrico uniforme constante de amplitude E_o na direção de \hat{a}_z (Fig. 15).

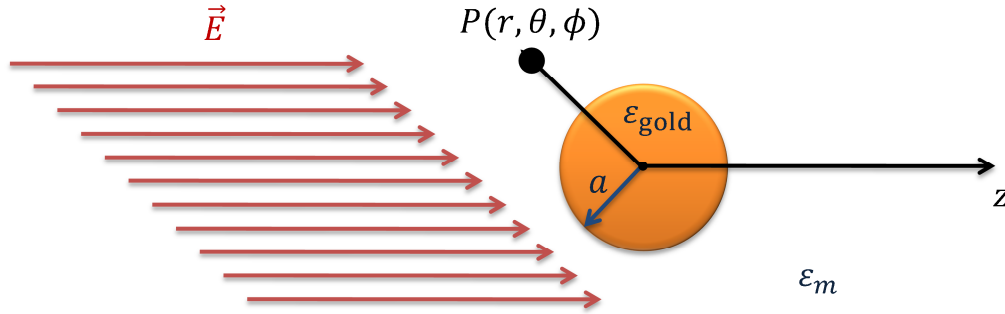


Figura 15 – Esfera de ouro interagindo com o campo uniforme orientando na direção \hat{a}_z . Fonte: Autor

3.2.1 POTENCIAL ELÉTRICO PROVENIENTE DA INTERAÇÃO

O potencial V_c devido ao campo uniforme é dado por:

$$V_c(z) = - \int_0^z \vec{E} \cdot d\vec{l} = - \int_0^z E_o dz = -E_o z \quad (92)$$

O potencial proveniente da distribuição de cargas na esfera já é conhecido, lembrando que estamos interessados em uma resposta analítica em $r \rightarrow \infty$ e $r \rightarrow 0$, dessa forma da equação (A108) com $b_n = 0$ na expressão $r < a$, e $a_n = 0$ em $r > a$, temos:

$$V_e(r, \theta) = \begin{cases} \sum_{n=0}^{\infty} [a_n r^n] P_n(\cos \theta) ; & r < a \\ \sum_{n=0}^{\infty} [b_n r^{-(n+1)}] P_n(\cos \theta) ; & r > a \end{cases} \quad (93)$$

Utilizando a relação entre coordenadas cartesianas e esféricas, (92) se torna:

$$V_c(r, \theta) = -E_o r \cos \theta \quad (94)$$

Aplicando o princípio da superposição aos campos resultantes em (93) e (94), os campos potenciais dentro e fora da esfera são dados por:

$$V_{in}(r, \theta) = \sum_{n=0}^{\infty} [a_n r^n] P_n(\cos \theta) \quad (95)$$

$$V_{out}(r, \theta) = -E_o r \cos \theta + \sum_{n=0}^{\infty} [b_n r^{-(n+1)}] P_n(\cos \theta) \quad (96)$$

De posse do campo elétrico, definido como o gradiente do campo potencial (95) e (96), aplicaremos as condições de fronteira na interface da esfera $r = a$:

$$p_s = \varepsilon E_{n_{in}} - \varepsilon_m E_{n_{out}} \quad , p_s = 0, \quad -\varepsilon \frac{\partial V_{in}}{\partial r} \Big|_{r=a} = -\varepsilon_m \frac{\partial V_{out}}{\partial r} \Big|_{r=a} \quad (97)$$

$$E_{t_{in}} = E_{t_{out}} \quad \therefore \quad -\frac{1}{r} \frac{\partial V_{in}}{\partial \theta} \Big|_{r=a} = -\frac{1}{r} \frac{\partial V_{out}}{\partial \theta} \Big|_{r=a} \quad (98)$$

Devemos primeiramente obter as derivadas parciais de (95) e (96).

$$\frac{\partial V_{in}}{\partial r} = \sum_{n=0}^{\infty} [a_n n r^{n-1}] P_n(\cos \theta) \quad (99)$$

$$\frac{\partial V_{out}}{\partial r} = -E_o \cos \theta - \sum_{n=0}^{\infty} [b_n (n+1) r^{-(n+2)}] P_n(\cos \theta) \quad (100)$$

$$\frac{\partial V_{in}}{\partial \theta} = - \sum_{n=0}^{\infty} [a_n r^n] P'_n(\cos \theta) \sin \theta \quad (101)$$

$$\frac{\partial V_{out}}{\partial \theta} = E_o r \sin \theta - \sum_{n=0}^{\infty} [b_n r^{-(n+1)}] P'_n(\cos \theta) \sin \theta \quad (102)$$

Aplicando a condição (98), referente ao campo tangencial à interface:

$$-\frac{1}{r} \left(- \sum_{n=0}^{\infty} [a_n r^n] P'_n(\cos \theta) \sin \theta \right) \Big|_{r=a} \quad (103)$$

$$= -\frac{1}{r} \left(E_o r \sin \theta - \sum_{n=0}^{\infty} [b_n r^{-(n+1)}] P'_n(\cos \theta) \sin \theta \right) \Big|_{r=a}$$

$$a_n = -\frac{E_o a^{1-n}}{P'_n(\cos \theta)} + b_n a^{-(2n+1)}, \quad n \geq 0 \quad (104)$$

Agora aplicando a condição (97), referente ao campo normal à interface:

$$-\varepsilon \left(\sum_{n=0}^{\infty} [a_n n r^{n-1}] P_n(\cos \theta) \right)_{r=a} \quad (105)$$

$$= -\varepsilon_m \left(-E_o \cos \theta - \sum_{n=0}^{\infty} [b_n (n+1) r^{-(n+2)}] P_n(\cos \theta) \right)_{r=a} \quad (106)$$

$$a_n = -\frac{E_o}{n a^{n-1}} \left(\frac{\varepsilon_m}{\varepsilon} \right) \left[\frac{\cos \theta}{P_n(\cos \theta)} \right] - b_n \left(\frac{\varepsilon_m}{\varepsilon} \right) \left(\frac{n+1}{n} \right) a^{-(2n+1)} \quad n \geq 0$$

Igualando as expressões (104) e (106), e resolvendo o sistema de equações, os coeficientes encontrados são:

$$a_n = E_o a^{1-n} \left\{ -\frac{1}{P'_n(\cos \theta)} + \left[\frac{n\varepsilon}{n\varepsilon + \varepsilon_m(n+1)} \right] \left[-\frac{1}{n} \left(\frac{\varepsilon_m}{\varepsilon} \right) \left[\frac{\cos \theta}{P_n(\cos \theta)} \right] + \frac{1}{P'_n(\cos \theta)} \right] \right\}, \quad n \geq 0 \quad (107)$$

$$b_n = E_o a^{n+2} \left[\frac{n\varepsilon}{n\varepsilon + \varepsilon_m(n+1)} \right] \left[-\frac{1}{n} \left(\frac{\varepsilon_m}{\varepsilon} \right) \left[\frac{\cos \theta}{P_n(\cos \theta)} \right] + \frac{1}{P'_n(\cos \theta)} \right] \quad n \geq 0 \quad (108)$$

Perceba que tanto a_n quanto b_n possuem dependência angular em θ , e isso não é desejável considerando que ambos são constantes arbitrárias para quaisquer r e θ , dessa forma buscaremos a melhor opção para eliminar tal dependência, uma rápida inspeção mostra que a única escolha possível para obter constantes arbitrárias é $n = 1$, ou seja, os coeficientes se anulam para $n \neq 1$:

$$a_1 = -E_o \left(\frac{3\varepsilon_m}{\varepsilon + 2\varepsilon_m} \right), \quad a_n = 0 \text{ para } n \neq 1 \quad (109)$$

$$b_1 = E_o a^3 \left[\frac{\varepsilon - \varepsilon_m}{\varepsilon + 2\varepsilon_m} \right], \quad b_n = 0 \text{ para } n \neq 1 \quad (110)$$

Expandindo (95) e (96):

$$V_{in}(r, \theta) = a_0 + a_1 r \cos \theta + \sum_{n=2}^{\infty} [a_n r^n] P_n(\cos \theta) \quad (111)$$

$$V_{out}(r, \theta) = -E_o r \cos \theta + \frac{b_0}{r} + \frac{b_1 \cos \theta}{r^2} + \sum_{n=2}^{\infty} [b_n r^{-(n+1)}] P_n(\cos \theta) \quad (112)$$

Em seguida substituindo os termos de a_n e b_n por (109) e (110), o potencial elétrico dentro é dado por:

$$V_{in}(r, \theta) = -E_o \left(\frac{3\varepsilon_m}{\varepsilon + 2\varepsilon_m} \right) r \cos \theta \quad (113)$$

$$V_{out}(r, \theta) = -E_o r \cos \theta + E_o a^3 \left[\frac{\varepsilon - \varepsilon_m}{\varepsilon + 2\varepsilon_m} \right] \frac{\cos \theta}{r^2} \quad (114)$$

3.2.2 MOMENTO DE DIPOLO E POLARIZABILIDADE

A estrutura encontrada em (114) é conhecida na eletrostática possuindo as características de um dipolo infinitesimal induzido, desta forma definiremos o momento de dipolo para uma esfera em um campo constante por (115), orientado na direção de \hat{a}_z , na mesma direção do campo incidente [5]:

$$p = 4\pi\epsilon_m E_o a^3 \left[\frac{\epsilon - \epsilon_m}{\epsilon + 2\epsilon_m} \right] \quad (115)$$

É útil definir para um momento de dipolo na estrutura (115) a polarizabilidade de uma esfera em um campo uniforme [5]:

$$\alpha = 4\pi\epsilon_m a^3 \left[\frac{\epsilon - \epsilon_m}{\epsilon + 2\epsilon_m} \right] \quad (116)$$

Desta forma o momento de dipolo pode ser reescrito como:

$$\vec{p} = \alpha E_o \hat{a}_z = \alpha \vec{E}_o \quad (117)$$

Substituindo em (114):

$$V_{out}(r, \theta) = -E_o r \cos \theta + \frac{\vec{p} \cdot \vec{r}}{4\pi\epsilon_m r^3} \quad (118)$$

Finalmente, o potencial elétrico em qualquer ponto do espaço é dado por:

$$V(r, \theta) = \begin{cases} -E_o \left(\frac{3\epsilon_m}{\epsilon + 2\epsilon_m} \right) r \cos \theta & \text{para } r < a \\ -E_o r \cos \theta + \frac{\vec{p} \cdot \vec{r}}{4\pi\epsilon_m r^3} & \text{para } r > a \end{cases} \quad (119)$$

3.2.3 CAMPO ELÉTRICO RESULTANTE DA INTERAÇÃO

Definiu-se a distribuição do campo elétrico por meio da operação de gradiente esférico:

$$\vec{E}_{in}(r, \theta) = - \left\{ -E_o \left(\frac{3\epsilon_m}{\epsilon + 2\epsilon_m} \right) \left[\cos \theta \hat{a}_r - \frac{1}{r} r \sin \theta a_\theta \right] \right\} \quad (120)$$

Pela relação $\hat{a}_z = \cos \theta \hat{a}_r - \sin \theta a_\theta$:

$$\vec{E}_{in}(r, \theta) = \left(\frac{3\epsilon_m}{\epsilon + 2\epsilon_m} \right) \vec{E}_o \quad (121)$$

Para o campo elétrico fora da esfera:

$$\vec{E}_{out}(r, \theta) = - \left\{ -E_o [\cos \theta \hat{a}_r - \sin \theta a_\theta] + \frac{p}{4\pi\epsilon_m} \left[-\frac{2}{r^3} \cos \theta \hat{a}_r - \frac{1}{r} \frac{1}{r^2} \sin \theta \hat{a}_\theta \right] \right\} \quad (122)$$

$$\vec{E}_{out}(r, \theta) = E_o [\cos \theta \hat{a}_r - \sin \theta a_\theta] + \frac{p}{4\pi\epsilon_m r^3} [2 \cos \theta \hat{a}_r + \sin \theta \hat{a}_\theta] \quad (123)$$

$$\vec{E}_{out}(r, \theta) = E_o[\cos \theta \hat{a}_r - \sin \theta a_\theta] + \frac{1}{4\pi\epsilon_m r^3} [2|p||\hat{a}_r| \cos \theta \hat{a}_r + |p||\hat{a}_r| \sin \theta a_\theta] \quad (124)$$

Da relação $\sin \theta a_\theta = \cos \theta \hat{a}_r - \hat{a}_z$:

$$\vec{E}_{out}(r, \theta) = E_o[\cos \theta \hat{a}_r - \sin \theta a_\theta] + \frac{1}{4\pi\epsilon_m r^3} [2|p||\hat{a}_r| \cos \theta \hat{a}_r + |p||\hat{a}_r|(\cos \theta \hat{a}_r - \hat{a}_z)] \quad (125)$$

$$\vec{E}_{out}(r, \theta) = E_o[\cos \theta \hat{a}_r - \sin \theta a_\theta] + \frac{1}{4\pi\epsilon_m r^3} [2|p||\hat{a}_r| \cos \theta \hat{a}_r + |p||\hat{a}_r| \cos \theta \hat{a}_r - |p||\hat{a}_r|\hat{a}_z] \quad (126)$$

$$\vec{E}_{out}(r, \theta) = E_o \hat{a}_z + \frac{1}{4\pi\epsilon_m r^3} [2\hat{a}_r(\vec{p} \cdot \hat{a}_r) + (\vec{p} \cdot \hat{a}_r)\hat{a}_r - \vec{p}] \quad (127)$$

$$\vec{E}_{out}(r, \theta) = \vec{E}_o + \frac{[3\hat{a}_r(\vec{p} \cdot \hat{a}_r) - \vec{p}]}{4\pi\epsilon_m r^3} \quad (128)$$

Dessa forma o campo elétrico é definido por:

$$\vec{E}(r, \theta) = \begin{cases} \left(\frac{3\epsilon_m}{\epsilon + 2\epsilon_m}\right) \vec{E}_o & \text{para } r < a \\ \vec{E}_o + \frac{[3\hat{a}_r(\vec{p} \cdot \hat{a}_r) - \vec{p}]}{4\pi\epsilon_m r^3} & \text{para } r > a \end{cases} \quad (129)$$

O campo elétrico externo possui componentes na direção radial \hat{a}_r , porém, desejamos encontrar o campo elétrico orientado na direção de \hat{a}_z . Utilizando a transformação de coordenadas:

$$\vec{E}_{in}(r, \theta) = E_o \left(\frac{3\epsilon_m}{\epsilon + 2\epsilon_m}\right) \hat{a}_z \quad (130)$$

$$\vec{E}_{out}(r, \theta) = \left\{ \frac{p}{4\pi\epsilon_m r^3} 3 \cos \theta \sin \theta \cos \phi \right\} \hat{a}_x + \left\{ \frac{p}{4\pi\epsilon_m r^3} 3 \cos \theta \sin \theta \sin \phi \right\} \hat{a}_y + \left\{ E_o + \frac{p}{4\pi\epsilon_m r^3} [3 \cos^2 \theta - 1] \right\} \hat{a}_z \quad (131)$$

3.2.4 APROXIMAÇÃO DO CAMPO DE UMA CARGA PONTUAL A UM CAMPO UNIFORME

Até aqui, verificamos a interação entre dois tipos de campos e uma esfera, sendo estes o campo de uma carga pontual e o campo uniforme de amplitude fixa. Para o primeiro caso, se afastarmos a carga pontual ao longo do eixo \hat{a}_z fazendo $d \gg a$ (Fig. 16), logo o campo da carga não interagirá com a partícula, porém, se pudermos aumentar a amplitude da carga q de maneira a compensar a distância, em algum momento o campo produzido pela carga se tornará aproximadamente invariante com a distância, recaindo no problema uniforme:

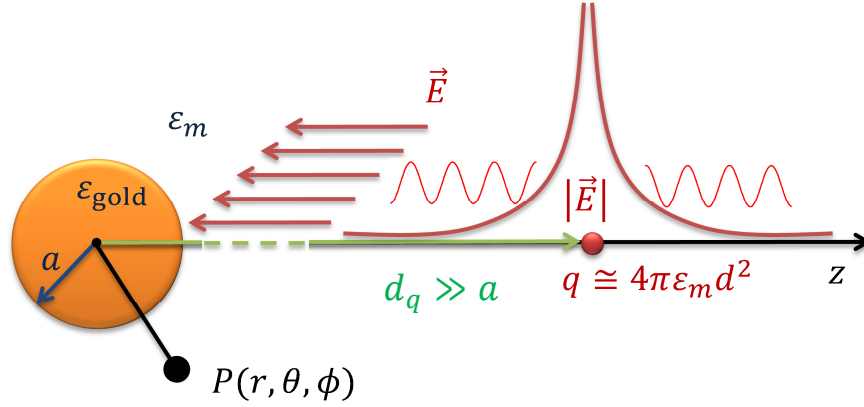


Figura 16 – Esfera de ouro interagindo com o campo de uma carga pontual distante. Fonte: Autor

Podemos verificar isso expandindo os termos dos somatórios em (88):

$$V_{in}(r, \theta) = \frac{1}{4\pi\epsilon_m} \frac{q}{d_q} + \frac{1}{4\pi\epsilon_m} \frac{q}{d_q^2} \left[\frac{3\epsilon_m}{(\epsilon + 2\epsilon_m)} \right] r \cos \theta \quad (132)$$

$$+ \frac{1}{4\pi\epsilon_m} \frac{q}{d_q^3} \left[\frac{5\epsilon_m}{(2\epsilon + 3\epsilon_m)} \right] r^2 P_2(\cos \theta) + \dots$$

$$V_{out}(r, \theta) = \frac{q}{4\pi\epsilon_m} \frac{1}{d_q} + \frac{q}{4\pi\epsilon_m} \frac{1}{d_q^2} r \cos \theta + \frac{q}{4\pi\epsilon_m} \frac{1}{d_q^2} \left[\frac{(\epsilon_m - \epsilon)}{\epsilon + 2\epsilon_m} \right] \frac{a^3}{r^2} \cos \theta \quad (133)$$

$$+ \frac{q}{4\pi\epsilon_m} \frac{1}{d_q^3} r^2 P_2(\cos \theta) + \frac{q}{4\pi\epsilon_m} \frac{1}{d_q^3} \left[\frac{2(\epsilon_m - \epsilon)}{2\epsilon + 3\epsilon_m} \right] \frac{a^5}{r^3} P_2(\cos \theta) + \dots$$

Fazendo a aproximação $q \cong 4\pi\epsilon_m d_q^2 \gg a$, é fácil verificar que os termos do somatório com $n \geq 2$ são anulados, restando apenas:

$$V_{in}(r, \theta) = \frac{1}{4\pi\epsilon_m} \frac{q}{d_q} + \frac{1}{4\pi\epsilon_m} \frac{q}{d_q^2} \left[\frac{3\epsilon_m}{(\epsilon + 2\epsilon_m)} \right] r \cos \theta \quad (134)$$

$$V_{out}(r, \theta) = \frac{q}{4\pi\epsilon_m} \frac{1}{d_q} + \frac{q}{4\pi\epsilon_m} \frac{1}{d_q^2} r \cos \theta + \frac{q}{4\pi\epsilon_m} \frac{1}{d_q^2} \left[\frac{(\epsilon_m - \epsilon)}{\epsilon + 2\epsilon_m} \right] \frac{a^3}{r^2} \cos \theta \quad (135)$$

Se fizermos $E_0 = \frac{1}{4\pi\epsilon_m} \frac{q}{d_q^2}$:

$$V_{in}(r, \theta) = d_q + E_0 \left[\frac{3\epsilon_m}{(\epsilon + 2\epsilon_m)} \right] r \cos \theta \quad (136)$$

$$V_{out}(r, \theta) = d_q + E_0 r \cos \theta + E_0 \left[\frac{(\epsilon_m - \epsilon)}{\epsilon + 2\epsilon_m} \right] \frac{a^3}{r^2} \cos \theta \quad (137)$$

Note que as expressões encontradas são praticamente iguais aos campos potenciais definidos para a interação entre uma partícula e um campo uniforme, com exceção do termo d_q . Este termo pode ser enxergado como uma grande componente dc que se soma ao campo potencial, contudo, ao aplicarmos a operação de gradiente ao campo potencial, esta componente será anulada tendo em vista que não varia com o espaço. Dessa forma, o campo elétrico resultante da aproximação será equivalente ao campo resultante na interação envolvendo o campo uniforme de amplitude E_0 .

3.2.5 CAMPO ELETROMAGNÉTICO NA APROXIMAÇÃO QUASE ESTÁTICA DO PROBLEMA

Até este ponto, temos lidado com campos eletrostáticos, cujo quais vamos deixar de lado e voltaremos a atenção para campos eletromagnéticos irradiados sobre pequenas partículas esféricas. Para uma esfera com $r \ll \lambda$, é válida a representação na forma dipolar de aproximação quase estática, ou seja, a partícula praticamente enxerga a fase do campo incidido como constante. Logo, torna-se possível utilizar todas as considerações feitas anteriormente para campos eletrostáticos, negligenciando o retardo espacial sobre o volume da partícula [8,9].

Sobre a incidência de uma onda plana de amplitude E_0 (138) é induzido um momento dipolar oscilante (139) sobre o volume da nanopartícula, com (116) como a polarizabilidade do resultado eletrostático [5]:

$$\vec{E}(r, \theta, t) = Re[E_0 \hat{a}_z e^{j\omega t}] \quad (138)$$

$$\vec{p} = Re[\alpha E_0 \hat{a}_z e^{j\omega t}] \quad (139)$$

Dessa forma o campo elétrico (129) pode ser reescrito como variante harmonicamente no tempo:

$$\vec{E}(r, \theta, t) = Re \left[e^{j\omega t} \begin{cases} \left(\frac{3\varepsilon_m}{\varepsilon + 2\varepsilon_m} \right) \vec{E}_o & \text{para } r < a \\ \vec{E}_o + \frac{[3\hat{a}_r(\vec{p} \cdot \hat{a}_r) - \vec{p}]}{4\pi\varepsilon_m r^3} & \text{para } r > a \end{cases} \right] \quad (140)$$

A partir de (140) é verificado que o campo total fora da partícula ($r > b$) pode ser representado pela soma da radiação de um dipolo hertziano equivalente somado ao campo E_0 da onda plana incidente. A partir desta equação, obtém-se através das equações de Maxwell o campo $H(t)$ harmonicamente oscilante nas proximidades da partícula [5,21,22]:

$$\vec{H} = Re \left[e^{j\omega t} \begin{cases} 0 & \text{para } r < a \\ j\omega \frac{1}{4\pi} (\hat{a}_r \times \vec{p}) \frac{1}{r^2} & \text{para } r > a \end{cases} \right] \quad (141)$$

Ou seja:

$$\vec{H}(r, \theta, \phi, t) = Re \left[e^{j\omega t} \begin{cases} 0 & \text{para } r < a \\ j\omega \frac{\rho}{4\pi r^2} \sin \theta [\hat{a}_x \sin \phi - \hat{a}_y \cos \phi] & \text{para } r > a \end{cases} \right] \quad (142)$$

Note que o campo magnético não possui componente na direção de \hat{a}_z .

As considerações feitas para uma onda plana também são validas para a seção anterior, onde temos uma carga radiante harmonicamente, a uma distância relativamente grande, radiando ondas planas que interagem com a NPM, acarretando em modos dipolares.

3.3 NANOPARTÍCULA DO TIPO CORE-SHELL EM CAMPO UNIFORME

O core-shell é caracterizado por duas esferas concêntricas na origem, sendo a esfera interna o núcleo de raio a , e a esfera externa a casca de raio b e espessura $\Delta = b - a$. O núcleo da nanopartícula é de ouro com permissividade $\varepsilon_1 = \varepsilon_{gold}(\omega)$ e a casca é um dielétrico de sílica com permissividade $\varepsilon_2 = \varepsilon_{silica}$, sendo esta imersa em meio homogêneo, não absorvente e isotrópico de permissividade ε_m , onde existe uma onda plana na direção do eixo z com amplitude E_0 que incide sobre a partícula (Fig. 17), harmonicamente:

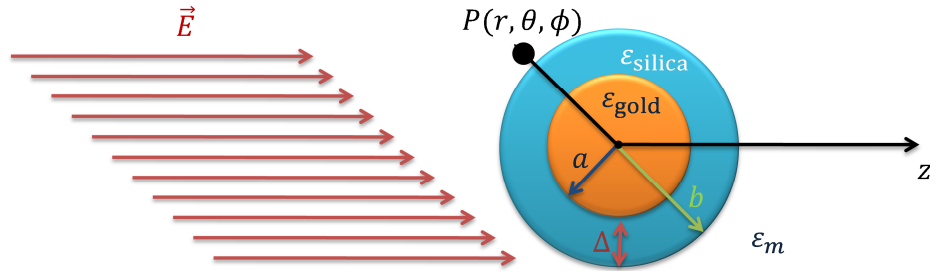


Figura 17 – Core-Shell em um campo homogêneo e uniforme. Fonte: Autor

Desejamos analisar as alterações provocadas ao campo elétrico, provenientes da distribuição de cargas sobre a esfera. Para isso, definiremos o potencial dado nas regiões internas e externas à partícula.

3.3.1 POTENCIAL ELÉTRICO NAS REGIÕES DA PARTÍCULA

Da equação (A108), o potencial elétrico proveniente das esferas concêntricas nas regiões do sistema de coordenadas será dado por:

$$V_1(r, \theta) = \sum_{n=0}^{\infty} [a_n r^n + b_n r^{-(n+1)}] P_n(\cos \theta) \quad \text{para } r < a \quad (143)$$

$$V_2(r, \theta) = \sum_{n=0}^{\infty} [c_n r^n + d_n r^{-(n+1)}] P_n(\cos \theta) \quad \text{para } a < r < b \quad (144)$$

$$V_3(r, \theta) = \sum_{n=0}^{\infty} [e_n r^n + f_n r^{-(n+1)}] P_n(\cos \theta) \quad \text{para } r > b \quad (145)$$

De acordo com as definições para o potencial elétrico de um campo uniforme orientado na direção de \hat{a}_z (92), no limite em que $r \rightarrow \infty$ o potencial elétrico em (145) deve obedecer:

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \nabla V_3(r, \theta) = E_0 \hat{a}_z \quad (146)$$

Dessa forma:

$$\lim_{r \rightarrow \infty} V_3(r, \theta) = \lim_{r \rightarrow \infty} \sum_{n=0}^{\infty} [e_n r^n + f_n r^{-(n+1)}] P_n(\cos \theta) = E_0 r \cos \theta \quad (147)$$

$$e_n = \begin{cases} E_0; & n = 1 \\ 0; & n \neq 1 \end{cases} \quad (148)$$

Perceba que a equação (143) apresenta singularidade na origem, o que é indesejável, este problema pode ser facilmente resolvido fazendo $b_n = 0$, dessa forma, em posse de (148) o potencial nas regiões do sistema esférico será:

$$V(r, \theta) = \begin{cases} \sum_{n=0}^{\infty} [a_n r^n] P_n(\cos \theta) & \text{para } r < a \\ \sum_{n=0}^{\infty} [c_n r^n + d_n r^{-(n+1)}] P_n(\cos \theta) & \text{para } a < r < b \\ -E_o r \cos \theta + \sum_{n=0}^{\infty} [f_n r^{-(n+1)}] P_n(\cos \theta) & \text{para } r > b \end{cases} \quad (149)$$

Desejamos determinar as constantes arbitrárias, para isso, aplicaremos as condições de fronteira definidas de (150) a (153), nas interfaces $r = a$ e $r = b$:

$$-\varepsilon_1 \frac{\partial V_1}{\partial r}_{r=a} = -\varepsilon_2 \frac{\partial V_2}{\partial r}_{r=a} \quad (150)$$

$$-\frac{1}{r} \frac{\partial V_1}{\partial \theta}_{r=a} = -\frac{1}{r} \frac{\partial V_2}{\partial \theta}_{r=a} \quad (151)$$

$$-\varepsilon_2 \frac{\partial V_2}{\partial r}_{r=b} = -\varepsilon_m \frac{\partial V_3}{\partial r}_{r=b} \quad (152)$$

$$-\frac{1}{r} \frac{\partial V_2}{\partial \theta}_{r=b} = -\frac{1}{r} \frac{\partial V_3}{\partial \theta}_{r=b} \quad (153)$$

As derivadas parciais de (149) em r e θ :

$$\frac{\partial V_1}{\partial r} = \sum_{n=0}^{\infty} [a_n n r^{n-1}] P_n(\cos \theta), \quad \frac{\partial V_2}{\partial r} = \sum_{n=0}^{\infty} [c_n n r^{n-1} - d_n (n+1) r^{-(n+2)}] P_n(\cos \theta), \quad (154)$$

$$\frac{\partial V_3}{\partial r} = -E_o \cos \theta - \sum_{n=0}^{\infty} [f_n (n+1) r^{-(n+2)}] P_n(\cos \theta)$$

$$\frac{\partial V_1}{\partial \theta} = -\sum_{n=0}^{\infty} [a_n r^n] P'_n(\cos \theta) \sin \theta, \quad \frac{\partial V_2}{\partial \theta} = -\sum_{n=0}^{\infty} [c_n r^n + d_n r^{-(n+1)}] P'_n(\cos \theta) \sin \theta, \quad (155)$$

$$\frac{\partial V_3}{\partial \theta} = E_o r \sin \theta - \sum_{n=0}^{\infty} [f_n r^{-(n+1)}] P'_n(\cos \theta) \sin \theta$$

Aplicando as condições (150), do campo normal, e (151), do campo tangencial, na interface $r = a$:

$$\begin{aligned} -\varepsilon_1 \left(\sum_{n=0}^{\infty} [a_n n r^{n-1}] P_n(\cos \theta) \right)_{r=a} \\ = -\varepsilon_2 \left(\sum_{n=0}^{\infty} [c_n n r^{n-1} - d_n (n+1) r^{-(n+2)}] P_n(\cos \theta) \right)_{r=a} \end{aligned} \quad (156)$$

$$a_n = \left(\frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1}\right) \left(c_n - d_n \left(\frac{n+1}{n}\right) a^{-(2n+1)}\right) \quad (157)$$

$$-\frac{1}{r} \left(- \sum_{n=0}^{\infty} [a_n r^n] P'_n(\cos \theta) \sin \theta \right)_{r=a} \quad (158)$$

$$= -\frac{1}{r} \left(- \sum_{n=0}^{\infty} [c_n r^n + d_n r^{-(n+1)}] P'_n(\cos \theta) \sin \theta \right)_{r=a}$$

$$a_n = c_n + d_n a^{-(2n+1)} \quad (159)$$

Aplicando as condições (152), do campo normal, e (153) do campo tangencial, na interface $r = b$:

$$-\varepsilon_2 \left(\sum_{n=0}^{\infty} [c_n n r^{n-1} - d_n (n+1) r^{-(n+2)}] P_n(\cos \theta) \right)_{r=b} \quad (160)$$

$$= -\varepsilon_m \left(-E_o \cos \theta - \sum_{n=0}^{\infty} [f_n (n+1) r^{-(n+2)}] P_n(\cos \theta) \right)_{r=b}$$

$$f_n = \left(\frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_m}\right) \left[d_n - c_n \frac{n}{(n+1)} b^{2n+1} \right] - E_o \frac{\cos \theta}{P_n(\cos \theta)} \frac{b^{n+2}}{(n+1)} \quad (161)$$

$$-\frac{1}{r} \left(- \sum_{n=0}^{\infty} [c_n r^n + d_n r^{-(n+1)}] P'_n(\cos \theta) \sin \theta \right)_{r=b} \quad (162)$$

$$= -\frac{1}{r} \left(E_o r \sin \theta - \sum_{n=0}^{\infty} [f_n r^{-(n+1)}] P'_n(\cos \theta) \sin \theta \right)_{r=b}$$

$$f_n = c_n b^{2n+1} + d_n + E_o \frac{b^{n+2}}{P'_n(\cos \theta)} \quad (163)$$

Resolvendo o sistema de equações formado por (157), (159), (161) e (163), em a_n e f_n :

$$\begin{cases} a_n = \left(\frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1}\right) \left(c_n - d_n \left(\frac{n+1}{n}\right) a^{-(2n+1)}\right) \\ a_n = c_n + d_n a^{-(2n+1)} \\ f_n = \left(\frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_m}\right) \left[d_n - c_n \frac{n}{(n+1)} b^{2n+1} \right] - E_o \frac{\cos \theta}{P_n(\cos \theta)} \frac{b^{n+2}}{(n+1)} \\ f_n = c_n b^{2n+1} + d_n + E_o \frac{b^{n+2}}{P'_n(\cos \theta)} \end{cases} \quad (164)$$

Resolvendo o sistema remanescente em c_n :

$$\begin{cases} c_n = d_n a^{-(2n+1)} \left(\frac{\varepsilon_2(n+1) + n\varepsilon_1}{n(\varepsilon_2 - \varepsilon_1)}\right) \\ c_n = d_n \left(\frac{(\varepsilon_2 - \varepsilon_m)(n+1)}{\varepsilon_2 n + \varepsilon_m(n+1)}\right) b^{-(2n+1)} - E_o b^{-(n-1)} \frac{\varepsilon_m}{\varepsilon_2 n + \varepsilon_m(n+1)} \left[\frac{\cos \theta}{P_n(\cos \theta)} + \frac{(n+1)}{P'_n(\cos \theta)} \right] \end{cases} \quad (165)$$

Fazendo as devidas substituições os coeficientes do problema de valor de contorno são:

$$a_n = \varepsilon_m E_o a^{-(2n+1)} b^{-(n-1)} \left[\frac{\cos \theta}{P_n(\cos \theta)} + \frac{(n+1)}{P'_n(\cos \theta)} \right] \frac{\varepsilon_2(2n+1)}{\mu_n} \quad (166)$$

$$c_n = \frac{\varepsilon_m(\varepsilon_2(n+1) + n\varepsilon_1)E_o a^{-(2n+1)} b^{-(n-1)}}{\mu_n} \left[\frac{\cos \theta}{P_n(\cos \theta)} + \frac{(n+1)}{P'_n(\cos \theta)} \right] \quad (167)$$

$$d_n = \frac{\varepsilon_m(\varepsilon_2 - \varepsilon_1)E_o b^{-(n-1)} n}{\mu_n} \left[\frac{\cos \theta}{P_n(\cos \theta)} + \frac{(n+1)}{P'_n(\cos \theta)} \right] \quad (168)$$

$$f_n = E_o \left\{ \left(\frac{\varepsilon_m(\varepsilon_2(n+1) + n\varepsilon_1) a^{-(2n+1)} b^{n+2} + \varepsilon_m(\varepsilon_2 - \varepsilon_1) b^{-(n-1)} n}{\mu_n} \right) \left[\frac{\cos \theta}{P_n(\cos \theta)} + \frac{(n+1)}{P'_n(\cos \theta)} \right] + \frac{b^{n+2}}{P'_n(\cos \theta)} \right\} \quad (169)$$

Com μ_n sendo um termo auxiliar:

$$\mu_n = n(\varepsilon_2 - \varepsilon_1)(\varepsilon_2 - \varepsilon_m)(n+1)b^{-(2n+1)} - a^{-(2n+1)} n^2 \left(\varepsilon_2 \left[\frac{n+1}{n} \right] + \varepsilon_1 \right) \left(\varepsilon_2 + \varepsilon_m \left[\frac{n+1}{n} \right] \right) \quad (170)$$

Uma rápida inspeção aplicada às constantes arbitrárias (166), (167), (168) e (169), nos mostra que a única maneira de eliminar a dependência angular das constantes, é a escolha de $n = 1$, oque já havia sido verificado na aplicação do limite em $r \rightarrow \infty$, dessa forma:

$$\mu_1 = 2b^{-3}(\varepsilon_2 - \varepsilon_1)(\varepsilon_2 - \varepsilon_m) - a^{-3}(2\varepsilon_2 + \varepsilon_1)(\varepsilon_2 + 2\varepsilon_m) \quad (171)$$

$$a_1 = 3\varepsilon_m E_o a^{-3} \frac{3\varepsilon_2}{\mu_1} \quad (172)$$

$$c_1 = 3 \frac{\varepsilon_m(2\varepsilon_2 + \varepsilon_1)E_o a^{-3}}{\mu_1} \quad (173)$$

$$d_1 = 3E_o \frac{\varepsilon_m(\varepsilon_2 - \varepsilon_1)}{\mu_1} \quad (174)$$

$$f_1 = E_o b^3 \left\{ \left(\frac{b^{-3}(\varepsilon_2 - \varepsilon_1)(2\varepsilon_2 + \varepsilon_m) - a^{-3}(2\varepsilon_2 + \varepsilon_1)(\varepsilon_2 - \varepsilon_m)}{2b^{-3}(\varepsilon_2 - \varepsilon_1)(\varepsilon_2 - \varepsilon_m) - a^{-3}(2\varepsilon_2 + \varepsilon_1)(\varepsilon_2 + 2\varepsilon_m)} \right) \right\} \quad (175)$$

Reescrevendo os coeficientes para obter $f = a^3/b^3$ como sendo a fração do volume total da partícula pela esfera interna, e a constante ξ como parâmetro de normalização do campo uniforme, os coeficientes se transformam em:

$$\xi = \frac{f(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)(2\varepsilon_2 - 2\varepsilon_m) + (2\varepsilon_2 + \varepsilon_1)(\varepsilon_2 + 2\varepsilon_m)}{3\varepsilon_m} \quad (176)$$

$$a_1 = -\frac{3\varepsilon_2}{\xi} E_o \quad (177)$$

$$b_1 = 0 \quad (178)$$

$$c_1 = -\frac{2\varepsilon_2 + \varepsilon_1}{\xi} E_o \quad (179)$$

$$d_1 = a^3 \frac{3\varepsilon_m(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)}{f(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)(2\varepsilon_2 - 2\varepsilon_m) + (2\varepsilon_2 + \varepsilon_1)(\varepsilon_2 + 2\varepsilon_m)} E_0 \quad (180)$$

$$e_1 = -E_0 \quad (181)$$

$$f_1 = b^3 \left(\frac{f(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)(2\varepsilon_2 + \varepsilon_m) + (2\varepsilon_2 + \varepsilon_1)(\varepsilon_2 - \varepsilon_m)}{f(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)(2\varepsilon_2 - 2\varepsilon_m) + (2\varepsilon_2 + \varepsilon_1)(\varepsilon_2 + 2\varepsilon_m)} \right) E_0 \quad (182)$$

Expandindo os somatórios em (251), (252) e (253):

$$V_1(r, \theta) = a_0 + \frac{b_0}{r} + \left(a_1 r + b_1 \frac{1}{r^2} \right) \cos \theta + \sum_{n=2}^{\infty} [a_n r^n + b_n r^{-(n+1)}] P_n(\cos \theta) \quad (183)$$

$$V_2(r, \theta) = c_0 + \frac{d_0}{r} + \left(c_1 r + d_1 \frac{1}{r^2} \right) \cos \theta + \sum_{n=2}^{\infty} [c_n r^n + d_n r^{-(n+1)}] P_n(\cos \theta) \quad (184)$$

$$V_3(r, \theta) = e_0 + \frac{f_0}{r} + \left(e_1 r + f_1 \frac{1}{r^2} \right) \cos \theta + \sum_{n=2}^{\infty} [e_n r^n + f_n r^{-(n+1)}] P_n(\cos \theta) \quad (185)$$

E efetuando as devidas substituições por (176) a (182), o potencial nas regiões do núcleo, casca e externa a esfera são respectivamente:

$$V_1(r, \theta) = -\frac{3\varepsilon_2}{\xi} E_0 r \cos \theta \quad (186)$$

$$V_2(r, \theta) = -\frac{2\varepsilon_2 + \varepsilon_1}{\xi} E_0 r \cos \theta \quad (187)$$

$$V_3(r, \theta) = -E_0 r \cos \theta + a^3 \frac{3\varepsilon_m(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)}{f(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)(2\varepsilon_2 - 2\varepsilon_m) + (2\varepsilon_2 + \varepsilon_1)(\varepsilon_2 + 2\varepsilon_m)} E_0 \frac{1}{r^2} \cos \theta + b^3 \left(\frac{f(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)(2\varepsilon_2 + \varepsilon_m) + (2\varepsilon_2 + \varepsilon_1)(\varepsilon_2 - \varepsilon_m)}{f(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)(2\varepsilon_2 - 2\varepsilon_m) + (2\varepsilon_2 + \varepsilon_1)(\varepsilon_2 + 2\varepsilon_m)} \right) E_0 \frac{1}{r^2} \cos \theta \quad (188)$$

3.3.2 MOMENTOS DE DIPOLO E POLARIZABILIDADES

Analisando o potencial elétrico nas regiões da partícula, nota-se novamente o aparecimento do dipolo. O campo total é proveniente de dois dipolos, um na superfície do núcleo, e outro na superfície da casca da partícula. Sendo assim, definiremos (189) como momento de dipolo interno e (190) como momento de dipolo externo:

$$p_{in} = \alpha_{in} E_0 \quad (189)$$

$$p_{out} = \alpha_{out} E_0 \quad (190)$$

Onde as polarizabilidades interna e externa são respectivamente:

$$\alpha_{in} = 4\pi\varepsilon_2 a^3 \frac{3\varepsilon_m(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)}{f(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)(2\varepsilon_2 - 2\varepsilon_m) + (2\varepsilon_2 + \varepsilon_1)(\varepsilon_2 + 2\varepsilon_m)} \quad (191)$$

$$\alpha_{out} = 4\pi\varepsilon_m b^3 \left(\frac{f(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)(2\varepsilon_2 + \varepsilon_m) + (2\varepsilon_2 + \varepsilon_1)(\varepsilon_2 - \varepsilon_m)}{f(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)(2\varepsilon_2 - 2\varepsilon_m) + (2\varepsilon_2 + \varepsilon_1)(\varepsilon_2 + 2\varepsilon_m)} \right) \quad (192)$$

Finalmente, o potencial elétrico em qualquer ponto é dado por:

$$V(r, \theta) = \begin{cases} -\frac{3\varepsilon_2}{\xi} E_0 r \cos \theta; & \text{para } r < a \\ -\frac{2\varepsilon_2 + \varepsilon_1}{\xi} E_0 r \cos \theta + \frac{p_{in}}{4\pi\varepsilon_2 r^2} \cos \theta; & \text{para } a < r < b \\ -E_0 r \cos \theta + \frac{p_{out}}{4\pi\varepsilon_m r^2} \cos \theta; & \text{para } r > b \end{cases} \quad (193)$$

3.3.3 CAMPO ELETROMAGNÉTICO RESULTANTE DA INTERAÇÃO

Aplicando as definições feitas na seção 3.2.5 à equação (193), determinamos o campo elétrico harmônico resultante da interação:

$$\vec{E}(r, \theta) = Re \left[e^{j\omega t} \begin{cases} -\frac{3\varepsilon_2}{\xi} \vec{E}_0; & \text{para } r < a \\ \frac{2\varepsilon_2 + \varepsilon_1}{\xi} \vec{E}_0 + \frac{[3\hat{a}_r(\vec{p}_{in} \cdot \hat{a}_r) - \vec{p}_{in}]}{4\pi\varepsilon_2 r^3}; & \text{para } a < r < b \\ \vec{E}_0 + \frac{[3\hat{a}_r(\vec{p}_{out} \cdot \hat{a}_r) - \vec{p}_{out}]}{4\pi\varepsilon_m r^3}; & \text{para } r > b \end{cases} \right] \quad (194)$$

Podemos reescrever o campo em termos dos vetores unitários cartesianos.

$$\vec{E}(r, \theta) = Re \left[e^{j\omega t} \begin{cases} -\frac{3\varepsilon_2}{\xi} E_0 \hat{a}_z; & \text{para } r < a \\ \frac{p_{in}}{4\pi\varepsilon_2 r^3} 3 \cos \theta \sin \theta [\hat{a}_x \cos \phi + \hat{a}_y \sin \phi] + & \text{para } a < r < b \\ \left[\frac{2\varepsilon_2 + \varepsilon_1}{\xi} E_0 + \frac{p_{in}}{4\pi\varepsilon_2 r^3} (3 \cos^2 \theta - 1) \right] \hat{a}_z; & \\ \frac{p_{out}}{4\pi\varepsilon_m r^3} 3 \cos \theta \sin \theta [\hat{a}_x \cos \phi + \hat{a}_y \sin \phi] + & \text{para } a > r \\ \left[E_0 + \frac{p_{out}}{4\pi\varepsilon_m r^3} (3 \cos^2 \theta - 1) \right] \hat{a}_z; & \end{cases} \right] \quad (195)$$

Ainda das definições da seção 3.2.6 o campo magnético $H(t)$ harmonicamente oscilante nas proximidades da partícula:

$$\vec{H} = Re \left[e^{j\omega t} \begin{cases} 0 & \text{para } r < a \\ j\omega \frac{1}{4\pi} (\hat{a}_r \times \vec{p}_{in}) \frac{1}{r^2} & \text{para } a < r < b \\ j\omega \frac{1}{4\pi} (\hat{a}_r \times \vec{p}_{out}) \frac{1}{r^2} & \text{para } r > b \end{cases} \right] \quad (196)$$

Ou em termos dos vetores unitários cartesianos:

$$\vec{H}(r, \theta, \phi, t) = Re \left[e^{j\omega t} \begin{cases} 0; & \text{para } r < a \\ j\omega \frac{p_{in}}{4\pi r^2} \sin \theta [\hat{a}_x \sin \phi - \hat{a}_y \cos \phi]; & \text{para } a < r < b \\ j\omega \frac{p_{out}}{4\pi r^2} \sin \theta [\hat{a}_x \sin \phi - \hat{a}_y \cos \phi]; & \text{para } r > b \end{cases} \right] \quad (197)$$

Mais uma vez não há componente na direção de \hat{a}_z .

4. SEÇÕES TRANSVERSAIS DE DISPERSÃO E PERMISSIVIDADE RELATIVA DOS MATERIAIS

4.1 SEÇÕES TRANSVERSAIS DE ESPALHAMENTO, ABSORÇÃO E EXTINÇÃO.

As propriedades ópticas, especificamente em coloides, são resultado da interação da radiação eletromagnética com as características eletrônicas das nanopartículas. Como foi citada no capítulo 2, a RSPL é uma propriedade eletrônica das NPM, que para os metais nobres, se manifesta na região visível do espectro eletromagnético. A coloração avermelhada em estruturas de catedrais, ocasionada por partículas de ouro ou prata dispersas na matriz de vidro, foi observada primeiramente por Michael Faraday no século XIX [2], no entanto, uma explicação com base teórica só foi desenvolvida em 1908, quando Gustav Mie através das equações de Maxwell sintetizou uma plena explicação para interação resultante de uma partícula com geometria esférica e uma onda eletromagnética [2]. A modelagem deste fenômeno é de grande importância para o entendimento do fenômeno de RSPL, desde que este é caracterizado pelo parâmetro de seção transversal de extinção C_{ext} .

Um árduo caminho matemático, por meio de funções de Bessel esféricas, é empregado para a obtenção da C_{ext} , que para uma esfera homogênea isotrópica imersa em um meio de mesmas características, incidida por uma onda eletromagnética plana é dada por [2,13] (198).

$$C_{ext} = \frac{2\pi}{k^2} \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1) \text{Re}\{a_n + b_n\} \quad (198)$$

Sendo $k = \frac{2\pi}{\lambda} \sqrt{\varepsilon_m}$ o número de onda, onde a_n e b_n são denominados coeficientes complexos de espalhamento. O campo elétrico espalhado pela partícula é descrito como uma combinação linear dos chamados modos normais eletromagnéticos ponderados por estes coeficientes. A seção transversal de extinção é definida como a razão entre a potência de luz extinta W_{ext} , através da potência absorvida W_{abs} e espalhada W_{sca} , e a intensidade de luz incidente I_{in} , possuindo dimensão de área [2,13]:

$$C_{ext} = \frac{W_{ext}}{I_{in}} = \frac{W_{sca} + W_{abs}}{I_{in}} = C_{sca} + C_{abs} \quad (199)$$

A partir disto, definimos a grandeza adimensional eficiência de extinção como:

$$Q_{ext} = \frac{C_{ext}}{S_G} = Q_{sca} + Q_{abs} \quad (200)$$

onde $S_G = \pi R^2$ é a seção transversal geométrica da partícula de raio R , perpendicular a direção do feixe de luz incidente.

Se considerarmos que $R \ll \lambda$, será caracterizando o espalhamento de Rayleigh, reduzindo os termos da equação (198) a:

$$C_{ext} = \frac{6\pi r^2}{x^2} Re \left\{ -j \frac{2x^3}{3} \left[\frac{y^2 - 1}{y^2 + 2} \right] \right\} \quad (201)$$

onde $x = kR$ e $y = \sqrt{\varepsilon/\varepsilon_m}$, que na aproximação quase estática representa $x \ll 1$, e dessa forma, torna-se possível desprezar os termos de mais alta ordem do somatório (198). Pela propriedade $Re\{-Z\} = Im\{Z\}$, (309) torna-se:

$$C_{ext} = \frac{4\pi r^2}{x^2} Im \left\{ x^3 \left[\frac{y^2 - 1}{y^2 + 2} \right] \right\} \quad (202)$$

Expandindo os termos e comparando (201) com a equação da polarizabilidade da esfera (116):

$$C_{ext} = k Im \left\{ 4\pi r^3 \left[\frac{\varepsilon - \varepsilon_m}{\varepsilon + 2\varepsilon_m} \right] \right\} = k Im\{\alpha\} \quad (203)$$

A seção transversal de espalhamento para uma partícula esférica pelo modelo de Mie é definida por [13,21]:

$$C_{sca} = \frac{2\pi}{k^2} \sum_{n=1}^{\infty} (2n + 1) [|a_n|^2 + |b_n|^2] \quad (204)$$

Pelas definições feitas para o regime quase estático e observando (116):

$$C_{sca} \cong \frac{8\pi r^2}{3} x^4 \left| \frac{y^2 - 1}{y^2 + 2} \right|^2 = \frac{k^4}{6\pi} \left| 4\pi r^3 \frac{\varepsilon - \varepsilon_m}{\varepsilon + 2\varepsilon_m} \right|^2 = \frac{k^4}{6\pi} |\alpha|^2 \quad (205)$$

Note que a seção transversal de espalhamento é proporcional ao termo k^4 que neste regime apresenta amplitude mínima em relação a termos com grau menor, o que faz com que no modelo quase estático o termo de C_{sca} seja mínimo, ou seja, a extinção total é praticamente dependente apenas da absorção, $C_{ext} \cong C_{abs}$. Por fim, com base nas definições feitas sobre as seções transversais, podemos escrever as expressões para absorção e espalhamento no regime quase estático:

$$C_{sca} = \frac{k^4}{6\pi} |\alpha|^2 \quad (206)$$

$$C_{abs} k Im [\alpha] \quad (207)$$

Até este ponto definimos os parâmetros de dispersão, note que tanto a absorção quanto o espalhamento dependem diretamente da polarizabilidade da partícula, e a partir de (116) é perceptível que a mesma experimenta um aumento de ressonância nas condições em que $|\varepsilon + 2\varepsilon_m|$ é mínima, para o caso da pequena ou lenta variação da $Im[\varepsilon]$, a ressonância se simplifica á [5]:

$$Re[\varepsilon(\omega)] = -2\varepsilon_m \quad (208)$$

A relação (208) é chamada de condição de Fröhlich, e o modo é associado (em um campo oscilante) à superfície plasmônica do dipolo da nanopartícula metálica esférica, constituída de um metal com função dielétrica definida pelo modelo de Lorentz Drude [5].

Localizado no ar, o critério de Fröhlich é cumprido na frequência $\omega_o = \frac{\omega_p}{\sqrt{3}}$, e manifesta-se ainda a forte dependência da frequência de ressonância no dielétrico ambiente [5]. Note que a magnitude de α em ressonância no dielétrico é limitada pela impossibilidade do total desaparecimento do denominador, devido à $Im[\varepsilon(\omega)] \neq 0$. No entanto, para uma partícula do tipo *core-shell* esta ressonância é deslocada pelo efeito da camada que a recobre, este efeito é verificado a partir das expressões das polarizabilidades do core-shell. Podemos aplicar o limite $\varepsilon_2 \rightarrow \varepsilon_m$ para verificar o comportamento da polarizabilidade na aproximação dos meios:

$$\begin{aligned} \alpha_{in} &= \lim_{\varepsilon_2 \rightarrow \varepsilon_m} 4\pi\varepsilon_2 a^3 \frac{3\varepsilon_m(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)}{f(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)(2\varepsilon_2 - 2\varepsilon_m) + (2\varepsilon_2 + \varepsilon_1)(\varepsilon_2 + 2\varepsilon_m)} \quad (209) \\ &= 4\pi\varepsilon_m a^3 \frac{(\varepsilon_1 - \varepsilon_m)}{(2\varepsilon_2 + \varepsilon_1)} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \alpha_{out} &= \lim_{\varepsilon_2 \rightarrow \varepsilon_m} 4\pi\varepsilon_m b^3 \left(\frac{f(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)(2\varepsilon_2 + \varepsilon_m) + (2\varepsilon_2 + \varepsilon_1)(\varepsilon_2 - \varepsilon_m)}{f(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)(2\varepsilon_2 - 2\varepsilon_m) + (2\varepsilon_2 + \varepsilon_1)(\varepsilon_2 + 2\varepsilon_m)} \right) \quad (210) \\ &= 4\pi\varepsilon_m a^3 \left(\frac{(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)}{(2\varepsilon_2 + \varepsilon_1)} \right) \end{aligned}$$

Note que ambas as expressões tomam a forma de (116), a polarizabilidade para uma simples esfera, no entanto, determinar a condição de ressonância para o core-shell pode ser uma tarefa um pouco mais complicada, tendo em vista a dependência dos parâmetros f , ε_1 , ε_2 e ε_m . A origem física para esta amplificação, tanto na extinção da luz quanto no campo local em torno da partícula, é o que o caracteriza o fenômeno de RSPL, discutida no capítulo 2.

4.2. ABSORBÂNCIA DE UM CONJUNTO DE NANOPARTÍCULAS

Quando um feixe de luz propaga-se na direção \hat{a}_z , através de um conjunto de NPM, uma pequena quantidade infinitesimal dI de sua intensidade é extinta através de espalhamento e absorção, esta pequena parcela pode ser modelada via:

$$dI = -\alpha_{ext} I(z) dz \quad (211)$$

onde α_{ext} é o coeficiente de extinção da lei de Beer's definido em (36), com unidade m^{-1} [2,5]. Analogamente, para o modelo quase estático, podemos integrar (211) para obter:

$$I = I_0 e^{-\alpha_{ext} L} \quad (212)$$

sendo L a espessura da amostra contendo NPM, I_0 e I , respectivamente, as intensidades incidente e transmitida pela amostra. Introduziremos agora o conceito de espalhamento único, onde cada NPM espalha apenas a luz proveniente do feixe incidente, sendo que este campo espalhante não interage com outra NPM. Esta aproximação é válida quando a concentração de partículas em suspensão na amostra é pequena em relação à distância efetiva entre as mesmas, deste modo o coeficiente de extinção pode ser dado por:

$$\alpha_{ext} = C_{ext} N \quad (213)$$

onde N é o numero de nanopartículas metálicas por unidade de volume da amostra. Com estas aproximações feitas com relação à extinção de luz pelas NPM, é habitual a utilização de uma nomenclatura que se refira apenas à contribuição predominante da absorção na extinção de luz, desde que a extinção é quase toda proveniente da absorção. Definimos então a grandeza adimensional denominada Absorbância (ou Absorvância), de um conjunto de NPM [2]:

$$A_b = \frac{\alpha_{ext} L}{\ln 10} = \log \left[\frac{I_0}{I} \right] \quad (214)$$

4.3. PERMISSIVIDADE COMPLEXA DO OURO – MODELO DE LORENTZ DRUDE

No capítulo 2 definimos a função dielétrica do gás de elétrons (53), que modela o comportamento óptico dos metais nobres no espectro visível. Foi verificado também que a RSPL em partículas esféricas responde de acordo com a polarizabilidade α do momento dipolar, e possui amplificação obtida via condição de Fröhlich em NPM simples, este ultimo torna-se possível quando a parte real da função dielétrica do metal é negativa, oque de fato é observado por meio da função dielétrica no modelo de Lorentz Drude para o ouro [4]:

$$\varepsilon_{gold}(\omega) = \varepsilon_{\infty} + \frac{\omega_{p1}}{\omega^2 + j\Gamma\omega} + \frac{\omega_{p2}}{\omega_0^2 - \omega^2 - j\gamma\omega} \quad (215)$$

onde ω_{p1} e ω_{p2} são as frequências do plasma, γ e Γ são as frequências de amortecimento com característica de ressonância para os termos de interbanda dos elétrons ligados, e $\omega_0 = 2\pi c/\lambda_0$ é a frequência fundamental.

Este modelo é adequado para nanoestruturas relativamente grandes, no entanto, para partículas muito pequenas, com raio na ordem de $1nm < R < 10nm$ um processo adicional de amortecimento deve ser considerado, este designado como amortecimento de interface químico [2]. Aqui, a taxa de defasamento da oscilação coerente é aumentada devido ao espalhamento elástico na superfície da partícula, desde que as dimensões da NPM são suficientemente menores que o caminho livre dos elétrons. Este comportamento pode ser

modelado experimentalmente através da inserção do comprimento e onda plasmônico empírico [2]:

$$\Gamma_{emp}(R) = \Gamma_0 + B \frac{v_f}{R} \quad (216)$$

onde, Γ_0 descreve o comprimento de onda plasmônico da partícula fora deste regime, v_f a velocidade de Fermi dos elétrons e B um fator que incorpora detalhes do processo de espalhamento, determinado experimentalmente. Substituindo (216) em (215), a função dielétrica do ouro para o modelo de Lorentz Drude ajustada é [8]:

$$\varepsilon_{gold}(\omega, r) = \varepsilon_\infty + \frac{\omega_{p1}}{\omega^2 + j\omega \left(\Gamma_0 + B \frac{v_f}{r} \right)} + \frac{\omega_{p2}}{\omega_0^2 - \omega^2 - j\gamma\omega} \quad (217)$$

Graficamente (Fig. 18), as partes real e imaginária da função dielétrica do ouro (325).

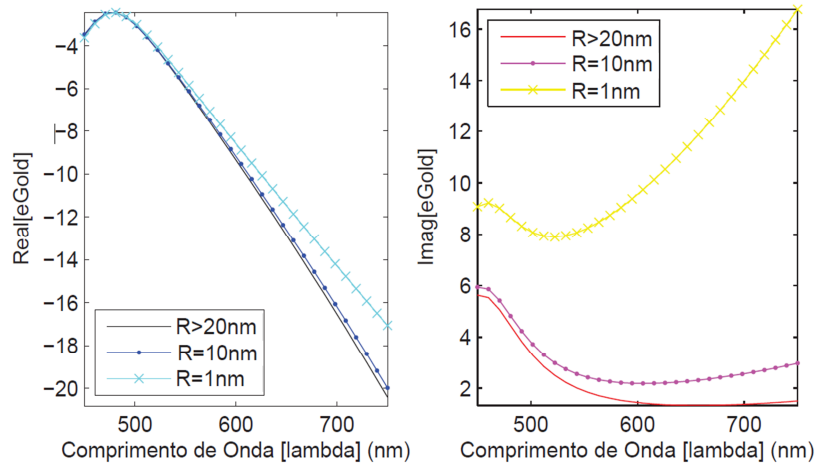


Figura 18 – Permissividade Relativa para três raios de NPM: (a) Parte Real, (b) Parte Imaginária. Fonte: [8]

Note que as curvas começam a convergir à medida que o raio da NPM aumenta para $R > 10nm$. Até este ponto consideramos a interação de uma pequena partícula e um campo EM através da teoria clássica, no entanto para partículas com raio menor que $1nm$ os efeitos quânticos começam a surgir, fugindo do escopo deste trabalho.

4.4. PERMISSIVIDADE RELATIVA DA SÍLICA – MODELO DE SELLMEIER

Anteriormente, verificamos que a polarização está ligada a susceptibilidade elétrica do meio por:

$$\vec{P} = \varepsilon_0 \chi \vec{E} = \varepsilon_0 (\varepsilon_1 - 1) \vec{E} \quad (218)$$

Sendo a susceptibilidade um numero complexo, podemos escrever a relação com o índice de refração para um determinado material transparente, e em seguida expandi-la em termos da série de Taylor:

$$\tilde{n} = \sqrt{1 + \chi} = 1 + \frac{1}{2}\chi + \dots = n + j\kappa \quad (219)$$

Analogamente ao definido na seção 2.1. Para um material homogêneo, isotrópico e não absorvente $\tilde{n} = n$, desde que $\kappa \cong 0$. Por definições análogas às feitas na mesma seção podemos escrever o índice de refração para o meio na forma [23]:

$$n = 1 + \left(\frac{Ne^2}{2m\epsilon_0} \right) \left(\frac{\omega_0^2 - \omega^2}{\omega_0^2 - \omega^2 + \omega_b^2} \right) \quad (220)$$

sendo este o termo do oscilado harmônico do material, variante com a frequência da luz incidente. Esta dependência recebe o nome de dispersão cromática. Em geral, as transições atômicas mais intensas nos materiais transparentes ocorrem na região do ultravioleta ao infravermelho, próximo a $2,5\mu m$. Um fato interessante desta relação é que o índice de refração aumenta com a frequência, ou seja, diminui com o comprimento de onda. O que indica que quanto mais deslocado para o infravermelho for o comprimento de onda, menor será o índice de refração e conseqüentemente maior será sua velocidade de propagação uma vez que $v = c/n$ [13,23].

Do ponto de vista prático, costuma-se utilizar uma relação empírica entre o índice de refração n e o comprimento de onda para determina-se a permissividade para um dado meio transparente, conhecida como equação de Sellmeier [23,24]. A forma usual desta equação para um dielétrico comum como a sílica é dada pela estrutura:

$$\epsilon_{silica}(\lambda) = n^2(\lambda) = A + \frac{B_1\lambda^2}{\lambda^2 - C_1} + \frac{B_2\lambda^2}{\lambda^2 - C_2} + \dots = A + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{B_n\lambda^2}{\lambda^2 - C_n} \quad (221)$$

Onde B_n e C_n são os coeficientes de Sellmeier, determinados experimentalmente, e λ o comprimento de onda da luz incidente, medido em micrometros. Cada termo representa uma absorção óptica com força do oscilador B_n no comprimento de onda $\sqrt{C_n}$, e o coeficiente A representa a contribuição da absorção que ocorre no ultravioleta, com valores próximos de $A \cong 1$. Graficamente (Fig. 19), a curva da permissividade efetiva para a sílica é:

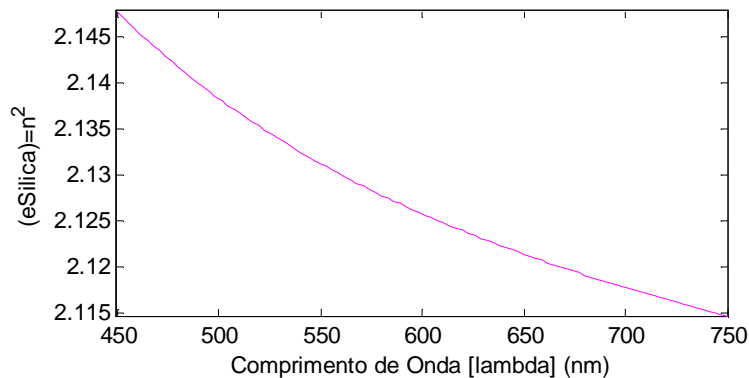


Figura 19 – Permissividade Relativa da Sílica. Fonte: Autor

5. MODELAGEM NUMÉRICA DO INTER-ACOPAMENTO ELETROMAGNÉTICO ENTRE DUAS PARTÍCULAS NO COMSOL

Até este momento, utilizamos de técnicas analíticas para verificar o comportamento de uma única esfera interagindo com uma onda eletromagnética, porém, na prática haverá um número demasiadamente grande de NPM espalhando o campo e interagindo umas com as outras. De fato, é o que ocorre, no entanto, estas indagações não enfraquecem a validade de nossas análises, desde que consideramos que em uma amostra, com uma baixa densidade de NPM, a interação se resume a uma partícula isolada. A interação entre partículas pode ser verificada aplicando a condição de periodicidade a um conjunto de duas NPM separadas por uma distância d , desde que a distância entre as NPM e as paredes da célula sejam suficientemente grande para que não haja interação entre células, mas apenas pelas NPM dentro da célula (Fig. 20).

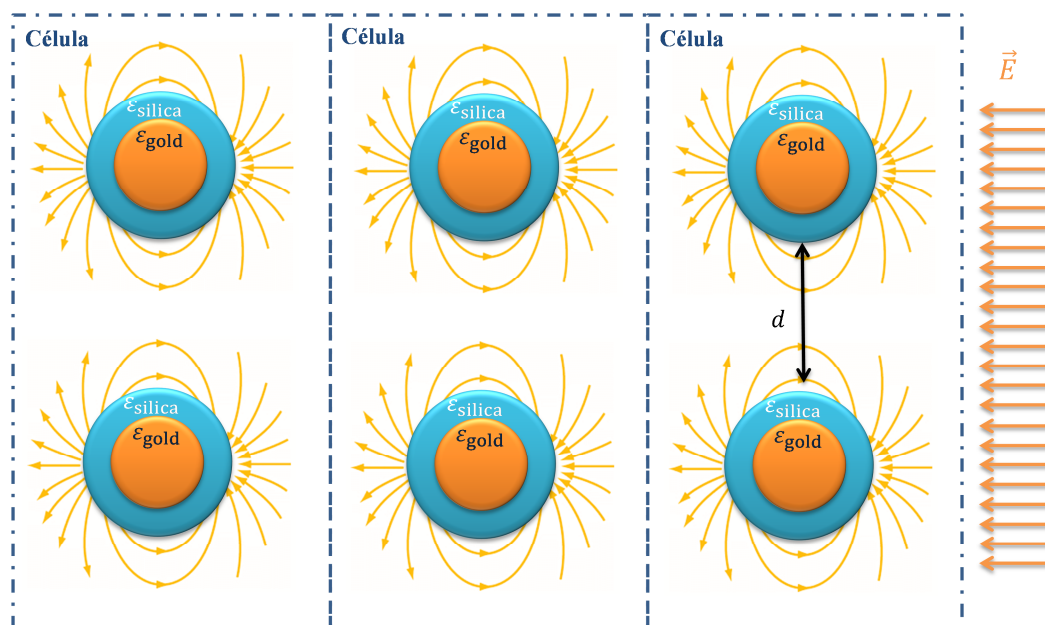


Figura 20 – Conjunto de células de duas NPM separadas uniformemente por uma distância d . Fonte: Autor

6.1. PROBLEMA DO INTERACOPLAMENTO ENTRE NANOPARTÍCULAS

A partir deste ponto, estamos interessados no regime em que a distância d é relativamente pequena, permitindo a interação entre os campos espalhados pelas partículas. Agora, o uso de um modelo analítico torna-se limitada, de maneira que não há uma solução simples na forma fechada para o problema de valor de contorno, desta forma, como ferramenta auxiliar, serão utilizadas técnicas numéricas para resolver o problema. Destas destacam-se o Método dos Momentos (MOM), o Método dos Elementos Finitos (FEM) e o Método das Diferenças Finitas (FDM) [4,12,18].

Incluindo o método utilizado, há diversas maneiras de discretizar o problema para então resolvê-lo iterativamente utilizando uma ferramenta computacional, como o MATLAB® por exemplo. No entanto, o estudo destes pode se tornar matematicamente complicado e foge do escopo deste trabalho.

6.2. SOLUÇÃO ATRAVÉS DE SIMULAÇÃO NUMÉRICA NO COMSOL *Multiphysics*®.

Utilizaremos uma ferramenta computacional bastante difundida e capaz de executar o trabalho de modelagem da malha do problema de forma dinâmica e prática, o COMSOL *Multiphysics*®. Este possui um ambiente interativo e poderoso utilizado para modelar e resolver diversos tipos de problemas físicos, científicos e de engenharia [25]. Em sua essência, o software oferece uma plataforma de trabalho integrado com *Model Builder*, que oferece uma visão completa do modelo além de acesso a todas as funcionalidades, sem a necessidade de um profundo conhecimento de técnicas avançadas de matemática e análises numéricas.

Para a resolução do problema foi utilizado o *RF Module* com o subgrupo *Frequency Domain*, onde são resolvidos problemas no campo geral de ondas eletromagnéticas, tais como aplicações em RF e micro-ondas, ótica e fotônica [26].

A geometria do problema foi definida tridimensionalmente, onde duas partículas do tipo *core-shell* de raio interno a , raio efetivo b e espessura da camada de sílica Δ , foram dispostas lateralmente a uma distância d entre elas (Fig. 21).

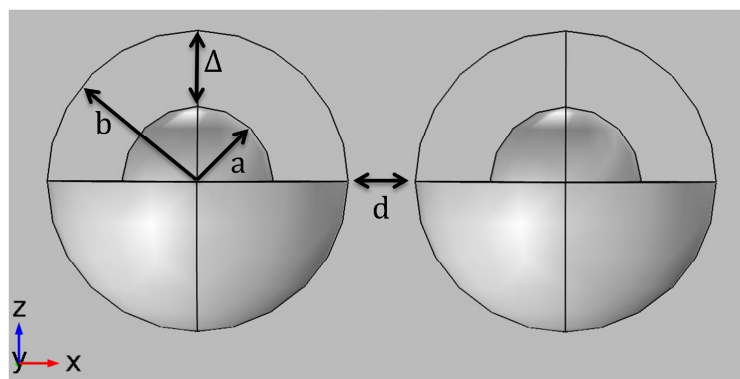


Figura 21 – Definição da geometria na modelagem do problema. Fonte: Autor.

A malha do sistema foi definida de acordo com a função *Physics – Controlled Mesh*, onde o software considera os índices de refração dos materiais para obter um modelo da distribuição do campo eletromagnético na estrutura. Os valores de permissividade para o comprimento de onda utilizado foram definidos através dos modelos de Lorentz Drude e Sellmeier, introduzidos no capítulo anterior.

No módulo “*The Electromagnetic Waves, Frequency Domain Interface*” foram definidos o tipo de campo, *Scattered Field*, e o tipo de onda, *Linearly Polarized Plane Wave*, com dados definidos para amplitude normalizada em $1V/m$, com comprimento de onda $\lambda = 632,8nm$, valor equivalente ao de equipamentos laser utilizados em laboratório. Este módulo é utilizado para resolver a distribuição do campo eletromagnético com dependência temporal harmônica. O ambiente foi definido de maneira prismática, onde nas faces superiores e inferiores foram usadas *Scattering Boundary Condition*, que simulam a propagação do campo polarizada na direção \hat{a}_x , nas faces laterais foram definidas *Periodic Conditions* do tipo *Continuity*, que simulam uma célula em condições periódicas.

Para as simulações, as esferas foram dispostas nas formas da Fig.22.a e Fig. 22.b em relação às superfícies do ambiente:

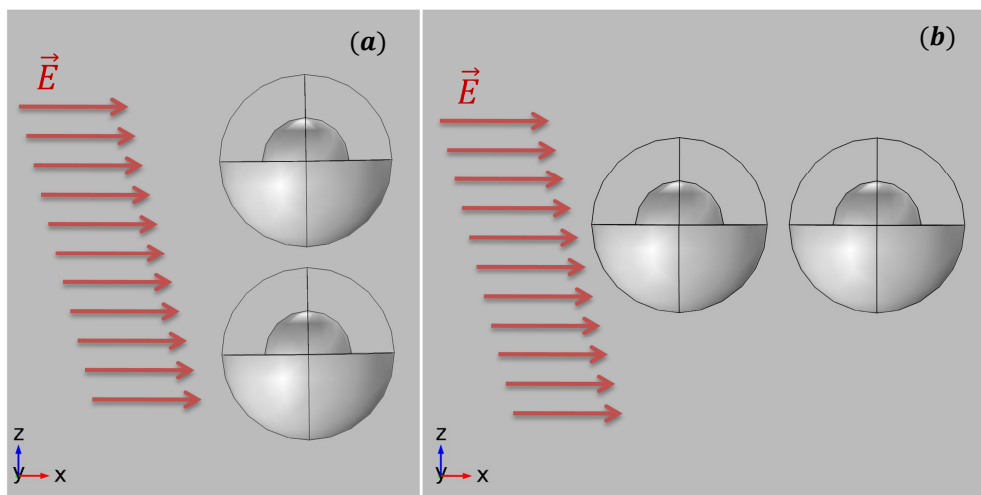


Figura 22 – Geometria do Problema: (a) Configuração A; (b) Configuração B. Fonte: Autor.

Por último, foi definida uma distância suficientemente grande entre as partículas e as paredes das condições periódicas, desta forma, a interação ocorre homogeneamente entre o campo e as duas partículas, que se repetem graças às condições na interface. O COMSOL utiliza o FDM na discretização da malha, com elementos triangulares (Fig. 17), o método utilizado para a resolução o problema foi o PARDISE, este é um software de alto desempenho, robusto, eficiente em memória e de fácil utilização para resolver grandes sistemas de equações lineares simétricas e não simétricas em memórias compartilhadas e multiprocessadores de memória distribuída [27].

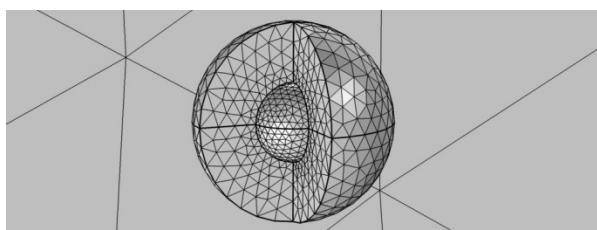


Figura 23 – Discretização da malha triangular. Fonte: Autor.

6. RESULTADOS E DISCUSSÕES

Utilizando a modelagem teórica apresentada, foram desenvolvidos programas no software MATLAB® para calcular as variações nos parâmetros de seções transversais de dispersão e campos eletromagnéticos na interação entre uma nanopartícula do tipo *core-shell* e um campo uniforme, onde são verificados os efeitos da camada dielétrica que recobre a nanopartícula. As análises feitas para a polarizabilidade e seções transversais de dispersão foram realizadas na faixa do comprimento de onda que vai de 450nm a 750nm , banda em que se encontra o espectro visível. O parâmetro de absorbância foi verificado na mesma faixa utilizando valores experimentais disponibilizados por [11].

Os resultados de campo foram gerados no comprimento de onda $\lambda = 632.8\text{nm}$, valor equivalente ao de equipamento laser utilizado em laboratório. Para verificar o inter-acoplamento eletromagnético entre duas partículas isoladas, que interagem com um campo uniforme, foi utilizado o software COMSOL *Multiphysics*®. Por fim, foram realizados estudos para verificar a aproximação do campo homogêneo pelo campo de uma carga pontual definida na seção 3.2.4, e da validade do método quase estático.

Os parâmetros construtivos foram definidos a partir das equações dielétricas definidas no capítulo 4. Para o núcleo das partículas, foi utilizado o modelo de Lorentz Drude para o ouro (325) com constantes definidas na Tab. 1 [2,4], e para a casca dielétrica a equação de Sellmeier para a sílica (329) com constantes definidas na Tab. 2 [24]. Aqui utilizamos os coeficientes de Sellmeier C_n com unidades em metros, por questão de ajuste do programa.

Tabela 1 – Constantes utilizadas no modelo de Lorentz Drude.

Constante	Símbolo	Valor	Unidade
Frequência do Plasma 1	ω_{p1}	1.3579×10^{16}	<i>rad/s</i>
Frequência do Plasma 2	ω_{p2}	4.4910×10^{15}	<i>rad/s</i>
Frequência Fundamental	ω_0	4.1888×10^{15}	<i>rad/s</i>
Frequência de Amortecimento	Γ_0	9.9909×10^{13}	<i>rad/s</i>
Frequência de Amortecimento	γ	8.9516×10^{14}	<i>rad/s</i>
Velocidade de Fermi	v_f	1.4×10^6	<i>m/s</i>
Constante do Modelo	B	$0.85 + 0.35j$	*
Numero imaginário	j	$\sqrt{-1}$	*
Permissividade do infinito	ϵ_∞	7	*

Fonte: [2,4]

* Adimensional

Tabela 2 - Constantes utilizadas no modelo de Sellmeier.

Constante	Símbolo	Valor	Unidade
Coeficiente de Sellmeier	B_1	0.6962	*
Coeficiente de Sellmeier	B_2	0.4079	*
Coeficiente de Sellmeier	B_3	0.8975	*
Coeficiente de Sellmeier	C_1	4.6791×10^{-15}	m^2
Coeficiente de Sellmeier	C_2	1.3512×10^{-14}	m^2
Coeficiente de Sellmeier	C_3	9.7934×10^{-11}	m^2
Coeficiente de Sellmeier	A	1	*

Fonte: [24]

*Adimensional

As análises foram realizadas em meio aquoso com permissividade relativa $\epsilon_m = 1.7796$ (constante dielétrica da água) [28], com partículas de dimensões definidas na Tab. 3:

Tabela 3 – Dimensões das partículas utilizadas.

Constante	Símbolo	Valores	Unidade
Espessura da camada de Sílica	Δ	[0 5 10]	nm
Raio efetivo do núcleo	a	[5 15 35 50]*	nm
Raio efetivo da partícula	b	$a + \Delta$	nm
Distância entre duas partículas	d	[5 20]	nm
Distância entre a origem e carga pontual	d_q	$5 + a \times [1 3 5 7]$	nm

Fonte: Autor * Em algumas análises utilizou-se $a = 10nm$.

Definidos os termos necessários, partiremos para o primeiro caso, uma nanopartícula do tipo *Core-shell* interagindo com um campo elétrico uniforme de amplitude $|E| = 1V/m$ na direção de \hat{a}_z , harmonicamente variante no tempo, de acordo com o definido no modelo de Rayleigh.

6.1. POLARIZABILIDADES INTERNA E EXTERNA

A partir de (193), nota-se a presença de dois dipolos no campo proveniente da interação, um interno, que surge na região da capa de sílica, e outro externo à partícula, este surge no meio onde a partícula está imersa. Para quatro partículas de raio interno $a = 5nm, 15nm, 35nm$ e $50nm$, e camada externa com espessura variando em $\Delta = 0nm, 5nm$ e $10nm$, respectivamente, foram gerados os resultados de módulo e fase das polarizabilidades variando no comprimento de onda (Fig. 24). Para isso utilizou-se as equações (191) e (192), que caracterizam a polarizabilidade interna e externa, respectivamente:

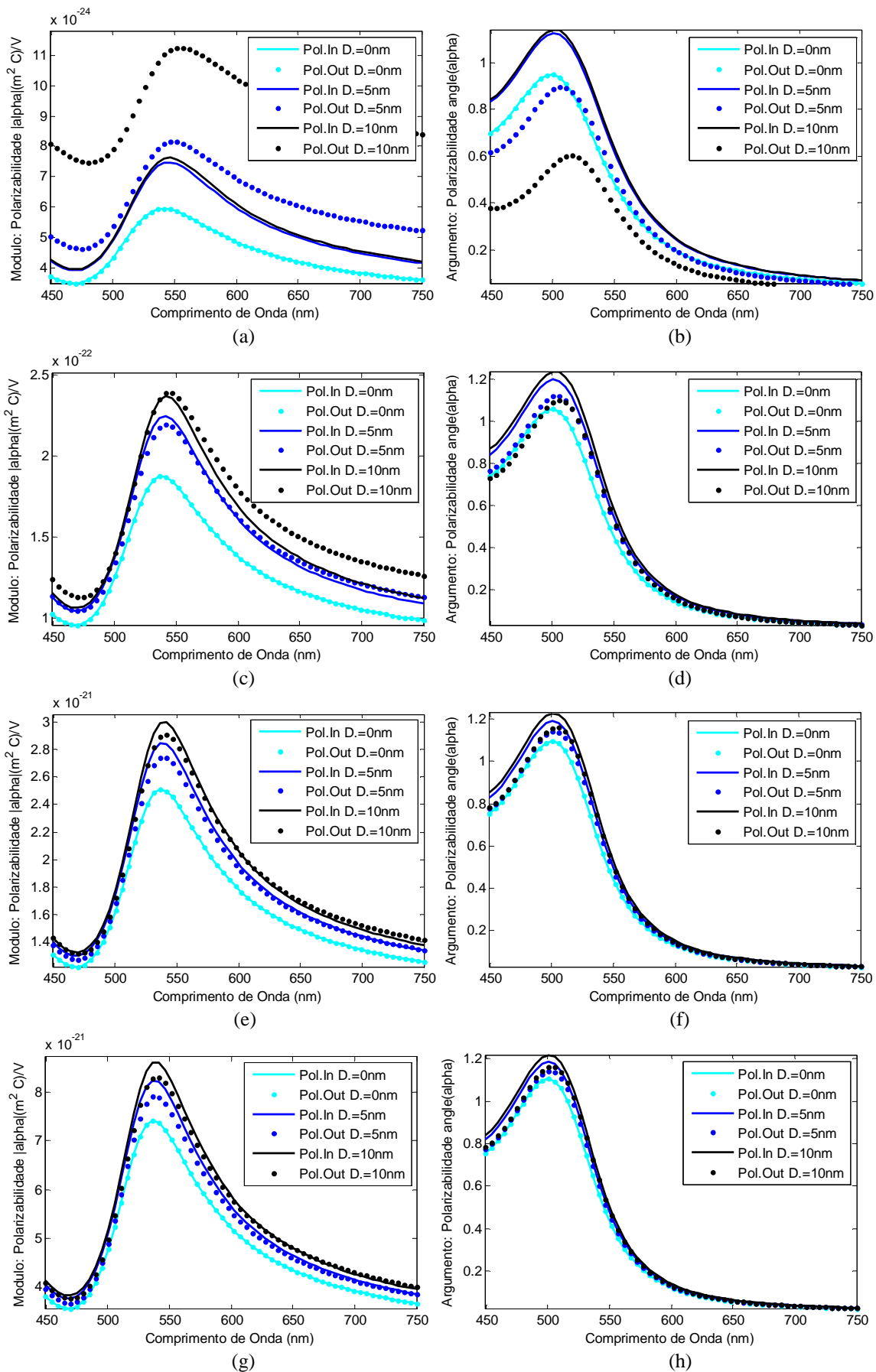


Figura 24 – Polarizabilidades Interna e Externa: (a) $|\alpha|$, $a = 5\text{nm}$; (b) $\angle\alpha$, $a = 5\text{nm}$; (c) $|\alpha|$, $a = 15\text{nm}$; (d) $\angle\alpha$, $a = 15\text{nm}$; (e) $|\alpha|$, $a = 35\text{nm}$; (f) $\angle\alpha$, $a = 35\text{nm}$; (g) $|\alpha|$, $a = 50\text{nm}$; (h) $\angle\alpha$, $a = 50\text{nm}$. Fonte: Autor.

Primeiramente, podemos verificar que o aumento da espessura da camada dielétrica altera o ponto de máximo do módulo das polarizabilidades, este fato foi inesperado, tendo em vista que as dimensões da partícula não alteram o ponto de amplificação da polarizabilidade em uma partícula esférica simples no espectro, já que o que define esta característica é a condição de Fröhlich. Foi verificado também que, o comportamento das polarizabilidades externa e interna se alteram com o aumento da nanopartícula, para partículas pequenas $|\alpha_{in}| < |\alpha_{out}|$, e para partículas maiores esta situação se inverte, esta característica se deve as condições de continuidade dos dipolos induzidos nas interfaces, que serão discutidas posteriormente. Note que a fase dos dipolos (em radianos) possui desfasamentos distintos na região que vai de 450nm a 600nm, este comportamento é devido ao valor das permissividades relativas do meio e da casca dielétrica. Um teste de limite pode ser aplicado para verificar que na ausência da casca dielétrica, as polarizabilidades interna e externa convergem para a mesma curva, de fato o que ocorre também no limite em que a permissividade do meio se aproxima da permissividade da casca dielétrica. Por apresentar efetividade e de acordo com [5], a partir deste ponto, definiremos a polarizabilidade externa como efetiva.

6.2. EFICIÊNCIA DAS SEÇÕES TRANSVERSAIS DE DISPERSÃO

Nesta seção verificaremos as eficiências das seções transversais de dispersão definidas em (206), (207) e (208) para as partículas definidas no tópico anterior:

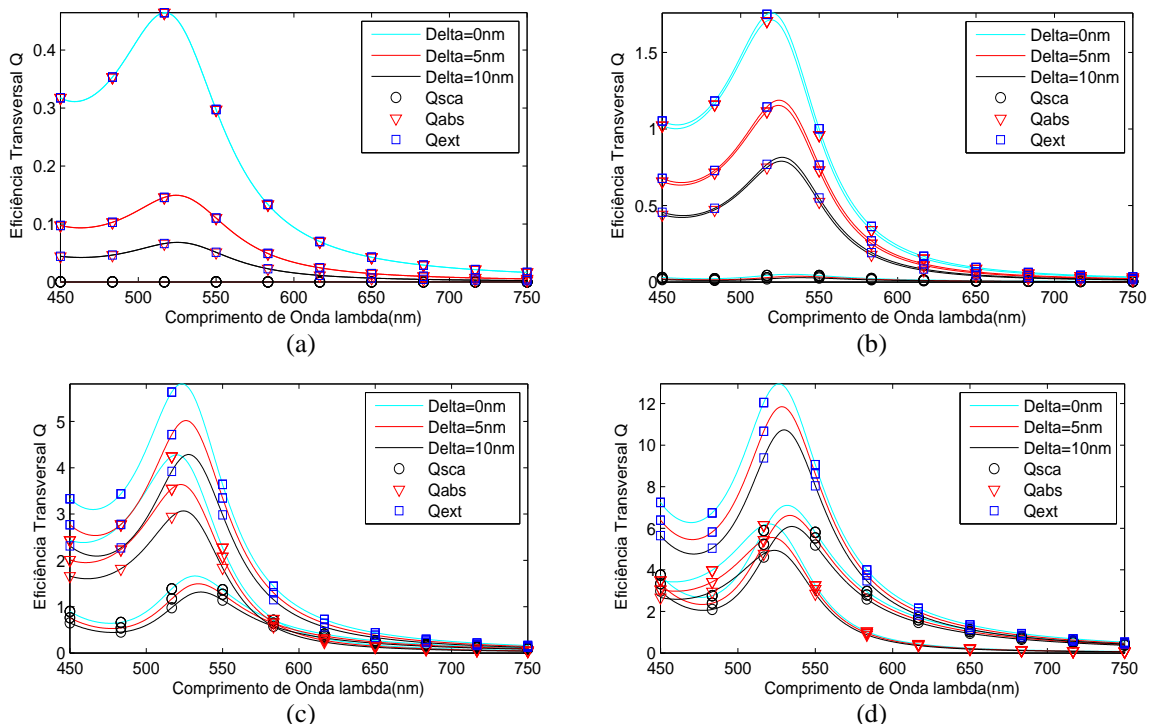


Figura 25 – Eficiência Transversal: (a) $a = 5nm$; (b) $a = 15nm$; (c) $a = 35nm$; (d) $a = 50nm$. Fonte: Autor.

É verificado na Fig. 25 que com o aumento da espessura da camada dielétrica há um decréscimo na eficiência de espalhamento e absorção, este é proveniente do aumento da seção transversal geométrica da partícula. Este efeito é mais intenso nas partículas pequenas, já que o núcleo metálico da partícula é o maior responsável pela dissipação de energia, e desta forma, para partículas maiores, a presença de uma fina camada passa a ser menos efetiva. A presença da camada dielétrica, no cálculo da seção transversal de extinção pode remeter em grande perda por espalhamento para partículas maiores [9], no entanto, utilizar a eficiência de extinção remete a demonstração do quanto este aumento é insignificante em relação ao aumento geométrico efetivo que a partícula recebe ao se introduzir a camada dielétrica [8].

Para as partículas menores a extinção total é causada pela característica absorvente, pois o espalhamento é mínimo, porém, com o aumento da NPM é verificada uma maior contribuição do espalhamento na dissipação de energia, e, por fim, um deslocamento no ponto de ressonância de extinção, caracterizando uma mudança na direção do espectro avermelhado. Ao analisarmos a região de ressonância, verificou-se que os picos localizaram-se aproximadamente na faixa de 516nm a 530nm para esferas sem casca, e com a presença da mesma, esta faixa foi deslocada para a direita, demonstrando a região do fenômeno de RSPL.

Este comportamento de espalhamento é característico em pequenas partículas, possuindo um acervo de estudos teóricos em diversas áreas, como por exemplo, no estudo do espalhamento da luz na atmosfera, que explica os fenômenos de coloração do céu [13].

6.3. CAMPOS ELÉTRICO E MAGNÉTICO NA INTERAÇÃO NPM-CAMPO UNIFORME

No capítulo 3, definimos as expressões dos campos elétricos e magnéticos resultantes da interação entre uma partícula do tipo core-shell e um campo uniforme. Podemos verificar a validade das expressões encontradas aplicando o limite:

$$\vec{E}_{esfera} = \lim_{\Delta \rightarrow 0, \epsilon_2 \rightarrow \epsilon_m} \vec{E}_{core-shell} \quad (222)$$

$$\vec{H}_{esfera} = \lim_{\Delta \rightarrow 0, \epsilon_2 \rightarrow \epsilon_m} \vec{H}_{core-shell} \quad (223)$$

que recaem ao modelo de uma esfera simples, modelo bastante difundido na teoria clássica [5 13,14,18,19,20]. Em posse das equações (140), (142), (195) e (197), foi verificado o módulo dos campos elétrico (Fig. 26) e magnético (Fig. 27) para partículas com núcleo de raio $a = 5nm, 15nm, 35nm$ e $50nm$, com casca dielétrica de espessura $\Delta = 0nm, 5nm$ e $10nm$, interagindo com um campo uniforme de amplitude unitária. Devido à simetria azimutal do problema, podemos verificar o campo de forma bidimensional, nas variáveis x e z do espaço.

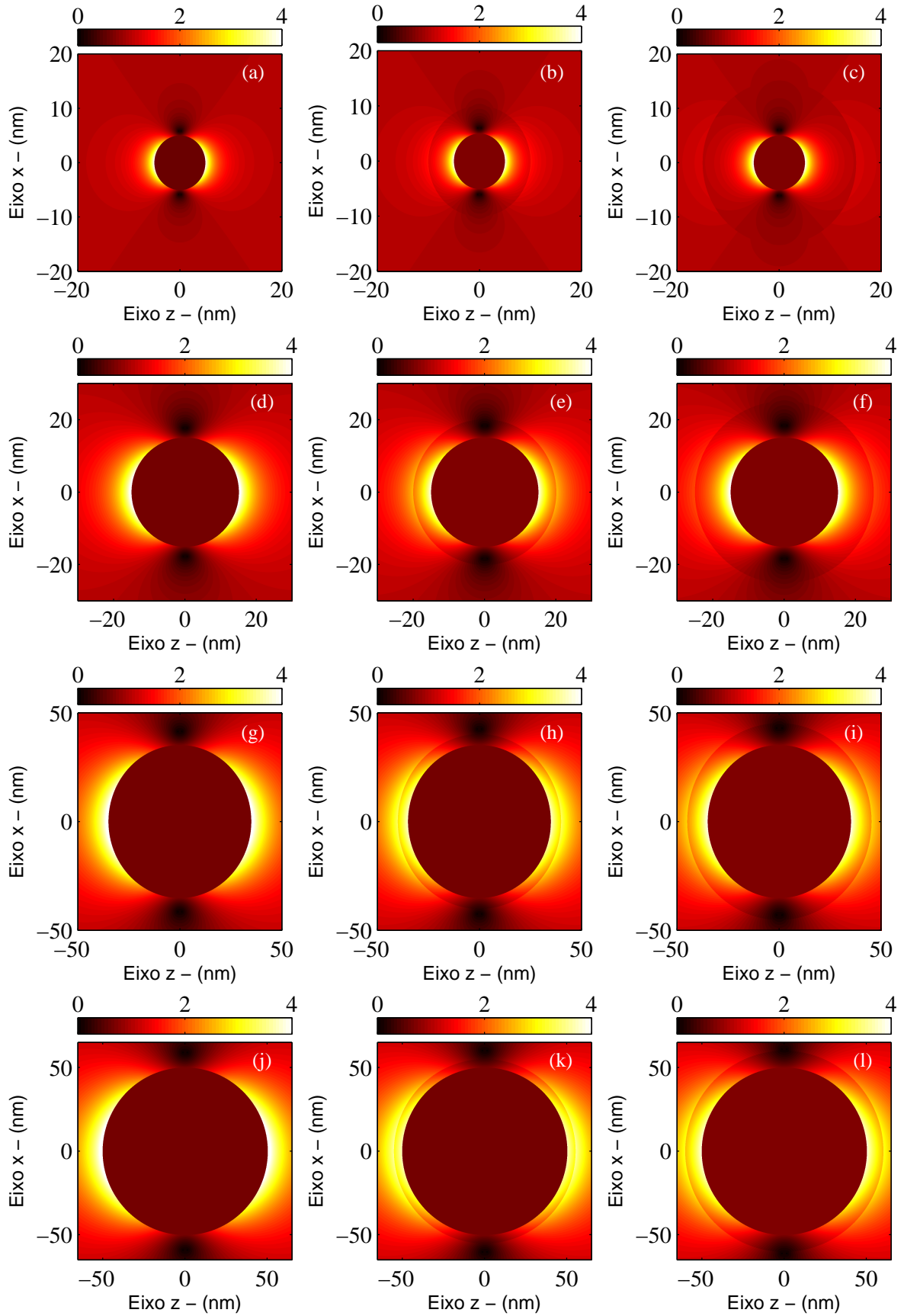


Figura 26 – Módulo do Campo Elétrico $|\vec{E}(r, \theta)|$: (a) $a = 5\text{nm}, \Delta = 0\text{nm}$; (b) $a = 5\text{nm}, \Delta = 5\text{nm}$; (c) $a = 5\text{nm}, \Delta = 10\text{nm}$; (d) $a = 15\text{nm}, \Delta = 0\text{nm}$; (e) $a = 15\text{nm}, \Delta = 5\text{nm}$; (f) $a = 15\text{nm}, \Delta = 10\text{nm}$; (g) $a = 35\text{nm}, \Delta = 0\text{nm}$; (h) $a = 35\text{nm}, \Delta = 5\text{nm}$; (i) $a = 35\text{nm}, \Delta = 10\text{nm}$; (j) $a = 50\text{nm}, \Delta = 0\text{nm}$; (k) $a = 50\text{nm}, \Delta = 5\text{nm}$; (l) $a = 50\text{nm}, \Delta = 10\text{nm}$. Fonte: Autor.

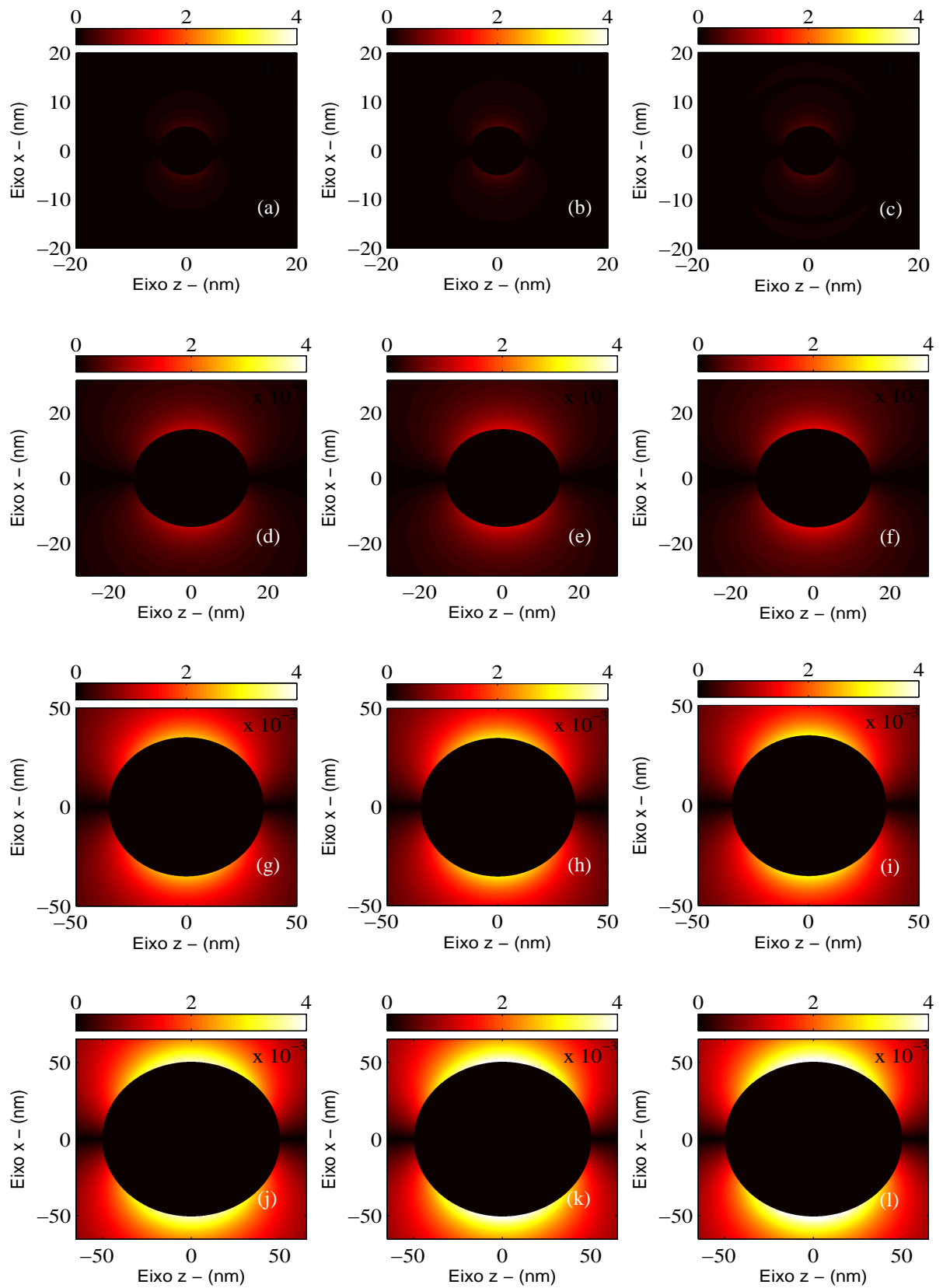


Figura 27 – Módulo do Campo Magnético $|\vec{H}(r, \theta)|$: (a) $a = 5nm, \Delta = 0nm$; (b) $a = 5nm, \Delta = 5nm$; (c) $a = 5nm, \Delta = 10nm$; (d) $a = 15nm, \Delta = 0nm$; (e) $a = 15nm, \Delta = 5nm$; (f) $a = 15nm, \Delta = 10nm$; (g) $a = 35nm, \Delta = 0nm$; (h) $a = 35nm, \Delta = 5nm$; (i) $a = 35nm, \Delta = 10nm$; (j) $a = 50nm, \Delta = 0nm$; (k) $a = 50nm, \Delta = 5nm$; (l) $a = 50nm, \Delta = 10nm$. Fonte: Autor.

Na Fig. 26 são perceptíveis duas características, o modo interno fundamental no limite em que a partícula é muito pequena, que corresponde ao campo elétrico interno uniforme, e a oscilação uniforme dos elétrons por todo o volume da NPM, caracterizando a oscilação dipolar, proveniente dos momentos de dipolo interno e externo.

Para o comprimento de onda adotado, verifica-se que o campo interno da partícula é muito fraco, de fato, menor que o campo incidido, este fenômeno indica que o metal para esta frequência começa a ganhar propriedades dielétricas, permitindo a propagação de um fraco campo em seu interior. Com o aumento do raio da partícula há um pequeno acréscimo no módulo do campo elétrico externo. Verifica-se também que o dipolo na superfície da camada de sílica possui uma amplitude reduzida em relação ao interno, isso ocorre porque a permissividade do meio e da camada sílica são próximas, e dessa forma o campo tende a manter uma continuidade na interface casca-meio. Note que as barras de cores dos gráficos foram normalizadas para variar na faixa de 0 a $4V/m$, tornando melhor a visualização. Os efeitos da variação da espessura da casca dielétrica no campo elétrico serão verificados na próxima seção.

Os gráficos da Fig. 27 tiveram suas barras de cores normalizadas para variar de 0 a $4mA/m$, a partir destes, podemos notar que o dipolo magnético induzido possui amplitude muito fraca, de fato, está de acordo com o constatado na teoria para o regime quase estático [5, 13]. Note também, que o dipolo é induzido a partir do núcleo, e apresenta continuidade na interface entre o dielétrico e o meio aquoso, não magnético ($\mu_0 = 1$). Em posse destas conclusões, nos limitaremos a analisar o campo elétrico nos tópicos posteriores.

A partir de (193), verificaremos o comportamento do potencial elétrico (Fig. 28), com referencia na origem, para três partículas de raio $a = 5m$ e cascas dielétricas $\Delta = 0nm, 5nm$ e $10nm$, com o intuito de observar as mudanças provocadas na interação:

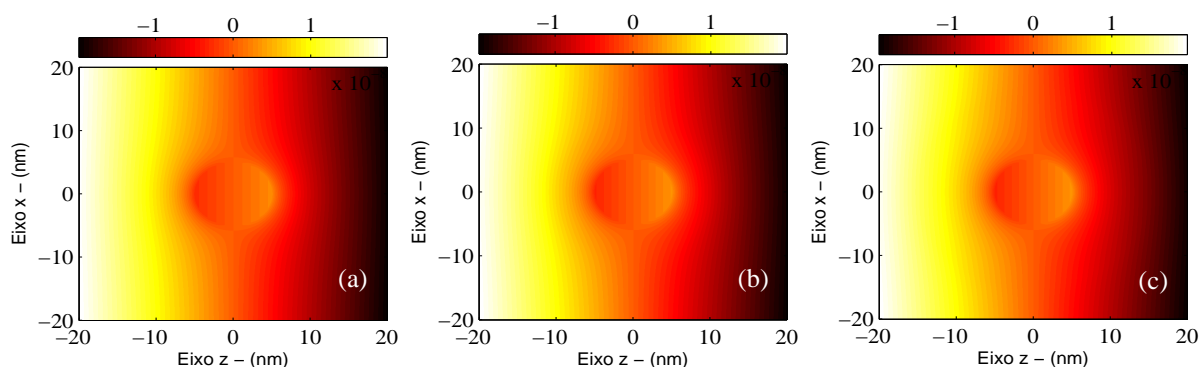


Figura 28 – Potencial Elétrico $V(r, \theta)$: (a) $a = 5nm, \Delta = 0nm$; (b) $a = 5nm, \Delta = 5nm$; (c) $a = 5nm, \Delta = 10nm$. Fonte: Autor.

É conhecido que em um campo uniforme, o potencial elétrico varia linearmente em uma dimensão, razão pela qual observamos o comportamento da Fig. 28, onde o potencial elétrico diminui na direção do campo elétrico e se eleva na direção oposta, caracterizando a fase do campo incidente. No entanto, verificamos que internamente ao núcleo da partícula, há uma inversão do comportamento do campo, que aumenta no sentido do campo elétrico incidente. Podemos verificar este fenômeno gerando gráficos da fase do campo elétrico (Fig. 29) para as três partículas utilizadas anteriormente:

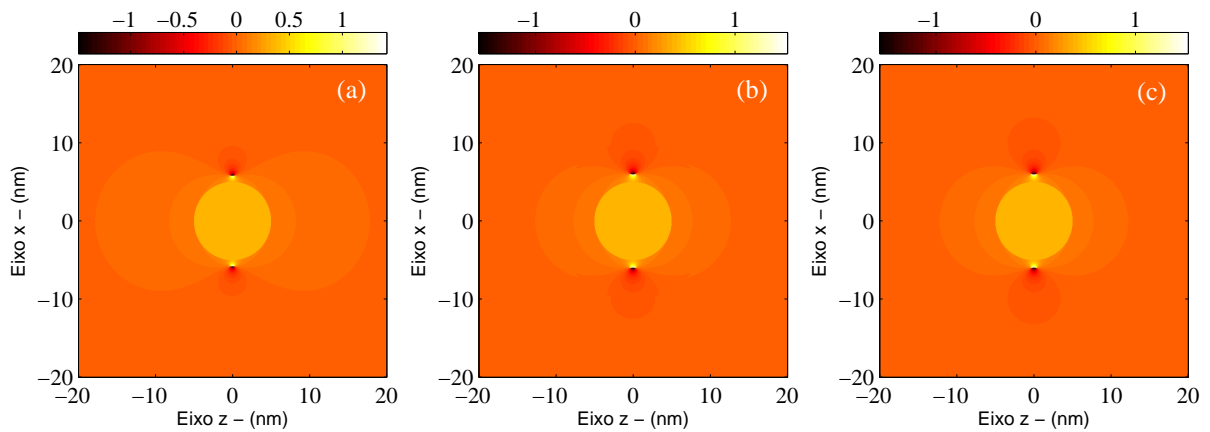


Figura 29 – Fase do Campo Elétrico $\angle \vec{E}(r, \theta)$: (a) $a = 5nm, \Delta = 0nm$; (b) $a = 5nm, \Delta = 5nm$; (c) $a = 5nm, \Delta = 10nm$. Fonte: Autor.

Como o constatado anteriormente, o campo interno possui defasagem em relação ao campo incidente, que possui fase nula, note que a casca dielétrica não introduz atraso de fase no campo em sua região. Uma segunda análise pode ser realizada utilizando o campo elétrico total em conjunto com o potencial elétrico (Fig. 30). O gráfico foi gerado para uma partícula de raio interno $a=50nm$ e espessura $\Delta= 10nm$:

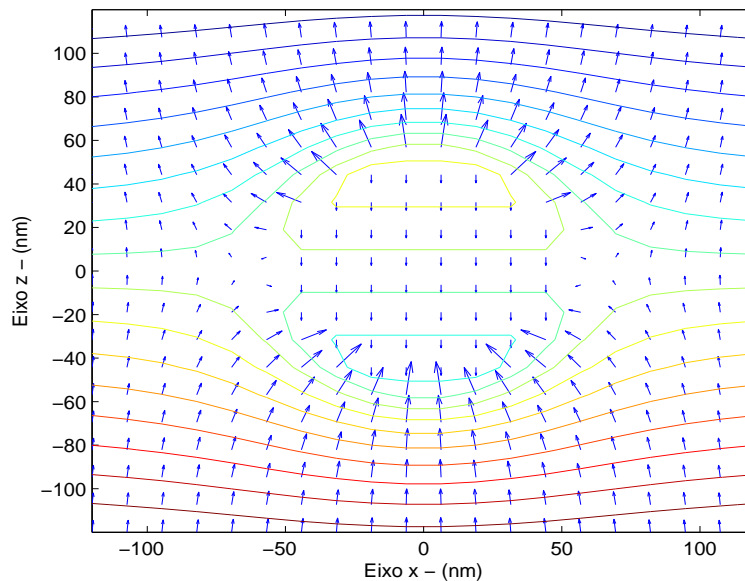


Figura 30 – Campo Elétrico Vetorial: $a = 50nm, \Delta = 10nm$. Fonte: Autor.

O campo interno à esfera de ouro possui um atraso de fase em relação ao campo incidente, esta é principal característica do efeito plasmônico no núcleo, causado pela parte real negativa da função dielétrica do metal. Note que em regiões distantes à partícula, o campo possui fase nula. Por fim, reunindo os resultados obtidos foram gerados dois gráficos tridimensionais (Fig. 31), com caráter demonstrativo, dos campos elétrico e magnético:

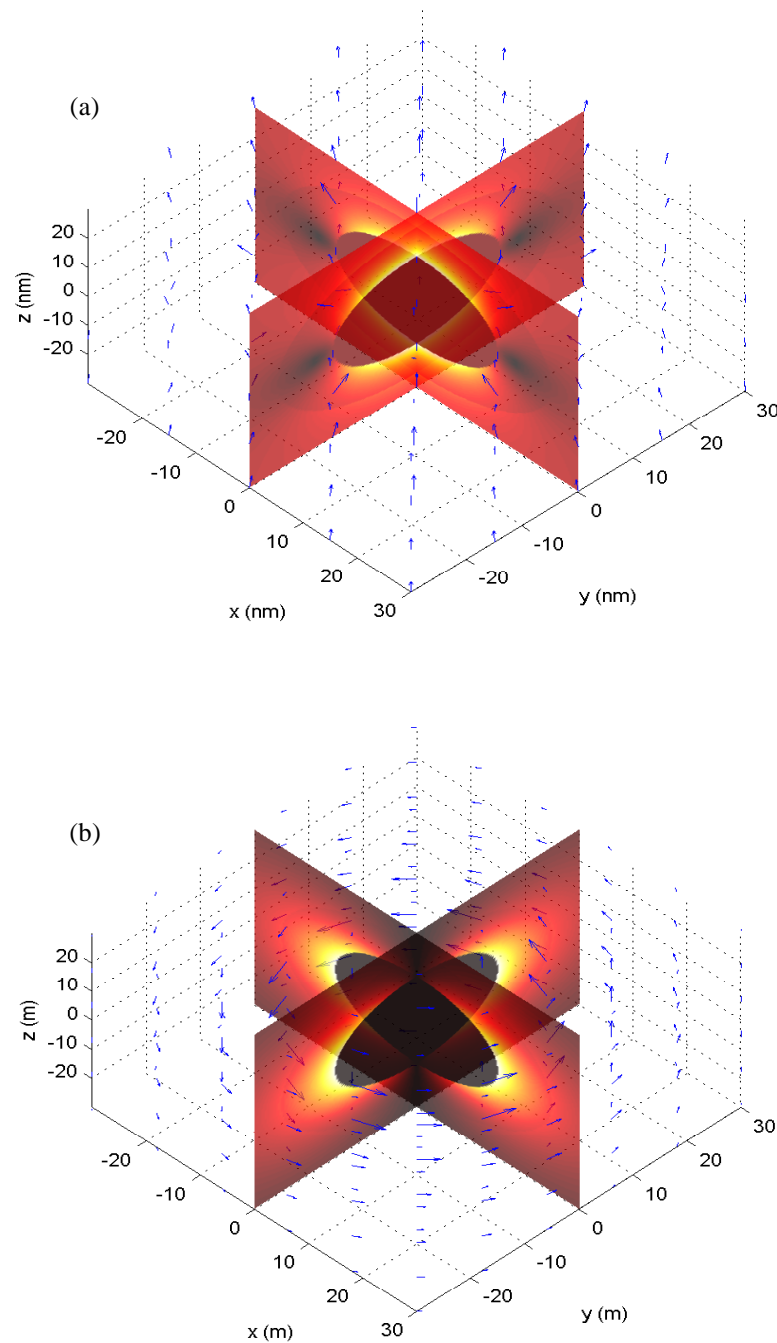
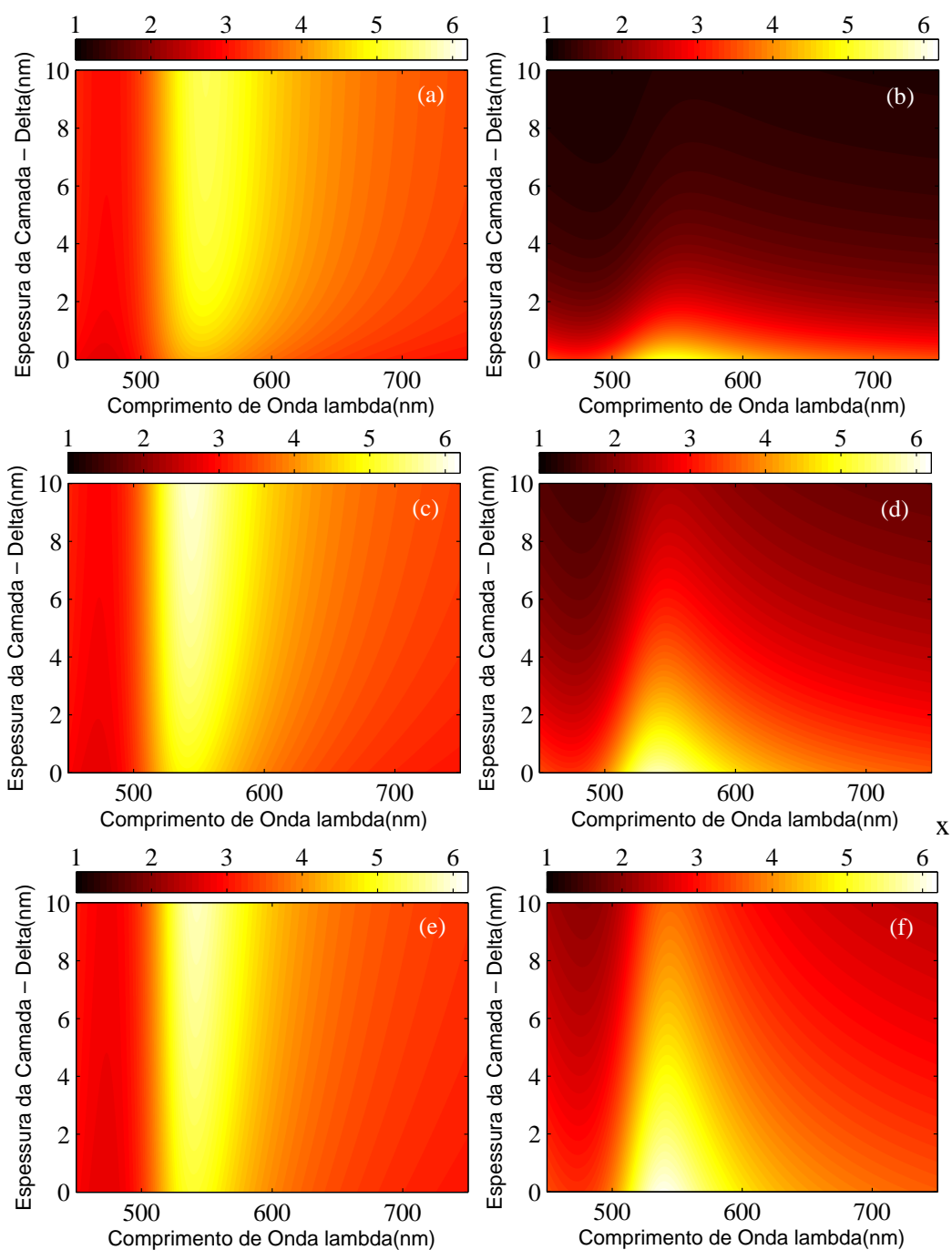


Figura 31: Campos total de uma partícula $a = 15nm$ e $\Delta = 10nm$: (a) Elétrico; (b) Magnético. Fonte: Autor

Note que ambos os campos apresentam características divergentes e rotacionais de acordo com a teoria clássica [12].

6.4. MÁXIMA INTENSIDADE DO CAMPO ELÉTRICO NA SUPERFÍCIE DO NÚCLEO E DA CAMADA DIELÉTRICA

Foram gerados resultados para quatro partículas de raio interno $a = 5\text{nm}$, 15nm , 35nm e 50nm na verificação do máximo campo elétrico dos dipolos induzidos (Fig. 32). Estas partículas tiveram a espessura de suas camadas variadas de 0 a 10nm, e foram submetidas a um campo incidente com variação do comprimento de onda de 450nm a 750nm. Os gráficos foram gerados em $r = a$, na superfície da esfera de ouro, e em $r = b$ na superfície da camada sílica, com $\theta = \phi = 0$, levando em conta a simetria azimutal:



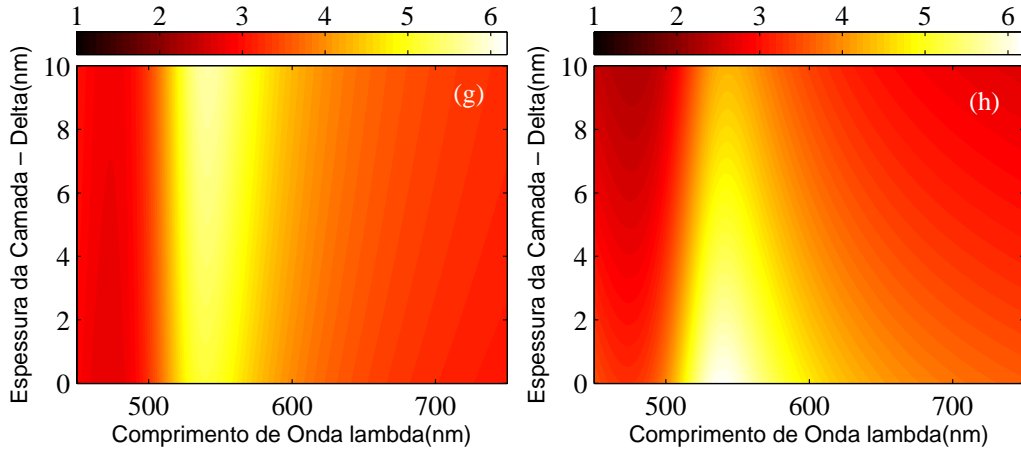


Figura 32 – Intensidade dipolar: (a) $r = a = 5nm$ (b) $r = b = 5nm + \Delta$ (c) $r = a = 15nm$ (d) $r = b = 15nm + \Delta$ (e) $r = a = 35nm$ (f) $r = b = 35nm + \Delta$ (g) $r = a = 50nm$ (h) $r = b = 50n + \Delta$. Fonte: Autor.

Primeiramente, é verificado que a região de ressonância está de acordo com o constatado na seção 6.2. Para as partículas com raio interno pequeno em relação à espessura da casca, o campo do dipolo interno é predominantemente mais intenso que o externo, esta característica é invertida à medida que a espessura da camada dielétrica é diminuída. Este efeito é estendido para as partículas maiores, onde com a diminuição da espessura da camada, se torna mais nítida a dominância do campo externo. Note que fora da região de ressonância os campos interno e externo tendem a possuir amplitude próxima.

6.5. COMPARAÇÃO DA ABSORVÂNCIA DE UM CONJUNTO DE NPM

Nesta seção, estamos interessados no resultado da interação entre um feixe de luz que se propaga na direção de \hat{a}_z , através de um conjunto de NPM (Fig. 20). Considerando que as partículas estão a uma distância d muito grande em relação às outras, e que o espalhamento individual seja independente e não interage com outras partículas, podemos aproximar a Absorvância para duas amostras, uma contendo NPM de $a = 10nm$, e outra contendo NPM de mesmo núcleo com casca $\Delta = 10nm$, utilizando (214) e comparar com resultados experimentais definidos em [11]:

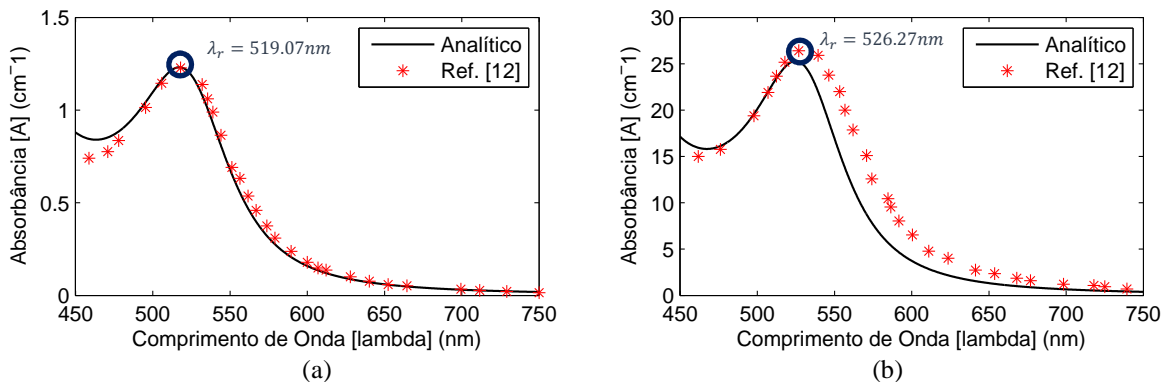


Figura 33 – Absorvância para NPM (a) Esfera $a = 10nm$, (b) Core-Shell $a = 10nm$ e $\Delta = 10nm$. Fonte: Autor

Foi verificado que a posição espectral da ressonância no resultado da Fig.33.a é fiel ao observado na eficiência de extinção para as partículas sem casca. Este efeito característico é causado pelo fenômeno RPSL, que em nanopartículas de ouro está centrada próximo ao comprimento de onda de 520nm, e o comportamento característico para valores de comprimento menores correspondem à absorção realizada pelos elétrons que trocam de banda. O resultado na Fig. 33.b apresentou um deslocamento considerável do ponto de ressonância para 529nm, causado pela presença da camada dielétrica.

6.6. CAMPO ELÉTRICO NO INTER-ACOPLAMENTO ENTRE NPM

Em nosso segundo caso, com o auxílio do COMSOL, foram verificadas as alterações sofridas pelo campo elétrico na presença de duas partículas próximas de raio interno 10nm e casca de espessura 10nm. Primeiramente, as NPM foram posicionadas paralelamente variando o gap d entre elas em 5nm e 20nm, com o campo \vec{E} polarizado em \hat{a}_z , como na Fig. 22.a:

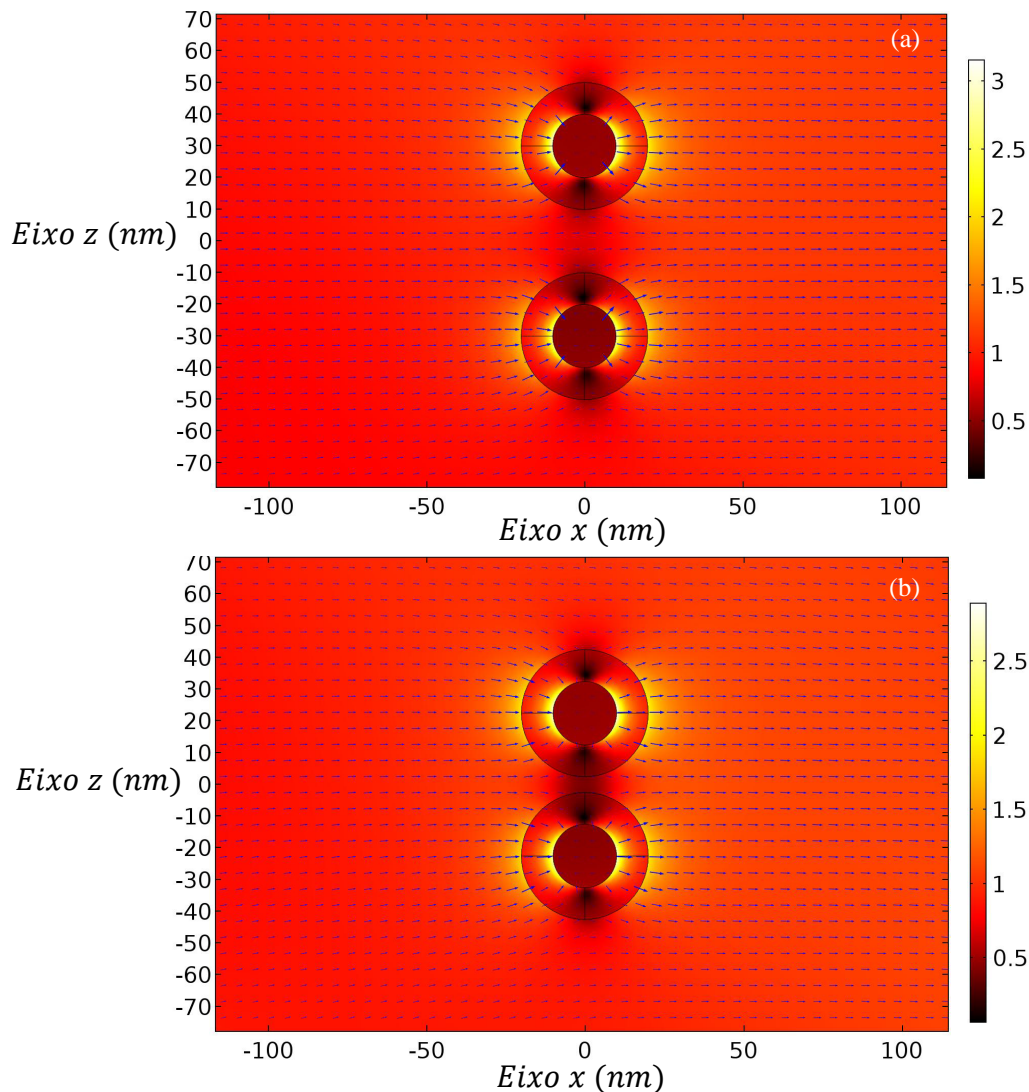


Figura 34 – Campo Elétrico no Acoplamento de duas Partículas: (a) $d = 20nm$ (b) $d = 5nm$. Fonte: Autor.

Em seguida, a geometria foi alterada, colocando as partículas de acordo com a Fig. 22.b:

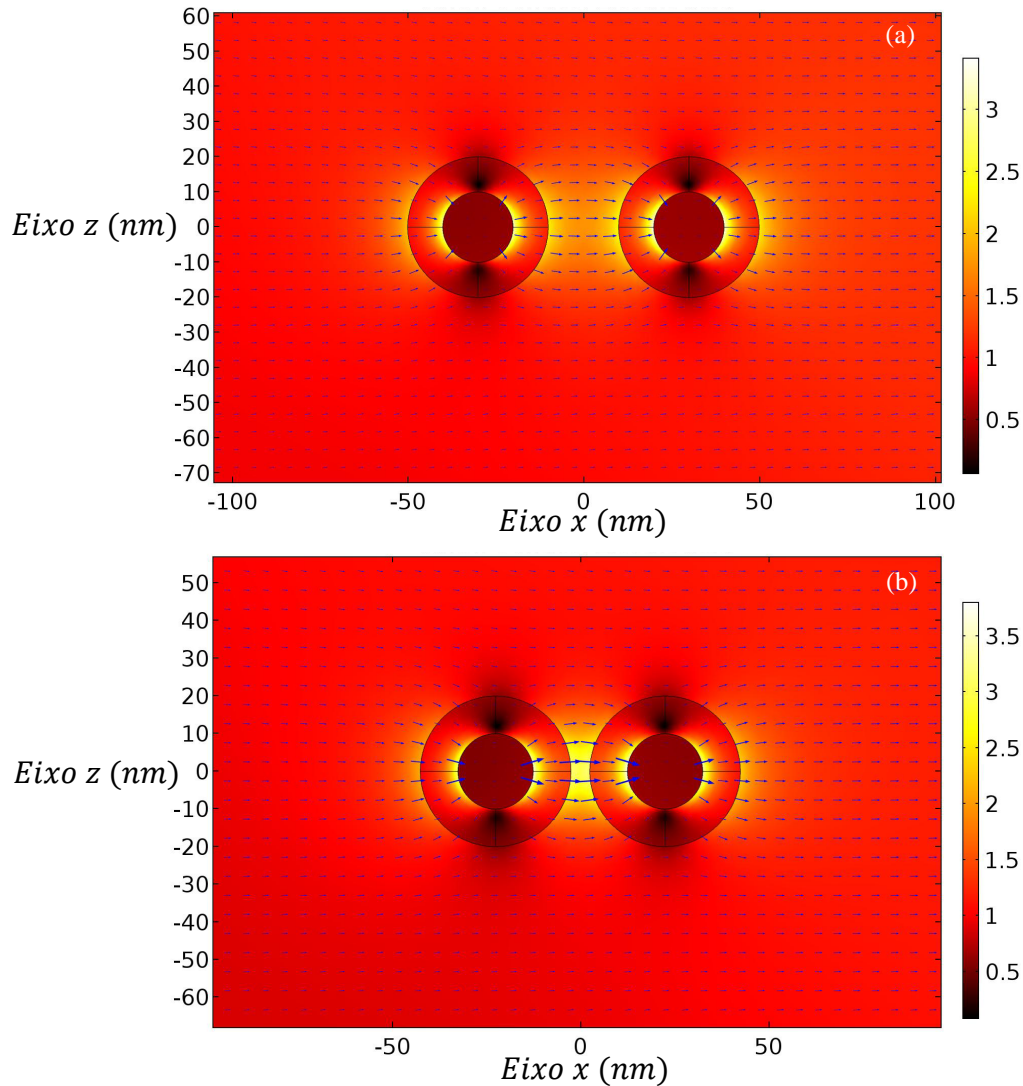


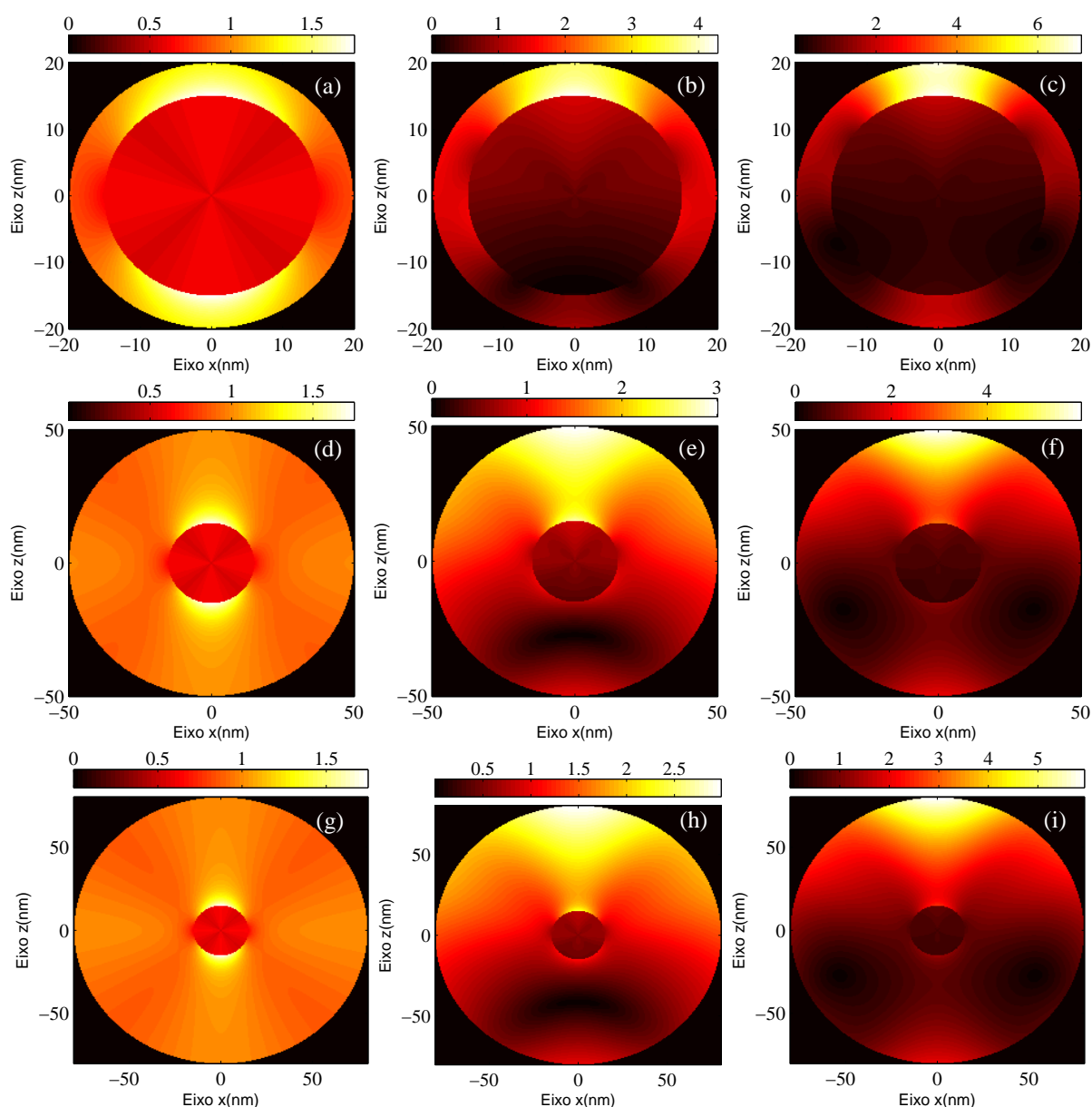
Figura 35 – Campo Elétrico no Acoplamento de duas Partículas: (a) $d = 20\text{ nm}$, (b) $d = 5\text{ nm}$. Fonte: Autor

No limite em que d é muito grande, não há interação entre os campos das partículas, recaindo no problema quase estático convencional. À medida que diminuimos esta distância, há o início de uma superposição não linear em função de d dos campos. Verificamos que na interação na forma da Fig. 34, há uma leve redução do campo na região do gap, e na forma da Fig. 35, há um efeito contrário, o mesmo é observado tanto internamente quanto externamente à partícula. Este realce no campo elétrico é proveniente do acoplamento capacitivo, e é originado a partir da indução de cargas entre as duas nanopartículas, que interagem mais fortemente à medida que se aproximam uma da outra.

Intuitivamente, pode-se perceber que o inter-acoplamento levará a mudanças na resposta espectral da ressonância plasmônica, em relação ao verificado até este momento, requisitando mais análises sobre estas interações entre NPM.

6.7. CAMPO ELÉTRICO NA INTERAÇÃO NPM-CAMPO DE UMA CARGA PONTUAL

Na seção 3.1 definimos a resposta do campo elétrico na interação entre uma NPM esférica e o campo de uma carga pontual, e, em seguida foi verificado que após realizar algumas aproximações o campo recai para o modelo da interação NPM-campo uniforme. Destas aproximações foi verificado que com o aumento coletivo de d_q e q , os termos $n = M \neq 1$ e 2, do somatório, se tornam irrelevantes na resposta do campo total. Nesta seção, fixaremos o valor da carga pontual na análise, de maneira a obtermos um campo uniforme de Amplitude unitária, e utilizando uma esfera, NPM de ouro, de raio $a = 15nm$, verificaremos o campo total para quatro casos, onde a distância entre a carga pontual e o centro de coordenadas será variada de acordo com a Tab. 3, utilizando de 1 a 3 termos do somatório na equação do campo total:



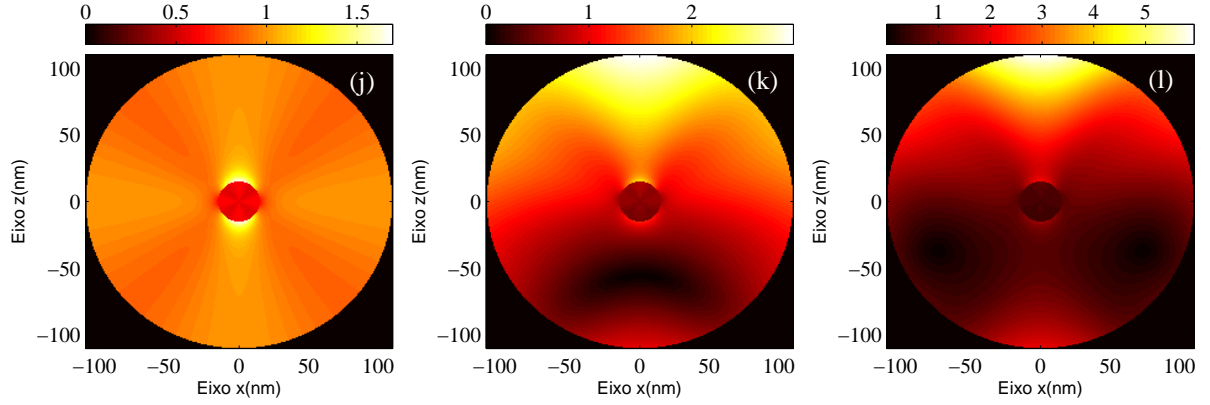


Figura 36 – Módulo do Campo Elétrico $|\vec{E}(r, \theta)|$: (a) $d_q = 20nm, M = 1$; (b) $d_q = 20nm, M = 2$; (c) $d_q = 20nm, M = 3$; (d) $d_q = 50nm, M = 1$; (e) $d_q = 50nm, M = 2$; (f) $d_q = 50nm, M = 3$; (g) $d_q = 80nm, M = 1$; (h) $d_q = 80nm, M = 2$; (i) $d_q = 80nm, M = 3$; (j) $d_q = 110nm, M = 1$; (k) $d_q = 110nm, M = 2$; (l) $d_q = 110nm, M = 3$. Fonte: Autor

No primeiro caso, em $d_q = 20nm$ (Fig. 36.a), a carga encontra-se próxima a partícula, nota-se que para $M = 1$, surgem os modos uniforme, dentro da NPM, e dipolar externo a mesma. Com a introdução do termo $M = 2$ (Fig. 36.b), o modo dipolar deixa de ser excitado, e há a amplificação do campo interno em uma pequena porção da partícula, especificamente a região próxima a carga. O comportamento se mantém em $M = 3$. (Fig. 36. c)

Com $d_q = 50nm$, as características anteriores ainda são observadas, com a mudança no surgimento de uma região de sombra no espaço oposto a carga, atrás da nanopartícula. No caso em que $d_q = 80nm$, o comportamento dipolar é mantido para $M = 1$ (Fig. 36.d), no entanto, em $M = 2$, a partícula mantém o campo dipolar fracamente, o que não havia ocorrido anteriormente (pelo menos não eficientemente), e a partir desta distância d_q , este será acentuado. Um comportamento interessante a se verificar é que, o campo interno a partícula se torna menos intenso e mais uniforme à medida que a NPM é afastada da carga pontual, o que já era esperado de acordo com a teoria clássica. Devemos ter mente que a interação possui simetria azimutal, e pode ser observada em qualquer disposição entre a partícula e a esfera. Em $d_q = 110nm$, as características se mantêm, com a alteração da diminuição da região de sombra, que deve diminuir com o aumento da distância d_q .

A partir de $d_q \geq 110nm$, intuitivamente, podemos assumir que o campo assumirá cada vez mais a característica uniforme, interagindo com a nanopartícula metálica, e resultando em uma oscilação dipolar, que pode ser analisada pelos métodos anteriores apresentados neste trabalho. Por fim, como observação, a presença do ruído em forma de x no interior da esfera se deve à imprecisão numérica no cálculo do campo, no entanto, os campos se comportaram de acordo com o estipulado pela teoria clássica, validando os resultados encontrados.

6.8. VALIDADE DO MÉTODO QUASE ESTÁTICO DE RAYLEIGH

O método aqui utilizado possui uma região de convergência em função das dimensões da partícula, e como foi definido anteriormente, ele baseia-se na suposição de que a nanopartícula possui raio muito menor que o comprimento de onda do campo incidente, $R \ll \lambda$, porém, apenas esta afirmação não é capaz de definir uma região de convergência do método.

O espalhamento de Mie é a solução exata, através das equações de Maxwell, para a interação entre uma partícula esférica de raio R e uma onda eletromagnética. Neste, o campo resultante da interação é uma superposição de modos normais, denominados harmônicos esféricos, descrevendo uma expansão multipolar [21]. O modelo de Mie pode ser reduzido para um comportamento dipolar quando são feitas as considerações de aproximação descritas no modelo de Rayleigh, $r \ll \lambda$, que para o modelo de Mie representa $x \ll 1$, termo definido no capítulo 5:

$$x = 2\pi \frac{R}{\lambda} \sqrt{\epsilon_m} \quad (224)$$

A partir de (224), a convergência do método pode ser observado na Fig. 31.

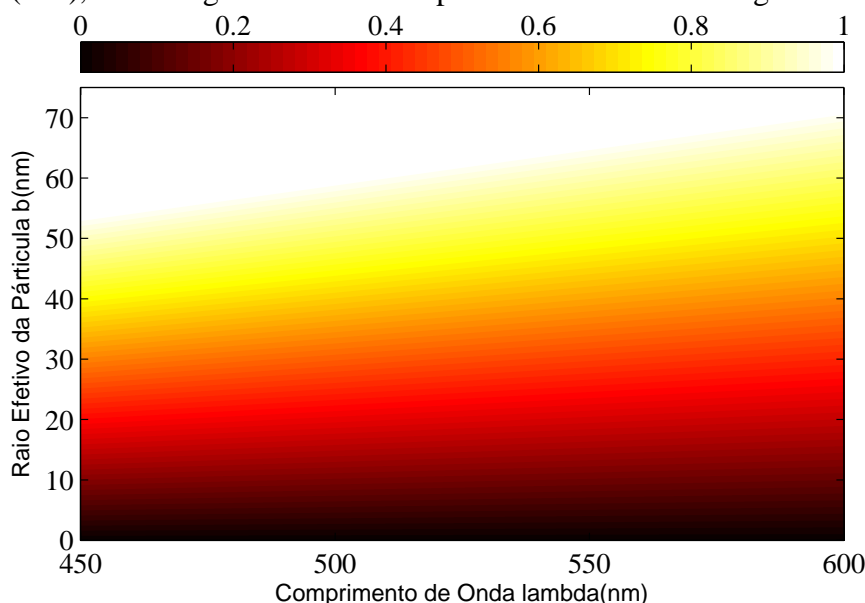


Figura 37 – Validade do Método: Parâmetro $x(R, \lambda)$. Fonte: Autor.

A partir da Fig. 37, verificamos que a convergência do método diminui com o aumento da frequência e o aumento do raio da NPM, quando x se aproxima de valores próximos de 1. Esta relação providencia numérica uma faixa de validade para o modelo quase estático.

É importante lembrar que a função dielétrica utilizada também possui uma região de convergência, e mesmo no modelo geral de Mie, a modelagem tem a tendência de divergir fora da região de convergência do modelo de Lorentz Drude.

CONSIDERAÇÕES FINAIS E CONCLUSÃO

Neste trabalho foi apresentado um estudo da interação eletromagnética entre uma nanopartícula, do tipo *core-shell*, e uma onda plana uniforme. Em um primeiro momento, verificamos a interação entre uma partícula esférica simples e o campo de uma carga pontual, onde foi constatado que com o aumento equilibrado da intensidade da carga e sua distância em relação à partícula, há uma transição onde o campo assume característica uniforme e aproximadamente invariante com o espaço, caracterizando a interação uniforme de uma onda plana orientada em uma direção. Este fato foi comprovado após realizarmos a análise desta interação na seção 3.2, onde foram definidos os modos fundamentais do regime quase estático variante harmonicamente no tempo como definido pelo modelo de Rayleigh, o dipolar e o uniforme. Por fim, obteve-se sucesso ao modelar a interação para uma NPM do tipo *Core-Shell*, auxiliado pelas análises anteriores. Verificou-se a presença de dois dipolos que surgiram um na interface metal-dielétrico e outro na interface dielétrico-meio aquoso.

No cálculo das eficiências das seções transversais de dispersão, foi verificado que a banda de ressonância das NPM do tipo *core-shell* sofre deslocamento com a mudança da espessura da camada dielétrica, fator que altera o ponto da RSPL. Ao compararmos os parâmetros de Absorbância, verificamos que as envoltórias das curvas são próximas, certificando os resultados de extinção obtidos.

Observando o comportamento dos campos eletromagnéticos nas mudanças dos parâmetros dimensionais da NPM, constatou-se que o campo magnético neste regime apresenta fraca interação, e para partículas com fina camada, o campo dipolar externo é mais intenso. A análise numérica mostrou os efeitos da interação entre os campos espalhados, no entanto, uma análise mais aprofundada sobre a eficiência de extinção é requerida, e proposta para futuros trabalhos. Foi verificado que em partículas menores, a característica absorvente é predominante, e com o aumento da NPM, o espalhamento passa a ter maiores efeitos na extinção total alterando a ressonância e configurando mudanças no espectro.

Verificamos também que em partículas com raio maiores que $30nm$ o método de Rayleigh começa a divergir, no entanto, foi verificada amplificação no espalhamento nestas dimensões, o que está de acordo com teoria clássica. Desta forma, torna-se possível utilizar as polarizabilidades aqui definidas, por exemplo, para modelos de permissividade efetiva, como a de Clausius Mossotti e Maxwell Garnett, em aproximações de arranjos de nanopartículas, proposta para trabalhos posteriores.

APÊNCIDE A - MODELAGEM ANALÍTICA DO PROBLEMA GERAL

A.1 RESOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DIFERENCIAL PARCIAL (EDP) DE LAPLACE COM SIMETRIA AZIMUTAL PELO MÉTODO DE SEPARAÇÃO DE VARIÁVEIS

A primeira etapa do trabalho de resumiu em o potencial elétrico resultante da interação entre um campo eletromagnético e uma esfera com dimensões demonstradas na Fig. A1. Sendo o comprimento de onda do campo muito maior que as dimensões da esfera, o problema se resumiu em determinar a solução para a equação de Laplace em coordenadas esféricas (A1). Para resolver tal problema, aplicamos o método de separação de variáveis, que se resume em fazer a suposição de que a solução para equação de Laplace é dada por (A2):

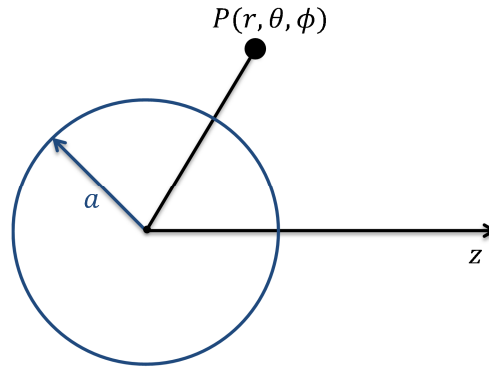


Figura A1 – Esfera com centro na origem; Fonte: Autor.

$$\nabla^2 V = 0 \quad (A1)$$

$$V(r, \theta, \phi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\phi) \quad (A2)$$

Na equação de Laplace (A1), obtida a partir do laplaciano em coordenadas esféricas, são substituídos os termos de (A2) e suas respectivas derivas parciais em (A1), em seguida multiplicamos por $\frac{r^2 \sin^2 \theta}{R \Phi \Theta}$ ambos os lados da expressão:

$$\frac{r^2 \sin^2 \theta}{R \Phi \Theta} \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) \right) \Theta \Phi + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Theta}{\partial \theta} \right) R \Phi + \frac{1}{\Phi} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \phi^2} = 0 \quad (A3)$$

$$\sin^2 \theta \left(\frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{1}{\sin \theta} \frac{1}{\Theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Theta}{\partial \theta} \right) \right) + \frac{1}{\Phi} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \phi^2} = 0 \quad (A4)$$

A única parcela da equação (A4) que apresenta dependência da variável ϕ é $\frac{1}{\Phi} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \phi^2}$, logo essa parcela deve ser constante e a definiremos como $-m^2$:

$$\frac{1}{\Phi} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \phi^2} = -m^2 \quad (A5)$$

Substituindo (A5) em (A4).

$$\sin^2 \theta \left(\frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{1}{\sin \theta} \frac{1}{\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Theta}{\partial \theta} \right) \right) - m^2 = 0 \quad (\text{A6})$$

Deseja-se separar a equação diferencial parcial (EDP) (A6) através da constante arbitrária λ , e dessa forma encontrar três equações diferenciais ordinárias (EDO).

$$\frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) = \frac{m^2}{\sin^2 \theta} - \frac{1}{\sin \theta} \frac{1}{\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Theta}{\partial \theta} \right) = \lambda \quad (\text{A7})$$

A partir de (A7) podemos realizar a separação de variáveis, e em seguida determinar as equações diferenciais ordinárias (A8), (A9) e (A10).

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial \phi^2} + \Phi m^2 = 0 \quad (\text{A8})$$

$$\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) - \lambda R = 0 \therefore r^2 \frac{\partial^2 R}{\partial r^2} + 2r \frac{\partial R}{\partial r} - \lambda R = 0 \quad (\text{A9})$$

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Theta}{\partial \theta} \right) + \Theta \left(\lambda - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right) = 0 \quad (\text{A10})$$

Note que a equação diferencial parcial resultou em três equações diferenciais ordinárias, reduzindo a complexidade de uma equação em três equações simplificadas.

A.2 EQUAÇÃO DIFERENCIAL HOMOGENEA LINEAR

A equação diferencial homogênea (A8) é do tipo linear, e possui resposta conhecida, sua solução pode ser obtida na forma de uma combinação linear de exponenciais, dessa forma, supomos que (A11) é uma possível solução da equação diferencial ordinária. De fato, para que isso seja verdade, nossa solução deve respeitar a propriedade da identidade, e deve zerar a EDO ao ser substituído em (A8), enfim o trabalho se resume em determinar a constante l :

$$\Phi(\phi) = C e^{l\phi} \quad (\text{A11})$$

$$e^{l\phi} C(l^2 + m^2) = 0, \quad l = \pm jm \quad (\text{A12})$$

A.2.1 SOLUÇÃO NA FORMA DE COMBINAÇÃO LINEAR DE EXPONENCIAIS

Determinada a constante l , encontramos a solução para equação diferencial ordinária:

$$\Phi = C_1 e^{jm\phi} + C_2 e^{-jm\phi} \quad (\text{A13})$$

Para problemas com simetria azimutal, a função não apresenta variação em ϕ , portanto:

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial \phi^2} = 0 \therefore \Phi m^2 = 0 \therefore m = 0 \quad (\text{A14})$$

$$\Phi = C_1 e^0 + C_2 e^0 = K \quad (\text{A15})$$

Perceba que a partir de (A15), a solução para EDO se torna a constante K , e será determinada pelas condições de contorno.

A.3 EQUAÇÃO DIFERENCIAL DE CAUCHY-EULER

A equação (A14) é conhecida por ser uma das mais simples equações diferenciais de segunda ordem com coeficientes variáveis, tal equação possui o nome de Equação de Cauchy-Euler, e uma de suas possíveis soluções é pelo método de série de Frobenius [17].

A.3.1 SOLUÇÃO PELO MÉTODO DE SÉRIE DE FROBENIUS

A generalização de métodos de séries de potência introduzidos por Frobenius permite que a solução para uma equação diferencial homogênea linear seja desenvolvida sobre um ponto singular regular x_0 . Ele considera uma equação diferencial na forma (A16) e estabelece o resultado na forma de série de potências (A17) que é afirmado sem provas [17].

$$x^2 \frac{\partial^2 y}{\partial x^2} + xp(x) \frac{\partial y}{\partial x} + q(x)y = 0 \quad (\text{A16})$$

$$R(r) = (r - r_0)^c \sum_{l=0}^{\infty} a_l (r - r_0)^l \quad (\text{A17})$$

O teorema ainda nos afirma que para tal situação existem duas soluções para a equação diferencial, e podem ser determinadas a partir da equação indicial (A18).

$$c(c - 1) + c p(0) + q(0) = 0 \quad (\text{A18})$$

Uma rápida comparação entre as equações (A9) e (A18) nos mostra que os polinômios $p(r)$ e $q(r)$ são respectivamente:

$$p(r) = 2 \quad \therefore \quad q(r) = -\lambda \quad (\text{A19})$$

Analisando o ponto singular $r_0 = 0$, e resolvendo a equação indicial:

$$c^2 + c - \lambda = 0 \quad \text{com } \lambda = n(n + 1) \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots, \quad [\text{18}]. \quad (\text{A20})$$

$$c = \frac{-1 \pm \sqrt{1 + 4\lambda}}{2} \leftrightarrow c = \frac{-1 \pm \sqrt{4\left(n^2 + n + \frac{1}{4}\right)}}{2} = \frac{-1 \pm 2\left(n + \frac{1}{2}\right)}{2} \quad (\text{A21})$$

$$c = \begin{cases} n \\ -(n + 1) \end{cases} \quad (\text{A22})$$

Como a equação indicial é quadrática em c , devemos verificar as relações entre as raízes c_1 e c_2 . Uma rápida análise nos revela que a diferença entre as raízes resulta em um número inteiro (A22), e dessa forma o teorema não nos garante uma segunda solução na forma de série de potência comum para a menor raiz [17].

$$\text{Relação} = c_1 - c_2 = n + n + 1 = 2n + 1; \text{Relação} \in \mathbb{N}^* \quad (\text{A23})$$

Para as raízes encontradas, o teorema de Frobenius nos propõe duas soluções, (A24) e (A25), para a equação diferencial, ou melhor, a combinação linear das duas soluções (A26) como resposta para a equação diferencial [17]:

$$R_1(r) = r^{c_1} \sum_{l=0}^{\infty} a_l r^l \quad (\text{A24})$$

$$R_2(r) = AR_1(r) \ln|r| + r^{c_2} \sum_{l=0}^{\infty} b_l r^l \quad (\text{A25})$$

$$R(r) = R_1(r) + R_2(r) \quad (\text{A26})$$

Com suas respectivas derivadas:

$$\frac{\partial R_1}{\partial r} = \sum_{l=0}^{\infty} a_l (c_1 + l) r^{l+c_1-1}, \quad \frac{\partial^2 R_1}{\partial r^2} = \sum_{l=0}^{\infty} a_l (c_1 + l)(c_1 + l - 1) r^{l+c_1-2}, \quad (\text{A27})$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial R_2}{\partial r} &= A \left[\frac{\partial R_1}{\partial r} \ln|r| + \frac{R_1}{r} \right] + \sum_{l=0}^{\infty} b_l (c_2 + l) r^{l+c_2-1}, \quad \frac{\partial^2 R_2}{\partial r^2} \\ &= A \left[\frac{\partial^2 R_1}{\partial r^2} \ln|r| + \frac{2}{r} \frac{\partial R_1}{\partial r} - \frac{R_1}{r^2} \right] + \sum_{l=0}^{\infty} b_l (c_2 + l)(c_2 + l - 1) r^{l+c_2-2} \end{aligned} \quad (\text{A28})$$

A.3.2.2 SOLUÇÃO PARA A PRIMEIRA RAIZ DA EQUAÇÃO INDICIAL

Determinaremos agora a primeira solução de Frobenius, para isso substituiremos (A24) e (86) em (68) e logo em seguida expandiremos a série para resolver a identidade.

$$r^2 \sum_{l=0}^{\infty} a_l (c_1 + l)(c_1 + l - 1) r^{l+c-2} + 2r \sum_{l=0}^{\infty} a_l (c_1 + l) r^{l+c_1-1} - \lambda \sum_{l=0}^{\infty} a_l r^{l+c_1} = 0 \quad (\text{A29})$$

$$\sum_{l=0}^{\infty} a_l (c_1 + l)(c_1 + l - 1) r^{l+c_1} + \sum_{l=0}^{\infty} 2a_l (c_1 + l) r^{l+c_1} + \sum_{l=0}^{\infty} -\lambda a_l r^{l+c_1} = 0 \quad (\text{A30})$$

$$\sum_{l=0}^{\infty} a_l [(c_1 + l)(c_1 + l - 1) + 2(c_1 + l) - \lambda] r^{l+c_1} = 0 \quad \therefore a_l \neq 0, x^{c+l_1} \neq 0 \quad (\text{A31})$$

$$(c_1 + l)(c_1 + l - 1) + 2(c_1 + l) - \lambda = 0 \quad \therefore l^2 + l(2c_1 + 1) + (c_1^2 + c_1 - \lambda) = 0 \quad (\text{A32})$$

$$l = \frac{-(2c_1 + 1) \pm \sqrt{(2c_1 + 1)^2 - 4(c_1^2 + c_1 - \lambda)}}{2} \quad \therefore \lambda = n(n + 1) \quad \therefore c_1 = n \quad (\text{A33})$$

$$l = \frac{-(2n + 1) \pm \sqrt{4\left(n^2 + n + \frac{1}{4}\right)}}{2} = \frac{-(2n + 1) \pm \sqrt{4\left(n + \frac{1}{2}\right)^2}}{2} \quad \therefore l = \begin{cases} 0 \\ -2n - 1 \end{cases} \quad (\text{A34})$$

A identidade foi resolvida para apenas dois valores de l (A34). Perceba que apenas o maior valor atende aos requisitos do somatório, já que o mesmo sempre inicia em valores maiores que zero, e o segundo valor encontrado para l é menor que zero dessa forma a solução para a maior raiz da equação indicial é dada por (A36):

$$l = 0 \text{ com } l \geq 0 \text{ para } n \geq 0 \quad (\text{A35})$$

$$R_1(r) = a_0 r^n r^0 = a_0 r^n \quad (\text{A36})$$

A.3.2.3 SOLUÇÃO PARA A SEGUNDA RAIZ DA EQUAÇÃO INDICIAL

Para determinarmos a solução para a menor raiz da equação indicial, precisaremos da solução encontrada na seção anterior, assim como de suas derivadas. Substituindo (A25), (A28) e (A37) em (A9), e resolvendo a identidade:

$$R_1 = a_0 r^n \quad \frac{\partial R_1}{\partial r} = a_0 n r^{n-1} \quad \frac{\partial^2 R_1}{\partial r^2} = a_0 n(n-1) r^{n-2} \quad (\text{A37})$$

$$\begin{aligned} r^2 \left(A \left[\frac{\partial^2 R_1}{\partial r^2} \ln|r| + \frac{2}{r} \frac{\partial R_1}{\partial r} - \frac{R_1}{r^2} \right] + \sum_{l=0}^{\infty} b_l (c_2 + l)(c_2 + l - 1) r^{l+c_2-2} \right) \\ + 2r \left(A \left[\frac{\partial R_1}{\partial r} \ln|r| + \frac{R_1}{r} \right] + \sum_{l=0}^{\infty} b_l (c_2 + l) r^{l+c_2-1} \right) \\ - \lambda \left(A R_1(r) \ln|r| + r^{c_2} \sum_{l=0}^{\infty} b_l r^l \right) = 0 \end{aligned} \quad (\text{A38})$$

$$\begin{aligned} A \left\{ r^2 \left[\frac{\partial^2 R_1}{\partial r^2} \ln|r| + \frac{2}{r} \frac{\partial R_1}{\partial r} - \frac{R_1}{r^2} \right] + 2r \left[\frac{\partial R_1}{\partial r} \ln|r| + \frac{R_1}{r} \right] - \lambda [R_1(r) \ln|r|] \right\} \\ + \left\{ r^2 \sum_{l=0}^{\infty} b_l (c_2 + l)(c_2 + l - 1) r^{l+c_2-2} + 2r \sum_{l=0}^{\infty} b_l (c_2 + l) r^{l+c_2-1} \right. \\ \left. - \lambda r^{c_2} \sum_{l=0}^{\infty} b_l r^l \right\} = 0 \end{aligned} \quad (\text{A39})$$

$$\begin{aligned} A \left\{ r^2 \left[(a_0 n(n-1) r^{n-2}) \ln|r| + \frac{2}{r} (a_0 n r^{n-1}) - \frac{(a_0 r^n)}{r^2} \right] \right. \\ \left. + 2r \left[(a_0 n r^{n-1}) \ln|r| + \frac{(a_0 r^n)}{r} \right] - \lambda [(a_0 r^n) \ln|r|] \right\} \\ + \left\{ \sum_{l=0}^{\infty} b_l [(c_2 + l)(c_2 + l - 1) + 2(c_2 + l) - \lambda] r^{l+c_2} \right\} = 0 \end{aligned} \quad (\text{A40})$$

Efetuada a distribuição das potencias de r e colocando em evidência a_0, r^n, b_l, r^{n+l} e $\ln r$ em (A40):

$$A\{a_0[n(n-1)\ln|r| + 2n-1]r^n + 2a_0[n\ln|r| + 1]r^n + a_0[-\lambda\ln|r|]r^n\} + \left\{ \sum_{l=0}^{\infty} b_l[(c_2+l)(c_2+l-1) + 2(c_2+l) - \lambda]r^{l+c_2} \right\} = 0 \quad (\text{A41})$$

$$Aa_0r^n\{\ln|r|[n(n-1) - \lambda + 2n] + 2n - 1 + 2\} + \left\{ \sum_{l=0}^{\infty} b_l[(c_2+l)(c_2+l-1) + 2(c_2+l) - \lambda]r^{l+c_2} \right\} = 0 \therefore \lambda = n(n+1) \quad (\text{A42})$$

$$Aa_0r^n\{2n+1\} + \left\{ \sum_{l=0}^{\infty} b_l[(c_2+l)(c_2+l-1) + 2(c_2+l) - \lambda]r^{l+c_2} \right\} \therefore 0 \neq \begin{cases} a_0 \\ b_l \\ r^n \\ r^{l+c_2} \\ 2n+1 \end{cases} \quad (\text{A43})$$

$$[(c_2+l)(c_2+l-1) + 2(c_2+l) - \lambda] = 0 = A \quad (\text{A44})$$

$$l^2 + l(2c_2+1) + (c_2^2 + c_2 - \lambda) = 0 \quad (\text{A45})$$

$$l = \frac{-(2c_2+1) \pm \sqrt{(2c_2+1)^2 - 4(c_2^2 + c_2 - \lambda)}}{2} \therefore \lambda = n(n+1) \therefore c_2 = -(n+1) \quad (\text{A46})$$

$$l = \frac{2n+1 \pm \sqrt{(-1)^2(2n+1)^2 - 4(n^2 + 2n+1 - n - 1 - n^2 - n)}}{2} \quad (\text{A47})$$

$$\frac{2n+1 \pm \sqrt{(2n+1)^2}}{2} = \frac{2n+1 \pm (2n+1)}{2} \therefore l = \begin{cases} 2n+1 \\ 0 \end{cases} \text{ com } l \geq 0 \text{ para } n \geq 0 \quad (\text{A48})$$

Perceba que, desta vez, os dois valores de l são maiores que zero, e por isso, os dois serão utilizados na solução dois. Levando em conta a consideração feita em (A48) e fazendo as devidas substituições:

$$R_2(r) = b_0r^{-(n+1)}r^0 + b_{2n+1}r^{-(n+1)}r^{2n+1} = R_2(r) = b_0r^{-(n+1)} + b_{2n+1}r^n \quad (\text{A49})$$

Utilizando os resultados obtidos em (A36) e (A49), e substituindo-os em (A26) obtemos a solução para equação diferencial de Cauchy-Euler que possui estrutura:

$$R(r) = R_1 + R_2 = a_0r^n + b_0r^{-(n+1)} + b_{2n+1}r^n = (a_0 + b_{2n+1})r^n + b_0r^{-(n+1)} \quad (\text{A50})$$

Podemos reescrever os coeficientes da expressão sem perda de generalidade, desde que eles se ajustarão as condições de contorno do problema. Dessa forma, a solução pode ser escrita na forma (A51):

$$R(r) = a_nr^n + b_nr^{-(n+1)} \quad (\text{A51})$$

A.4 EQUAÇÃO DIFERENCIAL DE LEGENDRE

Primeiramente, desejamos encontrar uma equação diferencial independente de funções senoidais, assim, realizaremos substituições de modo a deixar a equação (A10) com uma característica mais comum, sendo ela em y dependente de x , assim:

$$x = \cos \theta, \text{ para } -1 \leq x \leq 1 \text{ onde } 0 \leq \theta \leq \pi \text{ e } \theta = y \quad (\text{A52})$$

Por meio de relações trigonométricas e aplicando a regra da cadeia, modificamos:

$$\sin \theta = \sqrt{1 - \cos^2 \theta} = \sqrt{1 - x^2} \quad (\text{A53})$$

$$\frac{\partial}{\partial \theta} = \frac{\partial x}{\partial \theta} \frac{\partial}{\partial x} \therefore \frac{\partial}{\partial \theta} = -\sin \theta = -\sqrt{1 - x^2} \frac{\partial}{\partial x} \quad (\text{A54})$$

Substituindo (112) e (113) em (69):

$$\frac{1}{\sqrt{1 - x^2}} \sqrt{1 - x^2} \frac{\partial}{\partial x} \left(\sqrt{1 - x^2} \sqrt{1 - x^2} \frac{\partial y}{\partial x} \right) + y \left(\lambda - \frac{m^2}{(\sqrt{1 - x^2})^2} \right) = 0 \quad (\text{A55})$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \left((1 - x^2) \frac{\partial y}{\partial x} \right) + y \left(\lambda - \frac{m^2}{1 - x^2} \right) = 0 \quad (\text{A56})$$

Pela simetria azimutal ($m = 0$) e pela definição em (A20), (A56) se torna (A57).

$$(1 - x^2) \frac{\partial^2 y}{\partial x^2} - 2x \frac{\partial y}{\partial x} + n(n + 1)y = 0 \quad (\text{A57})$$

Esta é a equação diferencial de Legendre, e a mesma possui diversas aplicações na física, mas comumente está relacionada a problemas com simetria esférica e suas soluções são chamadas “Soluções de Legendre”, sendo exemplos de funções especiais. Note que os coeficientes da equação de Legendre são todos analíticos na origem, e o coeficiente $(1 - x^2)$ apenas desaparece em $x \pm 1$, dessa forma é esperado que a solução em série de potências exista no intervalo $-1 < x < 1$ [15]. Porém, buscamos uma solução que convirja no intervalo $-1 \leq x \leq 1$, já que buscamos atender a condição (A52).

A.4.1 SOLUÇÃO PELO MÉTODO DE SÉRIES DE FROBENIUS

A solução para a equação (A57) será obtida pelo método de Frobenius. Neste caso, não estamos tratando de uma equação que possamos analisar pelo método de Cauchy-Euler em um ponto singular regular x_0 (em nossa análise tomamos $x_0 = 0$), dessa forma, devemos buscar a equação indicial na própria resolução do problema. Supomos que a série possui solução na forma de série de Frobenius (A58) com suas respectivas derivadas (A59) [15]:

$$y(x) = (x - x_0)^c \sum_{k=0}^{\infty} a_k (x - x_0)^k \text{ com } x_0 = 0 \quad (\text{A58})$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial y}{\partial x} &= \sum_{k=0}^{\infty} a_k(c+k)(x-x_0)^{c+k-1} \therefore \frac{\partial^2 y}{\partial x^2} \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} a_k(c+k)(c+k-1)(x-x_0)^{c+k-2} \text{ com } x_0 = 0\end{aligned}\quad (\text{A59})$$

A solução para a equação de Legendre será dada na forma da combinação linear de suas possíveis soluções, indicadas pela equação indicial:

$$y(x) = y_1(x) + y_2(x) \quad (\text{A60})$$

$$y(x) = (x-x_0)^{c_1} \sum_{k=0}^{\infty} a_k(x-x_0)^k + (x-x_0)^{c_2} \sum_{k=0}^{\infty} b_k(x-x_0)^k \text{ com } x_0 = 0 \quad (\text{A61})$$

Determinaremos a equação indicial encontrando o coeficiente da menor potência da expansão da série de potências, substituindo (A58) na equação de Legendre:

$$\begin{aligned}(1-x^2) \sum_{k=0}^{\infty} a_k(c+k)(c+k-1)x^{c+k-2} - 2x \sum_{k=0}^{\infty} a_k(c+k)x^{c+k-1} \\ + \lambda \sum_{k=0}^{\infty} a_k x^{c+k} = 0\end{aligned}\quad (\text{A62})$$

$$\begin{aligned}(1-x^2) \sum_{k=0}^{\infty} a_k(c+k)(c+k-1)x^{c+k-2} - 2x \sum_{k=0}^{\infty} a_k(c+k)x^{c+k-1} \\ + \lambda \sum_{k=0}^{\infty} a_k x^{c+k} = 0\end{aligned}\quad (\text{A63})$$

$$\begin{aligned}\sum_{k=0}^{\infty} a_k(c+k)(c+k-1)x^{c+k-2} + \sum_{k=0}^{\infty} -a_k(c+k)(c+k-1)x^{c+k} \\ + \sum_{k=0}^{\infty} -2a_k(c+k)x^{c+k} + \lambda \sum_{k=0}^{\infty} a_k x^{c+k} = 0\end{aligned}\quad (\text{A64})$$

$$\begin{aligned}\sum_{k=0}^{\infty} a_k(c+k)(c+k-1)x^{c+k-2} \\ + \sum_{k=0}^{\infty} a_k[-(c+k)(c+k-1) - 2(c+k) + \lambda]x^{c+k} = 0\end{aligned}\quad (\text{A65})$$

Precisamos resumir a expressão (A65) de modo a encontrar um único somatório e obter em evidencia os termos de x , perceba que k é apenas um contador arbitrário, isso nos dá a liberdade de alterá-lo mantendo as características originais do somatório, lembrando que este deve se iniciar em um número qualquer maior que zero. Assim a melhor opção de alteração é a escolha do segundo somatório:

$$k = u - 2 \therefore u = k + 2 \text{ então para } k = 0, u = 2 \quad (\text{A66})$$

$$\begin{aligned}
& \sum_{k=0}^{\infty} a_k(c+k)(c+k-1)x^{c+k-2} \\
& + \sum_{u=2}^{\infty} a_{u-2}[-(c+u-2)(c+u-3) - 2(c+u-2) + \lambda]x^{c+u-2} \\
& = 0
\end{aligned} \tag{A67}$$

Mais uma vez, devemos lembrar que u , assim como k , é apenas um contador arbitrário, sendo assim, podemos realizar a simples alteração $u = k$ em (A67), obter (A68) e manter as características do somatório, expandindo o somatório de maneira a se obter um único somatório:

$$\begin{aligned}
& \sum_{k=0}^{\infty} a_k(c+k)(c+k-1)x^{c+k-2} \\
& + \sum_{k=2}^{\infty} a_{k-2}[-(c+k-2)(c+k-3) - 2(c+k-2) + \lambda]x^{c+k-2} \\
& = 0 \quad (63)
\end{aligned} \tag{A68}$$

$$\begin{aligned}
& a_0[c(c-1)]x^{c-2} + a_1[(c+1)c]x^{c-1} \\
& + \sum_{k=2}^{\infty} \{a_k[(c+k)(c+k-1)] \\
& + a_{k-2}[-(c+k-2)(c+k-3) - 2(c+k-2) + \lambda]\}x^{c+k-2} = 0
\end{aligned} \tag{A69}$$

Pra que a propriedade da identidade seja atendida, os coeficientes das potências devem desaparecer, dessa forma:

$$0 = \begin{cases} a_0[c(c-1)] \\ a_1[(c+1)c] \\ a_k[(c+k)(c+k-1)] + a_{k-2}[-(c+k-2)(c+k-3) - 2(c+k-2) + \lambda] \end{cases} \tag{A70}$$

Para que a solução em série exista, devemos assumir que $a_0 \neq 0$, assim definimos que $c(c-1) = 0$, sendo a equação indicial para a equação diferencial de Legendre. Note que a equação indicial é do tipo quadrática, ou seja, ela possuirá duas soluções em (A71):

$$c(c-1) = 0 \therefore c = \begin{cases} 0 \\ 1 \end{cases} \tag{A71}$$

Como não estamos tratando de uma equação que possui ponto singular regular em x_0 , não podemos tomar as mesmas definições utilizadas para determinar as soluções da EDO de Cauchy-Euler, ou seja, não há muitas conclusões a se tirar da relação entre as raízes, mesmo assim, determinamos os valores de c através da equação indicial. A partir de (A69) podemos definir a relação de recorrência para então determinar as soluções para EDO.

$$a_k = -\frac{a_{k-2}[-(c+k-2)(c+k-3) - 2(c+k-2) + \lambda]}{(c+k)(c+k-1)} \quad k \geq 2 \quad (\text{A72})$$

Novamente realizaremos uma substituição simplória em (A72) para obter uma estrutura para a_{k+2} em termos de a_k :

$$k = u + 2, u = k - 2 \text{ então para } k = 2, u = 0 \quad (\text{A73})$$

$$a_{u+2} = -\frac{a_u[-(c+u)(c+u-1) - 2(c+u) + \lambda]}{(c+u+2)(c+u+1)} \quad u \geq 0 \quad (\text{A74})$$

$$a_{k+2} = -\frac{a_u[-(c+k)(c+k-1) - 2(c+k) + \lambda]}{(c+k+2)(c+k+1)} \quad k \geq 0 \quad (\text{A75})$$

Aplicando a definição de (A20), em que $\lambda = n(n+1)$ é a constante de separação, e para a solução $c = 0$ da equação indicial:

$$\begin{aligned} a_{k+2} &= -\frac{a_k[-k(k-1) - 2k + n(n+1)]}{(k+2)(k+1)} \quad (\text{A76}) \\ &= -\frac{a_k[-k^2 + k - 2k + n^2 + n - nk + nk]}{(k+2)(k+1)} \end{aligned}$$

A solução para a equação de Legendre com $c = c_1$:

$$a_{k+2} = -\frac{a_k[(n-k)(k+n+1)]}{(k+2)(k+1)} \quad k \geq 0 \quad (\text{A77})$$

$$y_1(x) = x^0 \sum_{k=0}^{\infty} a_k x^k \quad (\text{A78})$$

$$\begin{aligned} y_1(x) &= a_0 \left[1 - \frac{n(n+1)}{2!} x^2 + \frac{n(n+1)(n-2)(n+3)}{4!} x^4 \right. \\ &\quad \left. - \frac{n(n+1)(n-2)(n+3)(n-4)(n+5)}{6!} x^6 + \dots \right] \\ &\quad + a_1 \left[x - \frac{(n-1)(n+2)}{3!} x^3 + \frac{(n-1)(n+2)(n-3)(n+4)}{5!} x^5 \right. \\ &\quad \left. - \frac{(n-1)(n+2)(n-3)(n+4)(n-5)(n+6)}{7!} x^7 + \dots \right] \quad (\text{A79}) \end{aligned}$$

Foi definido anteriormente $a_0 \neq 0$, é escolhido $a_0 = 1$ e $a_1 = 0$ por uma questão estrutural, realizando as devidas substituições em (A20), definiremos a solução de Legendre com estrutura p_n [19]:

$$\begin{aligned} p_n(x) &= 1 - \frac{n(n+1)}{2!} x^2 + \frac{n(n+1)(n-2)(n+3)}{4!} x^4 \\ &\quad - \frac{n(n+1)(n-2)(n+3)(n-4)(n+5)}{6!} x^6 + \dots \quad (\text{A80}) \end{aligned}$$

Determinaremos agora a segunda solução, onde $c = 1$. Substituindo $c = c_2$ em (A75):

$$b_{k+2} = -\frac{b_u[-(k+1)k - 2(k+1) + n(n+1) + n(k+1) - n(k+1)]}{(k+3)(k+2)} k \geq 0 \quad (\text{A81})$$

$$b_{k+2} = -\frac{b_u[-k^2 - k - 2k - 2 + n^2 + (n+n) + nk - nk - n]}{(k+3)(k+2)} k \geq 0 \quad (\text{A82})$$

A solução para a equação de Legendre com $c = c_2$:

$$b_{k+2} = -\frac{b_u[(n-k-1)(n+k+2)]}{(k+3)(k+2)} k \geq 0 \quad (\text{A83})$$

$$y_2(x) = x^1 \sum_{k=0}^{\infty} b_k x^k \quad (\text{A84})$$

$$y_2(x) = b_0 \left[x - \frac{(n-1)(n+2)}{3!} x^3 + \frac{(n-1)(n+2)(n-3)(n+4)}{5!} x^4 - \frac{(n-1)(n+2)(n-3)(n+4)(n-5)(n+6)}{7!} + \dots \right] + b_1 \left[1 - \frac{n(n+1)}{2!} x^2 + \frac{n(n+1)(n-2)(n+3)}{4!} x^4 - \frac{n(n+1)(n-2)(n+3)(n-4)(n+5)}{6!} x^6 + \dots \right] \quad (\text{A85})$$

Para que a identidade seja satisfeita, precisamos garantir que a igualdade (A86) seja garantida, dessa forma $b_1 = 0$, e $a_1 = 1$ por uma questão estrutural [19]:

$$0 = \begin{cases} b_0[c(c-1)] \\ b_1[(c+1)c] \\ b_k[(c+k)(c+k-1)] + b_{k-2}[-(c+k-2)(c+k-3) - 2(c+k-2) + \lambda] \end{cases} \quad (\text{A86})$$

Em seguida definiremos a solução de Legendre com estrutura q_n :

$$q_n(x) = x - \frac{(n-1)(n+2)}{3!} x^3 + \frac{(n-1)(n+2)(n-3)(n+4)}{5!} x^4 - \frac{(n-1)(n+2)(n-3)(n+4)(n-5)(n+6)}{7!} + \dots \quad (\text{A87})$$

Realizando as devidas substituições de (A80) e (A87) em (A60), e definido A_n e B_n como constantes arbitrárias, definimos (A88) como a solução para a equação de Legendre.

$$y_n(x) = A_n p_n(x) + B_n q_n(x) \quad (\text{A88})$$

A.4.2. POLINÔMIOS DE LEGENDRE DO PRIMEIRO TIPO

Através do teste de Gauss, encontramos divergência para a série em $x = \pm 1$, o que não é desejável, já que buscamos introduzir estes pontos no conjunto solução para a equação. Para

evitar tal situação, escolheremos a constante de separação n (antes definida como λ , porém perceba que se λ é constante, n também será) e converteremos a série infinita em diversos polinômios de ordem n , para n , um número par e inteiro, a série será finita e se reduzirá ao polinômio (A89). Utilizando o devido fator de normalização [19]:

$$P_n(x) = (-1)^{\frac{n}{2}} \frac{n!}{2^n \left[\left(\frac{n}{2}\right)!\right]^2} p_n(x) = (-1)^s \frac{(2s)!}{2^{2s} [s!]^2} p_{2s}(x) \quad \text{Para } n = 2s \quad (\text{A89})$$

Se n , for um número ímpar e inteiro, a série será finita e se reduzirá á ao polinômio (A90):

$$P_n(x) = (-1)^{\frac{n-1}{2}} \frac{n!}{2^{n-1} \left\{\left[\frac{n-1}{2}\right]!\right\}^2} q_n(x) = (-1)^s \frac{(2s+1)!}{2^{2s} (s!)^2} \quad \text{para } n = 2s + 1 \quad (\text{A90})$$

A partir das equações dadas em (A89) e (A90), podemos escrever a solução de primeiro tipo para a equação diferencial de Legendre na forma de um Polinômio de Legendre de grau n do primeiro tipo (A91) [19]:

$$P_n(x) = \sum_{s=0}^{[N]} (-1)^s \frac{(2n-2s)!}{2^n s! (n-s)! (n-2s)!} x^{n-2s}; [N] = \begin{cases} \frac{n}{2} & \text{para } n \text{ um inteiro par} \\ \frac{n-1}{2} & \text{para } n \text{ um inteiro ímpar} \end{cases} \quad (\text{A91})$$

A.4.3 POLINÔMIOS DE LEGENDRE DO SEGUNDO TIPO

Utilizamos apenas p_n para n par, e q_n para n ímpar (já que eles são determinados pela escolha de n). Nós podemos agora definir um segundo tipo de solução para a equação de Legendre:

Utilizando o devido fator de normalização, em (A80) e (A87) obtemos (A92) e (A93) [19]:

Seja n um inteiro par:

$$Q_n(x) = (-1)^{\frac{n}{2}} \frac{\left\{\left[\frac{n}{2}\right]!\right\}^2 2^n}{n!} q_n(x) = (-1)^s \frac{(2s)!!}{(2s-1)!!} q_{2s}(x); \quad \text{para } n = 2s \quad (\text{A92})$$

Seja n um inteiro ímpar:

$$Q_n(x) = (-1)^{\frac{n+1}{2}} \frac{\left\{\left[\frac{n-1}{2}\right]!\right\}^2 2^{n-1}}{n!} p_n(x) = (-1)^{s+1} \frac{(2s)!!}{(2s+1)!!} p_{2s}(x); \quad \text{para } n = 2s + 1 \quad (\text{A93})$$

Os testes de Cauchy mostram que a série converge apenas em $-1 < x < 1$. Se $|x| \geq 1$, esta forma em série de nossa segunda solução diverge. Uma solução em série de potências negativas para x pode ser desenvolvida para região $|x| > 1$, mas procederemos para uma solução em forma fechada que pode ser utilizada ao longo de todo o plano complexo, [19].

Frequentemente, uma segunda solução é desejável. A partir de métodos definidos em [19] para a obtenção de uma segunda solução de segundo tipo, que é definida na estrutura (A94).

$$Q_n(z) = P_n(z) \left\{ A_n + B_n \int_0^z \frac{dx}{(1-x^2)[P_n(x)]^2} \right\} \quad (\text{A94})$$

Desejamos obter o polinômio de ordem zero (A96), dessa forma por separação em frações parciais:

$$\begin{aligned} Q_0(z) &= P_0(z) \left\{ A_0 + B_0 \int_0^z \frac{dx}{(1-x^2)1^2} \right\} = P_0(z) \left\{ A_0 + B_0 \int_0^z \frac{1}{x+1} - \frac{1}{x-1} dx \right\} \\ &= P_0(z) \left\{ A_0 + B_0 \frac{1}{2} \left[\ln \left| \frac{x+1}{x-1} \right| \right]_0^z \right\} \end{aligned} \quad (\text{A95})$$

$$= P_0(z) \left\{ A_0 + B_0 \frac{1}{2} \left[\ln \left| \frac{z+1}{z-1} \right| - \ln|-1| \right] \right\}$$

$$Q_0(z) = P_0(z) \left\{ A_0 + B_0 \left[\frac{1}{2} \ln \left| \frac{1+z}{1-z} \right| \right] \right\} \quad (\text{A96})$$

Expandindo em termos da série de potência pela série de Maclaurin dada por (A97), a solução de ordem zero se resume à (A98).

$$f(x) = f(0)x^0 + f'(0)\frac{x^2}{2!} + f''(0)\frac{x^3}{3!} + \dots + f^{(n)}(0)\frac{x^n}{n!} \quad (\text{A97})$$

$$Q_0(z) = A_0 + B_0 \left(z + \frac{z^3}{3} + \frac{z^5}{5} + \dots + \frac{z^{2s+1}}{2s+1} \right) \quad (\text{A98})$$

Ao executar $A_0 = 0$ e $B_0=1$, por uma comparação da serie resultante pela expansão do logaritmo (A98) com serie q_n , encontramos resultados similares.

Agora buscamos Q_1 e para isso faremos $n = 1$:

$$Q_1(z) = z \left[A_1 + B_1 \int_0^z \frac{dx}{(1-x^2)x^2} \right] = A_1 z + B_1 z \left(\frac{1}{2} \ln \left| \frac{1+z}{1-z} \right| - \frac{1}{z} \right) \quad (\text{A99})$$

Se expandirmos (A85) como uma série de Maclaurin e compararmos com $-p_1(z)(Q_1z(z) = -p_1(z))$, teremos que $A_1 = 0$, e $B_1 = 1$. Dessa forma podemos escrever que:

$$Q_0(z) = \frac{1}{2} \ln \left| \frac{1+z}{1-z} \right| \quad \therefore \quad Q_1(z) = \frac{1}{2} z \ln \left| \frac{1+z}{1-z} \right| - 1 \quad \text{Para } |z| < 1 \quad (\text{A100})$$

Possivelmente o melhor caminho para determinar Q_n de ordem elevada é usar a relação de recorrência [19]:

$$Q_n(z) = \frac{1}{2} P_n(z) \ln \left| \frac{1+z}{1-z} \right| - \frac{2n-1}{n} P_{n-1}(z) - \frac{2n-5}{3(n-1)} P_{n-3}(z) - \dots \quad (\text{A101})$$

Para a forma $\ln \left| \frac{1+z}{1-z} \right|$ será visto que para um numero real z a expressão (A101) está vinculada ao intervalo $-1 < x < 1$. Se desejarmos obter uma forma fechada fora desse intervalo, nós precisamos apenas trocar $\ln \left| \frac{1+x}{1-x} \right|$ por $\ln \left| \frac{z+1}{z-1} \right|$.

A função de Legendre de segundo tipo é dada por (A102) [18]:

$$Q_n(x) = P_n(x) \left[\frac{1}{2} \ln \left| \frac{1+x}{1-x} \right| - p(n) \right] + \sum_{k=1}^n (-1)^k \frac{(n+k)!}{(k!)^2 (n-k)!} p(k) \left[\frac{1-x}{2} \right]^k$$

$$p(n) = \begin{cases} 1 & \text{para } n = 0 \\ \sum_{l=1}^n \frac{1}{l} & \end{cases} \quad (\text{A102})$$

Das equações (A91) e (A102), a solução para a equação diferencial de Legendre é dada por:

$$y_n = P_n(x) + Q_n(x) \quad (\text{A103})$$

De acordo com as substituições feitas em (A52), (A103) se torna:

$$\Theta(\theta) = P_n(\cos \theta) + Q_n(\cos \theta) \quad (\text{A104})$$

Porém, Q_n não é tão utilizado quanto P_n , por apresentar singularidade em $x = \pm 1$ (ou $\theta = 0, \pi$), por causa dos termos logaritmos, usamos Q_n apenas quando não desejamos definir $x = \pm 1$ (ou $\theta = 0, \pi$) no domínio da função. Para o nosso problema a expressão (A104) se resume à:

$$\Theta(\theta) = P_n(\cos \theta) \quad (\text{A105})$$

A.5 SOLUÇÃO PARA A EQUAÇÃO DE LAPLACE:

Como definimos no método de separação de variáveis, a solução para a equação de Laplace é dada na forma do produto de três funções independentes. A partir das equações (A15), (A51) e (A105), encontramos uma solução na forma da equação (A107):

$$V(r, \theta, \phi) = [A_n r^n + B_n r^{-(n+1)}] P_n(\cos \theta) K \quad (\text{A106})$$

$$V(r, \theta) = [a_n r^n + b_n r^{-(n+1)}] P_n(\cos \theta) \quad (\text{A107})$$

Uma consideração mais forte para essa solução é a de supor que uma combinação de polinômios de Legendre podem se adequar melhor as condições de contorno que o problema esférico pode apresentar, enfim, a solução para a equação de Laplace em coordenadas esféricas com simetria azimutal é dada por [20]:

$$V(r, \theta) = \sum_{n=0}^{\infty} [a_n r^n + b_n r^{-(n+1)}] P_n(\cos \theta) \quad (\text{A108})$$

APÊNDICE B – OPERAÇÕES EM COORDENADAS ESFÉRICAS

B.1. TRANSFORMAÇÃO DE COORDENADAS CARTESIANAS EM ESFÉRICAS

Quando trabalhamos com problemas que possuem simetria esférica, devemos utilizar um sistema de coordenadas adequado, assim, utilizaremos o sistema de coordenadas esférico. Um ponto M no espaço pode ser representado por coordenadas (r, θ, ϕ) , como na Fig. B1.

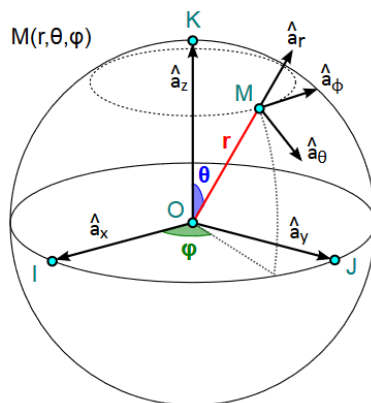


Figura B1 – Sistema de coordenadas esférico. Fonte: Banco de imagens do google

Perceba que as variações ocorrem nos intervalos $0 \leq r < \infty$, $0 \leq \theta \leq \pi$ e $0 \leq \phi \leq 2\pi$, logo, conforme descrito por SADIKU (2012), podemos definir um vetor \vec{A} com amplitude $|\vec{A}|$, em coordenadas esféricas:

$$\vec{A} = A_r \hat{a}_r + A_\theta \hat{a}_\theta + A_\phi \hat{a}_\phi \quad (B1)$$

onde \hat{a}_r , \hat{a}_θ e \hat{a}_ϕ são vetores unitários ao longo de r , θ e ϕ e mutuamente ortogonais.

As variáveis espaciais (x, y, z) , do sistema de coordenadas cartesiano, podem ser relacionadas às variáveis (r, θ, ϕ) , do sistema de coordenadas esférico, de acordo com as equações (B2) e (B3) [12]:

$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}, \quad \theta = \text{atan} \frac{\sqrt{x^2 + y^2}}{z}, \quad \phi = \text{atan} \frac{y}{x} \quad (B2)$$

$$x = r \sin \theta \cos \phi, \quad y = r \sin \theta \sin \phi, \quad z = r \cos \theta \quad (B3)$$

As transformações dos vetores entre os sistemas de coordenadas abordados são encontradas pela relação dos vetores unitários conforme a Fig. B1, tais relações são dadas na forma matricial [12]:

$$\begin{bmatrix} A_r \\ A_\theta \\ A_\phi \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sin \theta \cos \phi & \sin \theta \sin \phi & \cos \theta \\ -\cos \theta \cos \phi & \cos \theta \sin \phi & -\sin \theta \\ -\sin \phi & \cos \phi & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_x \\ A_y \\ A_z \end{bmatrix} \quad (B4)$$

$$\begin{bmatrix} A_x \\ A_y \\ A_z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sin \theta \cos \phi & \cos \theta \cos \phi & -\sin \phi \\ \sin \theta \sin \phi & \cos \theta \sin \phi & \cos \theta \\ \cos \theta & -\sin \phi & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_r \\ A_\theta \\ A_\phi \end{bmatrix} \quad (B5)$$

A.2. OPERAÇÕES DIFERENCIAIS EM COORDENADAS ESFÉRICAS

Definiremos agora os elementos diferenciais de comprimento (B6), área (B7) e volume (B8) utilizados no calculo diferencial para coordenadas esféricas [12]:

$$d\vec{l} = dr \hat{a}_r + r d\theta \hat{a}_\theta + r \sin \theta d\phi \hat{a}_\phi \quad (\text{B6})$$

$$d\vec{S} = \begin{cases} r^2 \sin \theta d\theta d\phi \hat{a}_r \\ r \sin \theta dr d\phi \hat{a}_\theta \\ r dr d\theta \hat{a}_\phi \end{cases} \quad (\text{B7})$$

$$dv = r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi \quad (\text{B8})$$

Segundo SADIKU (2012), o gradiente de um escalar V é um vetor que representa a magnitude e a orientação da máxima taxa espacial de variação V , e sua operação em coordenadas esféricas é dada por:

$$\nabla V = \frac{\partial V}{dr} \hat{a}_r + \frac{1}{r} \frac{\partial V}{d\theta} \hat{a}_\theta + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial V}{d\phi} \quad (\text{B9})$$

A divergência de \vec{A} em um dado ponto P é o fluxo que sai, por unidade de volume, à medida que o volume se reduz à zero em torno de P . A operação de divergência é realizada através do produto escalar entre o vetor e o operador del (∇) [12]:

$$\nabla \cdot \vec{A} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial(A_r r^2)}{dr} + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial(A_\theta \sin \theta)}{d\theta} + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial A_\phi}{d\phi} \quad (\text{B10})$$

O rotacional de \vec{A} é um vetor axial (ou girante), cuja magnitude é a máxima circulação de \vec{A} por unidade de área, à medida que esta tende a zero, e cuja a orientação é perpendicular à essa área, quando a mesma está orientada de modo a se obter máxima circulação. A operação de rotacional é realizada através do produto vetorial entre o vetor e o operado del (∇) [12]:

$$\begin{aligned} \nabla \times \vec{A} = & \frac{1}{r \sin \theta} \left[\frac{\partial(A_\phi \sin \theta)}{d\theta} - \frac{\partial A_\theta}{d\phi} \right] \hat{a}_r + \frac{1}{r} \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial A_r}{d\phi} - \frac{\partial(r A_\phi)}{dr} \right] \hat{a}_\theta \\ & + \frac{1}{r} \left[\frac{\partial(r A_\theta)}{\partial r} - \frac{\partial A_r}{d\theta} \right] \hat{a}_\phi \end{aligned} \quad (\text{B11})$$

O laplaciano de um escalar V , escrito como $\nabla^2 V$, é o divergente do gradiente de V [12] Portanto em coordenadas esféricas temos:

$$\nabla (\nabla V) = \nabla^2 V \quad (\text{B12})$$

$$\nabla^2 V = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{dr} \left(r^2 \frac{\partial V}{dr} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{\partial V}{d\theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 V}{\partial \phi^2} \quad (\text{B13})$$

A.3. OPERAÇÕES INTEGRAIS EM COORDENADAS ESFÉRICAS

Aplicaremos agora os conceitos de integração já conhecido em operações que contem termos vetoriais, das equações (B6), (B7) e (B8), definiremos (B14) como a integral da componente tangencial de \vec{A} ao longo da curva L [12]:

$$\int_L \vec{A} \cdot d\vec{l} = \int_a^b |\vec{A}| \cos \theta dl = \int_L \vec{A} \cdot [dr \hat{a}_r + r d\theta \hat{a}_\theta + r \sin \theta d\phi \hat{a}_\phi] \quad (\text{B14})$$

Considerando ainda o mesmo campo vetorial \vec{A} , continuo em uma região contendo uma curva suave S , e de acordo com [12], define-se integral de superfície, ou fluxo de \vec{A} através de S , como:

$$\int_S \vec{A} \cdot d\vec{S} = \iint_S \vec{A} \cdot \hat{a}_n dS = \begin{cases} \iint_S \vec{A} \cdot \hat{a}_r r^2 \sin \theta d\theta d\phi \\ \iint_S \vec{A} \cdot \hat{a}_\theta r \sin \theta dr d\phi \\ \iint_S \vec{A} \cdot \hat{a}_\phi dS r dr d\theta \end{cases} \quad (\text{B15})$$

Definimos (B16) como a integral de volume do escalar p_v sobre o volume v [12]:

$$\int_v p_v dv = \iiint_v p_v dv = \iiint_v p_v r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi \quad (\text{B16})$$

APÊNDICE C – PROGRAMAS IMPLEMENTADOS NO MATLAB

C.1. CALCULO DA POLARIZABILIDADE

```
%TCC: Espalhamento de Rayleigh
%Resultado 1 = Polarizabilidade
clear,clc,close all
RefComp = 60;%Refinamento Faixa d Comprimento de Onda e Frequência
l= linspace(450e-9,750e-9,RefComp);% Vetor comprimento de Onda
c= 3e8;% Velocidade da Luz
w=((2*pi*c)./l);% Vetor frequência angular
fq = (w/(2*pi))./1e12;% Vetor frequência em TeraHertz
% -----Dimensões-----
r1 = 50e-9;% raio da esfera interna
Delta = [0 5 10].*1e-9;% Espesura da camada do core-shell
for k=1:3
r2 = r1+Delta(:,k);% Raio Externo Efetivo
%-----
w=((2*pi*c)./l);% Vetor frequência angular
sW = size(w,2);% Dimensão do vetor frêquencia
%-----Permissividade R. Meio:em-----
nmed = 1.334;
em =nmed^2;
%-----Permissividade R. Ouro:e1-----
Wp=1.3579e+016;%13.8e15;
Wp1=4.4910e+015;%45e14;
lambda=450e-9;
W0=2*pi*c/lambda;
einf = 7;
R = r1;
gama=8.9516e+014;%9e14; gamaB
Gama=9.9909e+013;%1.075e14; GAMA0
%-----Reajuste-----
B = 0.85+0.35j;%1.56+0.6j+0.39*R-0.04*R.^2;
vf = 1.4e6;% Fermi Velocity % Não tenho Certeza vf = 2pi*c?
Gama = Gama+B*(vf./R);
eD = einf-(Wp.^2./(w.^2+j*Gama*w)); %Termos de Drude
eIB = (Wp1.^2./((W0.^2-w.^2)-j*gama*w)); % Termos de Interbanda
egold = eD+eIB;
%-----Permissividade R. Silica:e2-----
B1 = 0.6961663;
B2 = 0.4079426;
B3 = 0.8974794;
C1 = (0.0684043^2)*1e-12;
C2 = (0.1162414^2)*1e-12;
C3 = (9.896161^2)*1e-12;
esilica = (1+((B1*l.^2)./(1.^2-C1)))+((B2*l.^2)./(1.^2-
C2))+((B3*l.^2)./(1.^2-C3));

%Polarizabilidades
e1 = egold;
e2 = esilica;
f = ((r1.^3)./(r2.^3));
if k==1
```

```

        alphain(k,:)= 4*pi*em*r1.^3*((e1-em)./(2*em+e1));
        alphaout(k,:)=alphain(k,:);
else
alphain(k,:) = 4*pi*e2.*(r1.^3).*((3*em.*(e1-e2))./(f.*(e1-
e2).*(2*e2-2*em)+(2*e2+e1).*(e2+2*em)));
alphaout(k,:) = 4*pi*em.*(r2.^3).*((f.*(e1-
e2).*(2*e2+em)+(2*e2+e1).*(e2-em))./(f.*(e1-e2).*(2*e2-
2*em)+(2*e2+e1).*(e2+2*em)));
end
end
hold on
D= plot(1./1e-9,abs(alphain(1,:)), 'c',1./1e-
9,abs(alphaout(1,:)), 'c.', 'LineWidth',1.5)
D= plot(1./1e-9,abs(alphain(2,:)), 'b',1./1e-
9,abs(alphaout(2,:)), 'b.', 'LineWidth',1.5)
D= plot(1./1e-9,abs(alphain(3,:)), 'k',1./1e-
9,abs(alphaout(3,:)), 'k.', 'LineWidth',1.5)
xlim([min(1./1e-9),max(1./1e-9)])
ylim([min(abs(alphaout(1,:))),max(abs(alphaout(3,:)))*1.05])
ylabel('Modulo: Polarizabilidade |alpha|(m^2 C)/V')
xlabel('Comprimento de Onda (nm)')
legend('Pol.In D.=0nm', 'Pol.Out D.=0nm', 'Pol.In D.=5nm', 'Pol.Out
D.=5nm', 'Pol.In D.=10nm', 'Pol.Out D.=10nm',1)
set(gcf, 'units', 'centimeters', 'pos', [6 5 12 8])
box on
hold off
figure
hold on
D= plot(1./1e-9,angle(alphain(1,:)), 'c',1./1e-
9,angle(alphaout(1,:)), 'c.', 'LineWidth',1.5)
D= plot(1./1e-9,angle(alphain(2,:)), 'b',1./1e-
9,angle(alphaout(2,:)), 'b.', 'LineWidth',1.5)
D= plot(1./1e-9,angle(alphain(3,:)), 'k',1./1e-
9,angle(alphaout(3,:)), 'k.', 'LineWidth',1.5)
xlim([min(1./1e-9),max(1./1e-9)])
ylim([min(angle(alphaout(1,:))),max(angle(alphain(3,:)))]])
ylabel('Argumento: Polarizabilidade angle(alpha)')
xlabel('Comprimento de Onda (nm)')
legend('Pol.In D.=0nm', 'Pol.Out D.=0nm', 'Pol.In D.=5nm', 'Pol.Out
D.=5nm', 'Pol.In D.=10nm', 'Pol.Out D.=10nm',1)
set(gcf, 'units', 'centimeters', 'pos', [20 5 12 8])
box on

```

C.2. SEÇÕES TRANSVERSAIS – EFICIÊNCIA DE ESPALHAMENTO, ABSORÇÃO E EXTINÇÃO

```

%IEEE - Latino Americana:
%Cross-Eficiência
clear,clc,close all
RefComp = 1000;%Refinamento Faixa d Comprimento de Onda e Frequência
c= 3e8;% Velocidade da Luz
% -----Dimensões-----
r1 = 50e-9;% 5 15 35 50 raio da esfera interna
Delta = [0 5 10].*1e-9;% Espesura da camada do core-shell

```

```

l= linspace(450e-9,750e-9,RefComp);% Vetor comprimento de Onda
w=((2*pi*c)./l);% Vetor frequência angular
color = ['c','r','k'];
for i=1:max(size(Delta))
r2 = r1+Delta(:,i);% Raio Externo Efetivo
%-----
w=((2*pi*c)./l);% Vetor frequência angular
sW = size(w,2);% Dimensão do vetor frequência
%-----Permissividade R. Ouro:e1-----
Wp=1.3579e+016;%13.8e15;
Wp1=4.4910e+015;%45e14;
lambda=450e-9;
W0=2*pi*c/lambda;
einf = 7;
R = r1;
gama=8.9516e+014;%9e14; gamaB
Gama=9.9909e+013;%1.075e14; GAMA0
%-----Reajuste-----
B = 0.85+0.35j;%1.56+0.6j+0.39*R-0.04*R.^2;
vf = 1.4e6;% Fermi Velocity % Não tenho Certeza vf = 2pi*c?
Gama = Gama+B*(vf./R);
eD = einf-(Wp.^2./((w.^2+j*Gama*w))); %Termos de Drude
eIB = (Wp1.^2./((W0.^2-w.^2)-j*gama*w)); % Termos de Interbanda
egold = eD+eIB;
% -----Permissividade do Espaço livre
nmed = 1.334;
em =nmed^2;
%-----Permissividade R. Grafeno:e2-----
B1 = 0.6961663;
B2 = 0.4079426;
B3 = 0.8974794;
C1 = (0.0684043^2)*1e-12;
C2 = (0.1162414^2)*1e-12;
C3 = (9.896161^2)*1e-12;
esilica = (1+((B1*1.^2)./(1.^2-C1))+((B2*1.^2)./(1.^2-
C2))+((B3*1.^2)./(1.^2-C3)));
%Polarizabilidades
e1 = egold;
e2 = esilica;
f = ((r1.^3)./(r2.^3));
alphaout(i,:) = 4*pi*em.*(r2.^3).*((f.*(e1-
e2).*(2*e2+em)+(2*e2+e1).*(e2-em))./(f.*(e1-e2).*(2*e2-
2*em)+(2*e2+e1).*(e2+2*em)));
alphaout(i,:) = alphaout(i,)./em;%-----Energias:
Espalhamento, Absorção e Extinção
k = sqrt(em)*(2*pi)./l;
CscaOut(i,:) = ((k.^4)./(6*pi)).*abs(alphaout(i,)).^2;%
Espalhamento Externo
CabsOut(i,:) = k.*imag(alphaout(i,));% Absorção Externa
CextOut(i,:) = CscaOut(i,)+CabsOut(i,);% Extinção Externa
GA = pi*r2^2;
Qsca(i,:) = CscaOut(i,)/GA;
Qabs(i,:) = CabsOut(i,)/GA;
Qext(i,:) = CextOut(i,)/GA
hold on

```

```

A(i,1) = plot(1./1e-9,Qsca(i,:),color(:,i)), xlim([min(1./1e-
9),max(1./1e-9)],ylim([0,max(max([Qext]))]);
plot(1./1e-9,Qabs(i,:),color(:,i))
plot(1./1e-9,Qext(i,:),color(:,i))
ylabel('Eficiência Transversal Q')
xlabel('Comprimento de Onda lambda(nm)')
end
%Resultados: I - Polarizabilidades Interna e Externa - Gráfico 2D
RefComp = 10;%Refinamento Faixa d Comprimento de Onda e Frequência
% -----Dimensões-----
l2= linspace(450e-9,750e-9,RefComp);% Vetor comprimento de Onda
w=((2*pi*c)./l2);% Vetor frequência angular
for i=1:max(size(Delta))
r2 = r1+Delta(:,i);% Raio Externo Efetivo
%-----
w=((2*pi*c)./l2);% Vetor frequência angular
sW = size(w,2);% Dimensão do vetor frêquencia
%-----Permissividade R. Ouro:e1-----
Wp=1.3579e+016;%13.8e15;
Wp1=4.4910e+015;%45e14;
lambda=450e-9;
W0=2*pi*c/lambda;
einf = 7;
R = r1;
gama=8.9516e+014;%9e14; gamaB
Gama=9.9909e+013;%1.075e14; GAMA0
%-----Reajuste-----
B = 0.85+0.35j;%1.56+0.6j+0.39*R-0.04*R.^2;
vf = 1.4e6;% Fermi Velocity % Não tenho Certeza vf = 2pi*c?
Gama = Gama+B*(vf./R);
eD = einf-(Wp.^2./(w.^2+j*Gama*w)); %Termos de Drude
eIB = (Wp1.^2./((W0.^2-w.^2)-j*gama*w)); % Termos de Interbanda
egold = eD+eIB;
% -----Permissividade do Espaço livre
nmed = 1.334;
em =nmed^2;
%-----Permissividade R. Grafeno:e2-----
B1 = 0.6961663;
B2 = 0.4079426;
B3 = 0.8974794;
C1 = (0.0684043^2)*1e-12;
C2 = (0.1162414^2)*1e-12;
C3 = (9.896161^2)*1e-12;
esilica = (1+((B1*l2.^2)./(l2.^2-C1))+((B2*l2.^2)./(l2.^2-
C2))+((B3*l2.^2)./(l2.^2-C3)));
%Polarizabilidades
e1 = egold;
e2 = esilica;
f = ((r1.^3)./(r2.^3));
alphaout2(i,:) = 4*pi*em.*(r2.^3).*((f.*(e1-
e2).*(2*e2+em)+(2*e2+e1).*(e2-em))./(f.*(e1-e2).*(2*e2-
2*em)+(2*e2+e1).*(e2+2*em)));
alphaout2(i,:) = alphaout2(i,)./em;%-----Energias:
Espalhamento, Absorção e Extinção
k = sqrt(em)*(2*pi)./l2;

```

```

CscaOut2(i,:) = ((k.^4)./(6*pi)).*abs(alphaout2(i,:)).^2;%
Espalhamento Externo
CabsOut2(i,:) = k.*imag(alphaout2(i,:));% Absorção Externa
CextOut2(i,:) = CscaOut2(i,:)+CabsOut2(i,:);% Extinção Externa
GA = pi*r2^2;
Qsca2(i,:) = CscaOut2(i,:)/GA;
Qabs2(i,:) = CabsOut2(i,:)/GA;
Qext2(i,:) = CextOut2(i,:)/GA;
A2 = plot(12./1e-9,Qsca2,'ko')
B2 = plot(12./1e-9,Qabs2,'rv')
C2 = plot(12./1e-9,Qext2,'bs')
end
legend([A(1,1),A(2,1),A(3,1),A2(1,1),B2(2,1),C2(3,1)], 'Delta=0nm', 'D
elta=5nm', 'Delta=10nm', 'Qsca', 'Qabs', 'Qext')
set(gcf, 'units', 'centimeters', 'pos', [15 5 12 8])
box on

```

C.3. CALCULO DO CAMPO ELETROMAGNÉTICO

C.3.1. Módulo do Campo E Uniforme

```

%Aritog Eneel
%Resultado 1 = Polarizabilidade
clear,clc,close all
RefComp = 60;%Refinamento Faixa d Comprimento de Onda e
Frequência
RefMalha= 100;
c= 3e8;% Velocidade da Luz
l = 632.8e-9;
w=((2*pi*c)./l);% Vetor frequência angular
fq = (w/(2*pi))./1e12;% Vetor frequência em TeraHertz
% -----Dimensões-----
r1 = 10e-9;% raio da esfera interna
Delta = 0.375e-9;% Espesura da camada do core-shell
r2 = r1+Delta;% Raio Externo Efetivo
%-----
w=((2*pi*c)./l);% Vetor frequência angular
sW = size(w,2);% Dimensão do vetor frêquencia
%-----Permissividade R. Meio:em-----
em = 1;
%-----Permissividade R. Ouro:e1-----
Wp=1.3579e+016;%13.8e15;
Wp1=4.4910e+015;%45e14;
lambda=450e-9;
W0=2*pi*c/lambda;
einf = 7;
R = r1;
gama=8.9516e+014;%9e14; gamaB
Gama=9.9909e+013;%1.075e14; GAMA0
%-----Reajuste-----
B = 0.85+0.35j;%1.56+0.6j+0.39*R-0.04*R.^2;
vf = 1.4e6;% Fermi Velocity % Não tenho Certeza vf = 2pi*c?
Gama = Gama+B*(vf./R);

```

```

eD = einf-(Wp.^2./(w.^2+j*Gama*w)); %Termos de Drude
eIB = (Wp1.^2./((W0.^2-w.^2)-j*gama*w)); % Termos de
Interbanda
egold = eD+eIB;

%-----Permissividade R. Grafeno:e2-----
hc = 1.05457168e-34; %Constante de Plank Reduzida
e = 1.6021e-19; % Carga do Elétron
Kb = 1.3806e-23; %Constante de Boltzmann
T = 300; % Temperatura
tal = 1e-12; %tempo de relaxação
M=[0.1 0.2 0.3 0.4]; % Matriz Potencial quimico eV
mic = 1.60217646e-19*M(1,4); % Potencial quimico
bet = 1/(Kb*T);
GAMA = (0.11e-3)*1.60217646e-19;
sigIntra = -j.*((e^2)./(bet*pi*(hc^2).*(w-
j*2*GAMA))).*(bet*mic+2*log(exp(-bet*mic)+1))
sigInter = -j*((e^2)/(4*pi*hc))*log((2*mic-(w-
j*2*GAMA))./(2*mic+(w-j*2*GAMA)));
sig = sigIntra+sigInter;
SIGMA = sig./Delta;
egraf = em-j*(SIGMA./w)
%-----Permissividade R. Silica:e2-----
B1 = 0.6961663;
B2 = 0.4079426;
B3 = 0.8974794;
C1 = (0.0684043^2)*1e-12;
C2 = (0.1162414^2)*1e-12;
C3 = (9.896161^2)*1e-12;
esilica = (1+((B1*1.^2)./(1.^2-C1))+((B2*1.^2)./(1.^2-
C2))+((B3*1.^2)./(1.^2-C3)));
%Polarizabilidades
e1 = egold;
e2 = esilica;
f = ((r1.^3)./(r2.^3));
alphain = 4*pi*e2.*(r1.^3).*((3*em.*(e1-e2))./(f.*(e1-
e2).*(2*e2-2*em)+(2*e2+e1).*(e2+2*em)));
alphaout = 4*pi*em.*(r2.^3).*((f.*(e1-
e2).*(2*e2+em)+(2*e2+e1).*(e2-em))./(f.*(e1-e2).*(2*e2-
2*em)+(2*e2+e1).*(e2+2*em)));
%-----Campo Elétrico-----
-
Eo = 1; %Amplitude da onda plana
eo = (1e-9)/(36*pi);% Permissividade do espaço livre
e1 = e1*eo;
e2 = e2*eo;
em = em*eo;
pIn = eo*Eo*alphain;
pOut = eo*Eo*alphaout;
%-----Malha-----
vM = linspace(-15e-9,15e-9,RefMalha); % Dimensão da malha

```

```

sZ = size(vM,2); % Dimensão do Contador da Malha
[x,z] = meshgrid(vM);
y = 0;
for n = 1:sZ
    for k =1:sZ
[phi(n,k),rho(n,k)] = cart2pol(x(n,k),y);
[theta(n,k),r(n,k)] = cart2pol(z(n,k),rho(n,k));

        if r(n,k)<=r1 %Região Interna: Dentro da Esfera
Interna
            V(n,k) = 3*em*Eo*(r1^-3)*((3*e2)./(2*(r2^-3)*(e2-
e1)*(e2-em)-(r1^-
3)*(2*e2+e1)*(e2+2*em))).*r(n,k).*cos(theta(n,k));
            Ex(n,k) = 0;
            Ey(n,k) = 0;
            Ez(n,k) = -3*em*Eo*(r1^-3)*((3*e2)./(2*(r2^-3)*(e2-
e1)*(e2-em)-(r1^-3)*(2*e2+e1)*(e2+2*em)));
        else
            if r(n,k)>r1 && r(n,k)<r2 % Região Intermediaria:
Dentro da Esfera Externa, fora da esfera interna
                V(n,k) = 3*em*Eo*(r1^-3)*((2*e2+e1)./(2*(r2^-3)*(e2-
e1)*(e2-em)-(r1^-
3)*(2*e2+e1)*(e2+2*em))).*r(n,k).*cos(theta(n,k)) +
((pIn)./(4*pi*e2)).*(r(n,k).^2).*cos(theta(n,k));
                Ex(n,k) = ((pIn)./(4*pi*e2)).*(r(n,k).^
3).*3.*cos(theta(n,k)).*sin(theta(n,k)).*cos(phi(n,k));
                Ey(n,k) = ((pIn)./(4*pi*e2)).*(r(n,k).^
3).*3.*cos(theta(n,k)).*sin(theta(n,k)).*sin(phi(n,k));
                Ez(n,k) = -3*em*Eo*(r1^-3)*((2*e2+e1)./(2*(r2^-3)*(e2-
e1)*(e2-em)-(r1^-3)*(2*e2+e1)*(e2+2*em))) +
((pIn)./(4*pi*e2)).*(r(n,k).^3).*3.*(cos(theta(n,k))).^2)-
1);
            else % Região Externa: Fora das Esferas
                V(n,k) = -Eo.*r(n,k).*cos(theta(n,k)) +
((pOut)./(4*pi*em)).*(r(n,k).^2).*cos(theta(n,k));
                Ex(n,k) = ((pOut)./(4*pi*em)).*(r(n,k).^
3).*3.*cos(theta(n,k)).*sin(theta(n,k)).*cos(phi(n,k));
                Ey(n,k) = ((pOut)./(4*pi*em)).*(r(n,k).^
3).*3.*cos(theta(n,k)).*sin(theta(n,k)).*sin(phi(n,k));
                Ez(n,k) = Eo + ((pOut)./(4*pi*em)).*(r(n,k).^
3).*3.*(cos(theta(n,k))).^2)-1);
            end
        end
    end
end
CampoE = sqrt((Ex).^2+(Ey).^2+(Ez).^2);
[ArgE, AbsE]= cart2pol(real(CampoE),imag(CampoE));
clc,close all

```

```

imagesc([min(vM),max(vM)]./1e-9,[min(vM),max(vM)]./1e-
9,abs(V)'),colormap(hot)
xlabel('Eixo z - (nm)')
ylabel('Eixo x - (nm)')
formatfig(7.5,8)
figure
imagesc([min(vM),max(vM)]./1e-9,[min(vM),max(vM)]./1e-
9,ArgE'),colormap(hot)
xlabel('Eixo z - (nm)')
ylabel('Eixo x - (nm)')
formatfig(7.5,8)

```

C.3.2. Módulo do Campo E Carga Pontual

```

%Esfera de Ouro em Campo de uma Carga Pontual
clear,clc,close all
Ref =250;
  M=3; % 1 2 3
Eo=1;
%P. Geométrico
a = 15e-9; % Raio da esfera;
d = (5e-9)+7*a; % 5+a*[1 3 5 7] Distância da carga pontual
à origem
folga = a/100;
l= 632.8e-9;% comprimento de Onda

%P. Construtivos
c= 3e8;% Velocidade da Luz
w=((2*pi*c)./l);% frequência angular
eo = (1e-9)/(36*pi);% Permissividade do espaço livre
%-----Permissividade R. Ouro:el-----
Wp=1.3579e+016;%13.8e15;
Wp1=4.4910e+015;%45e14;
lambda=450e-9;
W0=2*pi*c/lambda;
einf = 7;
R = a;
gama=8.9516e+014;%9e14; gamaB
Gama=9.9909e+013;%1.075e14; GAMA0
%-----Reajuste-----
B = 0.85+0.35j;%1.56+0.6j+0.39*R-0.04*R.^2;
vf = 1.4e6;% Fermi Velocity % Não tenho Certeza vf = 2pi*c?
Gama = Gama+B*(vf./R);
eD = einf-(Wp.^2./(w.^2+j*Gama*w)); %Termos de Drude
eIB = (Wp1.^2./((W0.^2-w.^2)-j*gama*w)); % Termos de
Interbanda
egold = eD+eIB;
% -----Permissividade do Espaço livre
nmed = 1.334;
em =nmed^2;
%Permissividades:

```

```

em = em*eo;
e = egold*eo;
q = 4*pi*em*Eo*d^2;%Carga Pontual localizada no eixo z à
distancia d da origem

%_____
%malha
vM = linspace(-d,d,Ref); % Dimensões da malha
sZ = size(vM,2); % Contador
[x,z] = meshgrid(vM);
for n = 1:sZ
    for k =1:sZ
[theta(n,k),r(n,k)] = CART2POL(z(n,k),x(n,k));
        if r(n,k)<a
V(n,k,1) = (q/(4*pi*em*d));
Er(n,k,1) = 0;
Et(n,k,1) = 0;
        else
            if r(n,k)>a && r(n,k)< (d-folga)
V(n,k,1) = (q/(4*pi*em*d));
Er(n,k,1) = 0;
Et(n,k,1) = 0;
            else
V(n,k,1) = 0;
Er(n,k,1) = 0;
Et(n,k,1) = 0;
            end
        end
    end
end
for l=1:M
    for n = 1:sZ
        for k =1:sZ
            [theta(n,k),r(n,k)] =
CART2POL(z(n,k),x(n,k));
            %___Polinomio de Legendre de ordem l
            l
                P = Legendre(l,cos(theta(n,k)));
                Cn =
(q/(4*pi*em*d^(l+1)))*(((2*l+1)*em)/(l*e+(l+1)*em));
            if r(n,k)<a
                V(n,k,l+1) = V(n,k,l)+
(q/(4*pi*em*d)).*(r(n,k)./d).^l.*(((2*l+1)*em)/(l*e+(l+1)*em))
.*P(1,:);
                Er(n,k,l+1) = Er(n,k,l) -l*Cn.*r(n,k)^(l-1).*P(1,:);
                Et(n,k,l+1) = Et(n,k,l) +Cn.*r(n,k)^(l-
1).*P(2,:).*sin(theta(n,k));
            else
                if r(n,k)>a && r(n,k)< (d-folga)

```

```

                V(n,k,l+1) = V(n,k,l)+
(q/(4*pi*em*d)).*(r(n,k)./d).^l.*P(1,:) +
(q/(4*pi*em)).*((1*(em-
e))/(1*e+(l+1)*em)).*((a^(2*l+1))./(d^(l+1)).*r(n,k).^(l+1)).*
P(1,:);
                Er(n,k,l+1) = Er(n,k,l)+ (q/(4*pi*em)).*(((1*(em-
e))/(1*e+(l+1)*e))*(((l+1)*a^(2*l+1))/(d^(l+1)*r(n,k)^(l+2)))-
l*((r(n,k)^(l-1))/(d^(l+1)))).*P(1,:);
                Et(n,k,l+1) = Et(n,k,l)+ (q/(4*pi*em)).*(((1*(em-
e))/(1*e+(l+1)*e))*((a^(2*l+1))/(d^(l+1)*r(n,k)^(l+2)))+(r(n,
k)^(l-1))/(d^(l+1)))).*P(2,:).*sin(theta(n,k));
                else
                        V(n,k,l+1) = 0;
                        Er(n,k,l+1) = 0;
                        Et(n,k,l+1) = 0;
                end
                end
end
end
E = sqrt(Er(:,:,l+1).^2+Et(:,:,l+1).^2)
imagesc([min(x),max(x)]./1e-9,[min(z),max(z)]./1e-
9,abs(E)),colormap(hot)
ylabel('Eixo z(nm)')
xlabel('Eixo x(nm)')
formatfig(8,8)

```

B.3.3. Módulo do Campo H Uniforme

```

%TCC
%Resultado 1 = Polarizabilidade
clear,clc,close all
RefMalha = 700;
c= 3e8;% Velocidade da Luz
l = 632.8e-9;
w=((2*pi*c)./l);% Vetor frequência angular
fq = (w/(2*pi))./1e12;% Vetor frequência em TeraHertz
% -----Dimensões-----
r1 = 50e-9;% raio da esfera interna
Delta = 5e-9;% Espesura da camada do core-shell
r2 = r1+Delta;% Raio Externo Efetivo
%-----
w=((2*pi*c)./l);% Vetor frequência angular
sW = size(w,2);% Dimensão do vetor frêquencia
%-----Permissividade R. Meio:em-----
nmed = 1.334;
em =nmed^2;
%-----Permissividade R. Ouro:e1-----
Wp=1.3579e+016;%13.8e15;
Wp1=4.4910e+015;%45e14;
lambda=450e-9;

```

```

W0=2*pi*c/lambda;
einf = 7;
R = r1;
gama=8.9516e+014;%9e14; gamaB
Gama=9.9909e+013;%1.075e14; GAMA0
%-----Reajuste-----
B = 0.85+0.35j;%1.56+0.6j+0.39*R-0.04*R.^2;
vf = 1.4e6;% Fermi Velocity % Não tenho Certeza vf = 2pi*c?
Gama = Gama+B*(vf./R);
eD = einf-(Wp.^2./(w.^2+j*Gama*w)); %Termos de Drude
eIB = (Wp1.^2./((W0.^2-w.^2)-j*gama*w)); % Termos de
Interbanda
egold = eD+eIB;
%-----Permissividade R. Silica:e2-----
B1 = 0.6961663;
B2 = 0.4079426;
B3 = 0.8974794;
C1 = (0.0684043^2)*1e-12;
C2 = (0.1162414^2)*1e-12;
C3 = (9.896161^2)*1e-12;
esilica = (1+((B1*l.^2)./(1.^2-C1))+((B2*l.^2)./(1.^2-
C2))+((B3*l.^2)./(1.^2-C3)));
%Polarizabilidades
e1 = egold;
e2 = esilica;
f = ((r1.^3)./(r2.^3));
alphain = 4*pi*e2.*(r1.^3).*((3*em.*(e1-e2))./(f.*(e1-
e2).*(2*e2-2*em)+(2*e2+e1).*(e2+2*em)));
alphaout = 4*pi*em.*(r2.^3).*((f.*(e1-
e2).*(2*e2+em)+(2*e2+e1).*(e2-em))./(f.*(e1-e2).*(2*e2-
2*em)+(2*e2+e1).*(e2+2*em)));
%-----Campo Elétrico-----
-----
Eo = 1; %Amplitude da onda plana
eo = (1e-9)/(36*pi);% Permissividade do espaço livre
e1 = e1*eo;
e2 = e2*eo;
em = em*eo;
pIn = eo*Eo*alphain;
pOut = eo*Eo*alphaout;
%-----Malha-----
vM = linspace(-r1-15e-9,r1+15e-9,RefMalha); % Dimensão da
malha
sZ = size(vM,2); % Dimensão do Contador da Malha
[x,z] = meshgrid(vM);
y = 0;
for n = 1:sZ
    for k =1:sZ
[phi(n,k),rho(n,k)] = cart2pol(x(n,k),y);
[theta(n,k),r(n,k)] = cart2pol(z(n,k),rho(n,k));

```

```

        if r(n,k)<=r1 %Região Interna: Dentro da Esfera
Interna
        Hx(n,k) = 0;
        Hy(n,k) = 0;
        Hz(n,k) = 0;
        else
        if r(n,k)>r1 && r(n,k)<r2 % Região Intermediaria:
Dentro da Esfera Externa, fora da esfera interna
        Hx(n,k) = ((j*w)/(4*pi))*pIn.*(r(n,k).^(-
2)).*(sin(theta(n,k)).*sin(phi(n,k)));
        Hy(n,k) = -((j*w)/(4*pi))*pIn.*(r(n,k).^(-
2)).*(sin(theta(n,k)).*cos(phi(n,k)));
        Hz(n,k) = 0;
        else % Região Externa: Fora das Esferas
        Hx(n,k) = ((j*w)/(4*pi))*pOut.*(r(n,k).^(-
2)).*(sin(theta(n,k)).*sin(phi(n,k)));
        Hy(n,k) = -((j*w)/(4*pi))*pOut.*(r(n,k).^(-
2)).*(sin(theta(n,k)).*cos(phi(n,k)));
        Hz(n,k) = 0;
        end
        end
    end

    end
CampoH = sqrt((Hx).^2+(Hy).^2+(Hz).^2);
close all,clc
imagesc([min(vM),max(vM)]./1e-9,[min(vM),max(vM)]./1e-
9,abs(CampoH)')
colormap(hot)
xlabel('Eixo z - (nm)')
ylabel('Eixo x - (nm)')
formatfig(6,7)

```

C.3.4. Campo Vetorial Elétrico

```

%Campo Elétrico Para TCC-2016
clear,clc,close all
RefMalha = 200;
Delta =10e-9;
r1 = 15e-9;
r2 = r1+Delta;
l = 632.8e-9;
c= 3e8;% Velocidade da Luz
w=((2*pi*c)./l);% Vetor frequência angular
fq = (w/(2*pi))./1e12;% Vetor frequência em TeraHertz
%-----Permissividade R. Ouro:el-----
Wp=1.3579e+016;%13.8e15;
Wp1=4.4910e+015;%45e14;
lambda=450e-9;
W0=2*pi*c/lambda;
einf = 7;

```

```

R = r1;
gama=8.9516e+014;%9e14; gamaB
Gama=9.9909e+013;%1.075e14; GAMA0
%-----Reajuste-----
B = 0.85+0.35j;%1.56+0.6j+0.39*R-0.04*R.^2;
vf = 1.4e6;% Fermi Velocity % Não tenho Certeza vf = 2pi*c?
Gama = Gama+B*(vf./R);
eD = einf-(Wp.^2./(w.^2+j*Gama*w)); %Termos de Drude
eIB = (Wp1.^2./((W0.^2-w.^2)-j*gama*w)); % Termos de
Interbanda
egold = eD+eIB;
e1 = real(egold);
e2 = imag(egold);
%-----Permissividade R. Meio:em-----
nmed = 1.334;
em =nmed^2;
%-----Permissividade R. Sílica:e2-----
B1 = 0.6961663;
B2 = 0.4079426;
B3 = 0.8974794;
C1 = (0.0684043^2)*1e-12;
C2 = (0.1162414^2)*1e-12;
C3 = (9.896161^2)*1e-12;
esilica = (1+((B1*1.^2)./(1.^2-C1))+((B2*1.^2)./(1.^2-
C2))+((B3*1.^2)./(1.^2-C3)));
%Polarizabilidades
e1 = egold;
e2 = esilica;
f = ((r1.^3)./(r2.^3));
alphain = 4*pi*e2.*(r1.^3).*((3*em.*(e1-e2))./(f.*(e1-
e2).*(2*e2-2*em)+(2*e2+e1).*(e2+2*em)));
alphaout = 4*pi*em.*(r2.^3).*((f.*(e1-
e2).*(2*e2+em)+(2*e2+e1).*(e2-em))./(f.*(e1-e2).*(2*e2-
2*em)+(2*e2+e1).*(e2+2*em)));

%-----Campo Elétrico-----
-----
Eo =1; %Amplitude da onda plana
eo = (1e-9)/(36*pi);% Permissividade do espaço livre
e1 = e1*eo;
e2 = e2*eo;
em = em*eo;
pIn = eo*Eo*alphain;
pOut = eo*Eo*alphaout;

%-----Malha-----
vM = linspace(-(15e-9+r1),15e-9+r1,RefMalha); % Dimensão da
malha
sZ = size(vM,2); % Dimensão do Contador da Malha
[x,y,z] = meshgrid(vM);
for n = 1:sZ

```

```

        for k =1:sZ
            n
            k
            for u=1:sZ
[phi(n,k,u),rho(n,k,u)] = cart2pol(x(n,k,u),y(n,k,u));
[theta(n,k,u),r(n,k,u)] = cart2pol(z(n,k,u),rho(n,k,u));
%-----Campo-----
        if r(n,k,u)<=r1 %Região Interna: Dentro da Esfera Interna
            Ex(n,k,u) = 0;
            Ey(n,k,u) = 0;
            Ez(n,k,u) = -3*em*Eo*(r1^-3)*((3*e2)./(2*(r2^-3)*(e2-
e1)*(e2-em)-(r1^-3)*(2*e2+e1)*(e2+2*em)));
        else
            if r(n,k,u)>r1 && r(n,k,u)<r2 % Região Intermediaria:
Dentro da Esfera Externa, fora da esfera interna
                Ex(n,k,u) = ((pIn)./(4*pi*e2)).*(r(n,k,u).^-
3).*3.*cos(theta(n,k,u)).*sin(theta(n,k,u)).*cos(phi(n,k,u));
                Ey(n,k,u) = ((pIn)./(4*pi*e2)).*(r(n,k,u).^-
3).*3.*cos(theta(n,k,u)).*sin(theta(n,k,u)).*sin(phi(n,k,u));
                Ez(n,k,u) = -3*em*Eo*(r1^-3)*((2*e2+e1)./(2*(r2^-
3)*(e2-e1)*(e2-em)-(r1^-3)*(2*e2+e1)*(e2+2*em))) +
                ((pIn)./(4*pi*e2)).*(r(n,k,u).^-
3).*3.*((cos(theta(n,k,u))).^2)-1);
                else % Região Externa: Fora das Esferas
                    Ex(n,k,u) = ((pOut)./(4*pi*em)).*(r(n,k,u).^-
3).*3.*cos(theta(n,k,u)).*sin(theta(n,k,u)).*cos(phi(n,k,u));
                    Ey(n,k,u) = ((pOut)./(4*pi*em)).*(r(n,k,u).^-
3).*3.*cos(theta(n,k,u)).*sin(theta(n,k,u)).*sin(phi(n,k,u));
                    Ez(n,k,u) = Eo + ((pOut)./(4*pi*em)).*(r(n,k,u).^-
3).*3.*((cos(theta(n,k,u))).^2)-1);
                    E=
                    abs(sqrt((Ex(n,k,u)).^2+(Ey(n,k,u)).^2+(Ez(n,k,u)).^2));
                end
            end
        end
%-----
        end
    end
    end
    CampoE = sqrt((Ex).^2+(Ey).^2+(Ez).^2);
%
close all
xslice = 0./1e-9;
yslice = 0./1e-9;
zslice = [ ]./1e-9;
slice(x./1e-9,y./1e-9,z./1e-
9,abs(CampoE),xslice,yslice,zslice)
view(45,45)
alpha 0.7
xlabel('x (nm)'),ylabel('y (nm)'),zlabel('z (nm)')
xlim([min(min(min(x))) max(max(max(x)))]./1e-9)
ylim([min(min(min(y))) max(max(max(y)))]./1e-9)

```

```

zlim([min(min(min(z))) max(max(max(z)))]./1e-9)
shading interp
colormap hot
color bar
set(gcf, 'units', 'centimeters', 'pos', [12 3 15 13])
%
%-----Quiver
%-----Malha-----
RefMalha2 = 5.5;
vM = linspace(-(15e-9+r1),15e-9+r1,RefMalha2); % Dimensão da
malha
sZ = size(vM,2); % Dimensão do Contador da Malha
[x1,y1,z1] = meshgrid(vM);
clear phi rho theta r Ex Ey Ez
for n = 1:sZ
    for k =1:sZ
        n
        k
        for u=1:sZ
[phi(n,k,u),rho(n,k,u)] = cart2pol(x1(n,k,u),y1(n,k,u));
[theta(n,k,u),r(n,k,u)] = cart2pol(z1(n,k,u),rho(n,k,u));

%-----Campo-----
    if r(n,k,u)<=r1 %Região Interna: Dentro da Esfera Interna
        Ex(n,k,u) = 0;
        Ey(n,k,u) = 0;
        Ez(n,k,u) = -3*em*Eo*(r1^-3)*((3*e2)./(2*(r2^-3)*(e2-
e1)*(e2-em)-(r1^-3)*(2*e2+e1)*(e2+2*em)));
    else
        if r(n,k,u)>r1 && r(n,k,u)<r2 % Região Intermediaria:
Dentro da Esfera Externa, fora da esfera interna
            Ex(n,k,u) = ((pIn)./(4*pi*e2)).*(r(n,k,u).^-
3).*3.*cos(theta(n,k,u)).*sin(theta(n,k,u)).*cos(phi(n,k,u));
            Ey(n,k,u) = ((pIn)./(4*pi*e2)).*(r(n,k,u).^-
3).*3.*cos(theta(n,k,u)).*sin(theta(n,k,u)).*sin(phi(n,k,u));
            Ez(n,k,u) = -3*em*Eo*(r1^-3)*((2*e2+e1)./(2*(r2^-
3)*(e2-e1)*(e2-em)-(r1^-3)*(2*e2+e1)*(e2+2*em))) +
((pIn)./(4*pi*e2)).*(r(n,k,u).^-
3).*3.*((cos(theta(n,k,u))).^2)-1);
            else % Região Externa: Fora das Esferas
                Ex(n,k,u) = ((pOut)./(4*pi*em)).*(r(n,k,u).^-
3).*3.*cos(theta(n,k,u)).*sin(theta(n,k,u)).*cos(phi(n,k,u));
                Ey(n,k,u) = ((pOut)./(4*pi*em)).*(r(n,k,u).^-
3).*3.*cos(theta(n,k,u)).*sin(theta(n,k,u)).*sin(phi(n,k,u));
                Ez(n,k,u) = Eo + ((pOut)./(4*pi*em)).*(r(n,k,u).^-
3).*3.*((cos(theta(n,k,u))).^2)-1);
                E=
                abs(sqrt((Ex(n,k,u)).^2+(Ey(n,k,u)).^2+(Ez(n,k,u)).^2));
            end
        end
    end
end

```

```

        end
    end
end
hold on
quiver3(x1./1e-9,y1./1e-9,z1./1e-9,Ex,Ey,Ez,0.4,'b')
grid on

```

C.3.5. Campo Vetorial Magnético

```

%Teste para absorbância de nanopartículas de ouro
clear,clc,close all
RefMalha = 200;
Delta =10e-9;
r1 = 15e-9;
r2 = r1+Delta;
l = 632.8e-9;
c= 3e8;% Velocidade da Luz
w=((2*pi*c)./l);% Vetor frequência angular
fq = (w/(2*pi))./1e12;% Vetor frequência em TeraHertz
%-----Permissividade R. Ouro:e1-----
Wp=1.3579e+016;%13.8e15;
Wp1=4.4910e+015;%45e14;
lambda=450e-9;
W0=2*pi*c/lambda;
einf = 7;
R = r1;
gama=8.9516e+014;%9e14; gamaB
Gama=9.9909e+013;%1.075e14; GAMA0
%-----Reajuste-----
B = 0.85+0.35j;%1.56+0.6j+0.39*R-0.04*R.^2;
vf = 1.4e6;% Fermi Velocity % Não tenho Certeza vf = 2pi*c?
Gama = Gama+B*(vf./R);
eD = einf-(Wp.^2./(w.^2+j*Gama*w)); %Termos de Drude
eIB = (Wp1.^2./((W0.^2-w.^2)-j*gama*w)); % Termos de
Interbanda
egold = eD+eIB;
e1 = real(egold);
e2 = imag(egold);
%-----Permissividade do Espaço Livre-----
nmed = 1.334;
em =nmed^2;
%-----Permissividade R. Sílica:e2-----
B1 = 0.6961663;
B2 = 0.4079426;
B3 = 0.8974794;
C1 = (0.0684043^2)*1e-12;
C2 = (0.1162414^2)*1e-12;
C3 = (9.896161^2)*1e-12;
esilica = (1+((B1*l.^2)./(1.^2-C1))+((B2*l.^2)./(1.^2-
C2))+((B3*l.^2)./(1.^2-C3)));
%Polarizabilidades
e1 = egold;

```

```

e2 = esilica;
f = ((r1.^3)./(r2.^3));
alphain = 4*pi*e2.*(r1.^3).*((3*em.*(e1-e2))./(f.*(e1-
e2).*(2*e2-2*em)+(2*e2+e1).*(e2+2*em)));
alphaout = 4*pi*em.*(r2.^3).*((f.*(e1-
e2).*(2*e2+em)+(2*e2+e1).*(e2-em))./(f.*(e1-e2).*(2*e2-
2*em)+(2*e2+e1).*(e2+2*em)));

%-----Campo Elétrico-----
-----
Eo = 1; %Amplitude da onda plana
eo = (1e-9)/(36*pi);% Permissividade do espaço livre
e1 = e1*eo;
e2 = e2*eo;
em = em*eo;
pIn = eo*Eo*alphain;
pOut = eo*Eo*alphaout;
%-----Malha-----
vM = linspace(-(15e-9+r1),15e-9+r1,RefMalha); % Dimensão da
malha
sZ = size(vM,2); % Dimensão do Contador da Malha
[x,y,z] = meshgrid(vM);
for n = 1:sZ
    for k =1:sZ
        n
        k
        for u=1:sZ
[phi(n,k,u),rho(n,k,u)] = cart2pol(x(n,k,u),y(n,k,u));
[theta(n,k,u),r(n,k,u)] = cart2pol(z(n,k,u),rho(n,k,u));

%-----Campo-----
        if r(n,k,u)<=r1 %Região Interna: Dentro da Esfera
Interna
            Hx(n,k,u) = 0;
            Hy(n,k,u) = 0;
            Hz(n,k,u) = 0;
        else
            if r(n,k,u)>r1 && r(n,k,u)<r2 % Região Intermediaria:
Dentro da Esfera Externa, fora da esfera interna
                Hx(n,k,u) = ((j*w)./(4*pi)).*pIn.*(r(n,k,u).^(-
2)).*(sin(theta(n,k,u)).*sin(phi(n,k,u)));
                Hy(n,k,u) = -((j*w)./(4*pi)).*pIn.*(r(n,k,u).^(-
2)).*(sin(theta(n,k,u)).*cos(phi(n,k,u)));
                Hz(n,k,u) = 0;
            else % Região Externa: Fora das Esferas
                Hx(n,k,u) = ((j*w)./(4*pi)).*pOut.*(r(n,k,u).^(-
2)).*(sin(theta(n,k,u)).*sin(phi(n,k,u)));
                Hy(n,k,u) = -((j*w)./(4*pi)).*pOut.*(r(n,k,u).^(-
2)).*(sin(theta(n,k,u)).*cos(phi(n,k,u)));
                Hz(n,k,u) = 0;
            end
        end
    end
end

```

```

        end
    end
end
end
CampoH = sqrt((Hx).^2+(Hy).^2+(Hz).^2);

%
close all
xslice = 0./1e-9;
yslice = 0./1e-9;
zslice = []./1e-9;
slice(x./1e-9,y./1e-9,z./1e-
9,abs(CampoH),xslice,yslice,zslice)
xlabel('x (m)'),ylabel('y (m)'),zlabel('z (m)')
xlim([min(min(min(x))) max(max(max(x)))]./1e-9)
ylim([min(min(min(y))) max(max(max(y)))]./1e-9)
zlim([min(min(min(z))) max(max(max(z)))]./1e-9)
shading interp
colormap hot
color bar
set(gcf,'units','centimeters','pos',[12 3 15 13])
view(45,45)
alpha 0.7
%-----Quiver
RefMalha2 = 6 ;
    vM = linspace(-(15e-9+r1),15e-9+r1,RefMalha2); % Dimensão
da malha
sZ = size(vM,2); % Dimensão do Contador da Malha
[x1,y1,z1] = meshgrid(vM);
clear phi rho theta r Hx Hy Hz
for n = 1:sZ
    for k =1:sZ
        n
        k
        for u=1:sZ
[phi(n,k,u),rho(n,k,u)] = cart2pol(x1(n,k,u),y1(n,k,u));
[theta(n,k,u),r(n,k,u)] = cart2pol(z1(n,k,u),rho(n,k,u));

%-----Campo-----
        if r(n,k,u)<=r1 %Região Interna: Dentro da Esfera
Interna
            Hx(n,k,u) = 0;
            Hy(n,k,u) = 0;
            Hz(n,k,u) = 0;
        else
            if r(n,k,u)>r1 && r(n,k,u)<r2 % Região Intermediaria:
Dentro da Esfera Externa, fora da esfera interna

                Hx(n,k,u) = ((j*w)./(4*pi)).*pIn.*(r(n,k,u).^(-
2)).*(sin(theta(n,k,u)).*sin(phi(n,k,u))));

```

```

        Hy(n,k,u) = -((j*w)./(4*pi)).*pIn.*(r(n,k,u).^(-
2)).*(sin(theta(n,k,u)).*cos(phi(n,k,u)));
        Hz(n,k,u) = 0;
        else % Região Externa: Fora das Esferas
        Hx(n,k,u) = ((j*w)./(4*pi)).*pOut.*(r(n,k,u).^(-
2)).*(sin(theta(n,k,u)).*sin(phi(n,k,u)));
        Hy(n,k,u) = -((j*w)./(4*pi)).*pOut.*(r(n,k,u).^(-
2)).*(sin(theta(n,k,u)).*cos(phi(n,k,u)));
        Hz(n,k,u) = 0;
    end
    end
    end
end
hold on
quiver3(x1./1e-9,y1./1e-9,z1./1e-9,Hx,Hy,Hz,0.5,'b')

```

C.4. INTENSIDADE DO CAMPO DIPOLO ELÉTRICO

```

%Intensidade do Dipolo IEEEE
clear,clc,close all
%0 6.2
Ref =1500;
r1 = 50e-9;
l= linspace(450e-9,750e-9,Ref);% Vetor comprimento de Onda
Delta =linspace(0,10e-9,Ref);
r2 = r1+Delta;
[r2,l] = meshgrid(r2,l);
c= 3e8;% Velocidade da Luz
w=((2*pi*c)./l);% Vetor frequência angular
fq = (w/(2*pi))./1e12;% Vetor frequência em TeraHertz
Wp=1.3579e+016;%13.8e15;
Wp1=4.4910e+015;%45e14;
lambda=450e-9;
W0=2*pi*c/lambda;
einf = 7;
R = r1;
gama=8.9516e+014;%9e14; gamaB
Gama=9.9909e+013;%1.075e14; GAMA0
%-----Reajuste-----
B = 0.85+0.35j;%1.56+0.6j+0.39*R-0.04*R.^2;
vf = 1.4e6;% Fermi Velocity % Não tenho Certeza vf = 2pi*c?
Gama = Gama+B*(vf./R);
eD = einf-(Wp.^2./(w.^2+j*Gama*w)); %Termos de Drude
eIB = (Wp1.^2./((W0.^2-w.^2)-j*gama*w)); % Termos de
Interbanda
egold = eD+eIB;
nmed = 1.334;
em =nmed^2;
em=1;
B1 = 0.6961663;

```

```

B2 = 0.4079426;
B3 = 0.8974794;
C1 = (0.0684043^2)*1e-12;
C2 = (0.1162414^2)*1e-12;
C3 = (9.896161^2)*1e-12;
esilica = (1+((B1*1.^2)./(1.^2-C1))+((B2*1.^2)./(1.^2-
C2))+((B3*1.^2)./(1.^2-C3)));
%Polarizabilidades
e1 = egold;
e2 = esilica;
f = ((r1.^3)./(r2.^3));
alphain = 4*pi*e2.*(r1.^3).*((3*em.*(e1-e2))./(f.*(e1-
e2).*(2*e2-2*em)+(2*e2+e1).*(e2+2*em)));
alphaout = 4*pi*em.*(r2.^3).*((f.*(e1-
e2).*(2*e2+em)+(2*e2+e1).*(e2-em))./(f.*(e1-e2).*(2*e2-
2*em)+(2*e2+e1).*(e2+2*em)));
xi = (f.*(e1-e2).*(2*e2-2*em)+(2*e2+e1).*(e2+2*em))/(3*em);
E0=1;
pin = alphain*E0;
pout = alphaout*E0;
Ein = ((2*e2+e1)./(xi)).*E0 + ((2*pin)./(4*pi*e2*r1.^3));
Eout = E0 + ((2*pout)./(4*pi*em*r2.^3));
imagesc([min(l),max(l)]./1e-9,[min(Delta),max(Delta)]./1e-
9,abs(Ein')),colormap(hot)
ylabel('Espessura da Camada - Delta(nm)')
xlabel('Comprimento de Onda lambda(nm)')
formatfig(8,7)
figure
imagesc([min(l),max(l)]./1e-9,[min(Delta),max(Delta)]./1e-
9,abs(Eout')),colormap(hot)
ylabel('Espessura da Camada - Delta(nm)')
xlabel('Comprimento de Onda lambda(nm)')
formatfig(8,7)

```

C.5. VALIDADE DO MÉTODO

```

close all
clear,clc
Ref = 2000;
em = 1;
nmed = 1.334;
em =nmed^2;
R = linspace(0e-9,75e-9,Ref);
l = linspace(450e-9,600e-9,Ref);
[R,l] = meshgrid(R,l);
k = sqrt(em)*(2*pi)./l;
x = k.*R;
imagesc([min(l),max(l)]./1e-9,[min(R),max(R)]./1e-
9,x'),colormap(hot), ylabel('Raio Efetivo da Partícula b(nm)')
xlabel('Comprimento de Onda lambda(nm)')
formatfig(13,9)

```

TRABALHOS PÚBLICADOS DURANTE A GRADUAÇÃO

- [1] CRUZ, A. F. S.; SANTOS, R. C. ; FERRAZ, P. F. ; COSTA, J. S. ; COSTA, K. Q. . Estudo Analítico do Espalhamento de Rayleigh em Nanopartículas de Ouro do Tipo Core-Shell. In: MOMAG 2016, 2016, Porto Alegre - RS. 12º CBMag - Congresso Brasileiro de Eletromagnetismo 17º SBMO - Simpósio Brasileiro de Micro-ondas e Optoeletrônica LAWOFS 2016 - Latin American Workshop on Optical Fiber Sensors, 2016.
- [2] COSTA, J. S. ; CRUZ, A. F. S. ; SANTOS, R. C. ; COSTA, K. Q. . Effect of Dielectric Shell on Gold Nanoparticles in a Surface Plasmon Resonance Sensor Response. In: MOMAG 2016, 2016, Porto Alegre - RS. 12º CBMag - Congresso Brasileiro de Eletromagnetismo 17º SBMO - Simpósio Brasileiro de Micro-ondas e Optoeletrônica LAWOFS 2016 - Latin American Workshop on Optical Fiber Sensors, 2016.
- [3] CRUZ, A. F. S.; FERRAZ, P. F. ; SANTOS, R. C. ; COSTA, K. Q. . Análise do Campo Elétrico em Nanoesfera com Camada de Grafeno. In: XI ENEEEL, 2016, Natal -RN. Encontro Nacional dos Estudantes de Engenharia Elétrica, 2016.
- [4] FERRAZ, P. F. ; CRUZ, A. F. S. ; SANTOS, R. C. ; COSTA, K. Q. . Aplicação do Método dos Elementos Finitos em Sensores Plasmônicos no Comsol. In: XI ENEEEL, 2016, Natal - RN. Encontro Nacional dos Estudantes de Engenharia Elétrica, 2016.
- [5] CRUZ, A. F. S.; COSTA, J. S. ; SANTOS, R. C. ; COSTA, K. Q. . Eficiência de Extinção em Nanopartículas Metálicas do Tipo Core-Shell Isoladas e Acopladas. In: SBrT 2016, 2016, Santarém - PA. XXXIV Simpósio Brasileiro de Telecomunicações e Processamento de Sinais, 2016.
- [6] COSTA, J. S. ; CRUZ, A. F. S. ; SANTOS, R. C. ; COSTA, K. Q. . Análise de um Sensor Plasmônico Acoplado à Arranjo Periódico de Nanopartículas tipo Core-Shell. In: SBrT 2016, 2016, Santarém - PA. XXXIV Simpósio Brasileiro de Telecomunicações e Processamento de Sinais, 2016.
- [7] SILVA, G. S. ; CRUZ, A. F. S. ; FONSECA, W. S. . Analise da eficiência de dispositivos térmicos de baixo custo utilizando Arduino. In: Congresso Brasileiro de Extensão Universitária, 2014, Belém - PA. 6º CBEU, 2014.
- [8] CRUZ, A. F. S.; SILVA, G. S. ; FONSECA, W. S. . Educação em engenharia baseada na resolução de problemas reais de engenharia. In: VIII Congresso Nacional de Engenharia Mecânica, 2014, Ubêrlândia - MG. CONEM 2014, 2014.
- [9] SILVA, G. S. ; CRUZ, A. F. S. ; FONSECA, W. S. ; FERNANDES, F. C. ; NETO, A. C. N. . Construção de garra mecanizada como método de ensino na engenharia. In: XLII Congresso Brasileiro de Educação em Engenharia, 2014, Juiz de Fora - MG. COBENGE 2014, 2014.

- [10] FREITAS, P. V. ; CRUZ, A. F. S. ; FONSECA, W. S. . Etilômetro de baixo custo: uma alternativa para prevenção de incidentes. In: XLII Congresso Brasileiro de Educação em Engenharia, 2014, Juiz de Fora - MG. COBENGE 2014, 2014.
- [11] CRUZ, A. F. S.; SILVA, G. S. ; FONSECA, W. S. . Proposta de um sistema de estabilização para um protótipo - mini submarino de prova. In: XLII Congresso Brasileiro de Educação em Engenharia, 2014, Juiz de Fora - MG. COBENGE 2014, 2014.
- [12] BANDEIRA, T. B. ; CRUZ, A. F. S. ; FONSECA, W. S. . Bancada para estudo de vibrações em um motor desbalanceado utilizando arduino. In: XLII Congresso Brasileiro de Educação em Engenharia, 2014, Juiz de Fora MG. COBENGE 2014, 2014.
- [13] SILVA, G. S. ; CRUZ, A. F. S. ; FONSECA, W. S. . Análise da aplicabilidade do Gerador de Van Der Graaf no ensino de ciências na região do Lago de Tucuruí. In: Conferência da Associação Latinoamericana de Investigação em Educação em Ciências, 2013, Manaus - AM. LASERA, 2013.
- [14] SANTOS, R. C. ; CRUZ, A. F. S. ; COSTA, J. S. ; COSTA, K. Q. . Aplicação do COMSOL para Análise de Sensores Plasmônicos de Nanopartículas. In: SBrT 2016, 2016, Santarém - PA. XXXIV Simpósio Brasileiro de Telecomunicações e Processamento de Sinais, 2016.
- [15] FERRAZ, P. F. ; CRUZ, A. F. S. ; COSTA, K. Q. . Análise Numérica de Sensores Plasmônicos na Configuração SPCE através do Método dos Elementos Finitos. In: SBrT 2016, 2016, Santarém - PA. XXXIV Simpósio Brasileiro de Telecomunicações e Processamento de Sinais, 2016.
- [16] BANDEIRA, T. B. ; CRUZ, A. F. S. ; FONSECA, W. S. . Bench for Vibration Study in an Unbalanced Motor Using Arduino. Journal of Mechanics Engineering and Automation, New York, p. 82 - 87, 25 fev. 2015.
- [17] SILVA, G. S. ; CRUZ, A. F. S. ; FONSECA, W. S. ; FERNANDES, F. C. ; NETO, A. C. N. . Construction of Mechanized Claw as a Teaching Method in Engineering. Journal of Mechanics Engineering and Automation, New York, p. 107 - 111, 25 fev. 2015.

REFERENCIAL TEÓRICO

- [1] He, Y. Q.; Liu, S. P.; Kong, L. and Liu, Z. F. “A study on the sizes and concentrations of gold nanoparticles by spectra of absorption, resonance rayleigh scattering and resonance non-linear scattering,” *Spectrochimica Acta*, vol. Part A, no. 61, p. 2861–2866, 2005.
- [2] PEREIRA, M. K. Ressonância de Plasmon de Superfície Localizado e Espalhamento Raman em Soluções Coloidais de Ouro. 2009. 108 f. Dissertação (Mestre em Física) – Instituto de Física, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre.
- [3] WILCOXON, J. P., ABRAMS, B. L. *Chemical Society Reviews*, Vol. 35, pág. 1162 (2006).
- [4] COSTA, K. Q., COSTA, J. S., DMITRIEV V., ROSSO, T. D., PANDOLI, O., AUCELIO, R. Q. Analysis of surface plasmon resonance sensor coupled to periodic array of gold nanoparticles, in *Microwave and Optoelectronics Conference (IMOC), 2015 SBMO/IEEE MTT-S International*, Nov 2015, pp. 1–5.
- [5] MAIER, S. A. *Plasmonics: Fundamentals and Applications*, Springer: New York, 2007.
- [6] Liu, X.; Atwater, M.; Wang, J. and Huo, Q. “Extinction coefficient of gold nanoparticles with different sizes and different capping ligands,” *Colloids and Surfaces B, vol. Biointerfaces*, no. 58, p. 3–7, 2007.
- [7] Rance, G. A.; Marsh, D. H. and Khlobystov, A. N. “Extinction coefficient analysis of small alkanethiolate-stabilised gold nanoparticles,” *Chemical Physics Letters*, no. 460, p. 230–236, 2008.
- [8] CRUZ, A. F. S.; COSTA, J. S. ; SANTOS, R. C. ; COSTA, K. Q. . Eficiência de Extinção em Nanopartículas Metálicas do Tipo Core-Shell Isoladas e Acopladas. In: *SBrT 2016, 2016, Santarém - PA. XXXIV Simpósio Brasileiro de Telecomunicações e Processamento de Sinais*, 2016.
- [9] CRUZ, A. F. S.; SANTOS, R. C. ; FERRAZ, P. F. ; COSTA, J. S. ; COSTA, K. Q. . Estudo Analítico do Espalhamento de Rayleigh em Nanopartículas de Ouro do Tipo Core-Shell. In: *MOMAG 2016, 2016, Porto Alegre - RS. 12º CBMag - Congresso Brasileiro de Eletromagnetismo 17º SBMO - Simpósio Brasileiro de Micro-ondas e Optoeletrônica LAWOFs 2016 - Latin American Workshop on Optical Fiber Sensors*, 2016.
- [10] COMSOL Multiphysics 5.2, Inc. Disponível em: <http://www.comsol.com/>. Acessado em: 19/01/2016.
- [11] NanoComposix. Disponível em: <http://nanocomposix.com/>. Acessado em: 07/03/2016.
- [12] SADIKU, M. N. O. *Elementos de Eletromagnetismo*. Porto Alegre: Bookman, 2012, 716, 5º Ed.
- [13] BOHREN, C. F., HUFFMAN, D. R. *Absorption and Scattering of Light by Small Particles*, Wiley: New York, 1983.

- [14] NOVOTNY, L., B. HECHT (2012), Principles of Nano Optics, 2ª edição, Cambridge, Nova York.
- [15] COSTA, J. S. ; CRUZ, A. F. S. ; SANTOS, R. C. ; COSTA, K. Q. . Effect of Dielectric Shell on Gold Nanoparticles in a Surface Plasmon Resonance Sensor Response. In: MOMAG 2016, 2016, Porto Alegre - RS. 12º CBMag - Congresso Brasileiro de Eletromagnetismo 17º SBMO - Simpósio Brasileiro de Micro-ondas e Optoeletrônica LAWOFS 2016 - Latin American Workshop on Optical Fiber Sensors, 2016.
- [16] COSTA, J. S. ; CRUZ, A. F. S. ; SANTOS, R. C. ; COSTA, K. Q. . Análise de um Sensor Plasmônico Acoplado à Arranjo Periódico de Nanopartículas tipo Core-Shell. In: SBRT 2016, 2016, Santarém - PA. XXXIV Simpósio Brasileiro de Telecomunicações e Processamento de Sinais, 2016.
- [17] JEFFREY, A. Advanced Engineering Mathematics. San Diego: Harcourt, 2001.1184.
- [18] SADIKU, M. N. O. Numerical Techniques in Electromagnetics. New York: CRC, 2001, 760, 2º Ed.
- [19] ARFKEN, G. B.; WEBER, H. J. Mathematical Methods For Physicists. San Diego: Elsevier, 2005, 1195, 6º Ed.
- [20] STRATTON, J. A. Electromagnetic Theory. New York: McGraw-Hill, 1941, 609.
- [21] JACKSON, J. D. Classical Electrodynamics. Hoboken: John Wiley & Sons, 1999, 883, 3º Ed.
- [22] CRUZ, A. F. S.; FERRAZ, P. F.; SANTOS, R. C.; COSTA, K. Q. Análise do Campo Elétrico em Nanoesfera com Camada de Grafeno. In: XI ENEEEL, 2016, Natal -RN. Encontro Nacional dos Estudantes de Engenharia Elétrica, 2016.
- [23] ZILIO, S. C. Óptica moderna: fundamentos e aplicações. São Carlos: Instituto de Física de São Carlos, 2009. 315 p.
- [24] RefractiveIndex.INFO, “Refractivity Index of Fused Silica”, 2016, <http://refractiveindex.info/?shelf=main&book=SiO2&page=Malitson>, acessado em: 04/02/2016.
- [25] COMSOL Multiphysics 5.2, COMSOL Multiphysics Reference Manual. US. 1998-2015.1336p.
- [26] COMSOL Multiphysics 5.2, RF Module User’s Guide. US. 1998-2015. 206p.
- [27] PARDISO 5.0.0 Solver Project, 2016. <http://www.pardiso-project.org/>, Acessado em: 28/12/2016.
- [28] RefractiveIndex.INFO, “Refractivity Index of water”, 2016. Acessado em: <http://refractiveindex.info/?shelf=main&book=H2O&page=Kedenburg>. Acessado em: 13/02/2016.