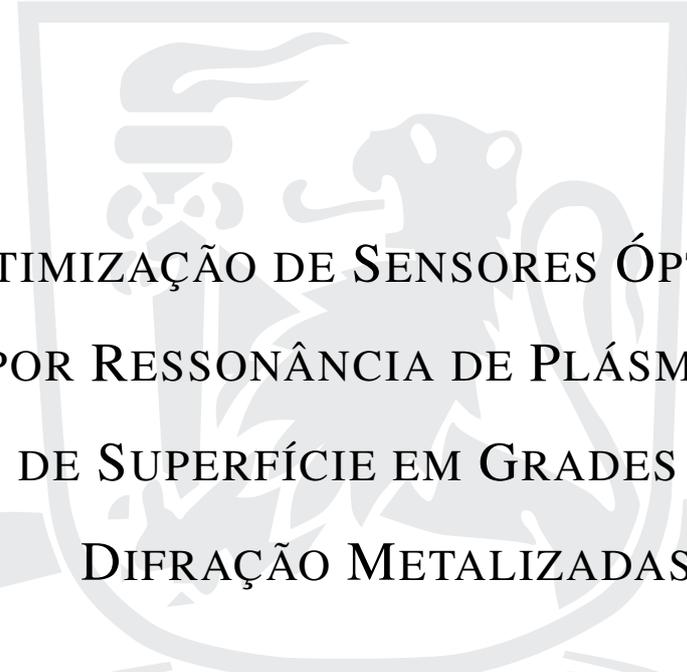


UNIVERSIDADE FEDERAL DE PERNAMBUCO
CENTRO DE TECNOLOGIA E GEOCIÊNCIAS
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA ELÉTRICA



ERNANDE FERREIRA DE MELO



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



VIRTUS IMPAVIDA

RECIFE, AGOSTO DE 2013.

ERNANDE FERREIRA DE MELO

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

Tese submetida ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Elétrica da Universidade Federal de Pernambuco como parte dos requisitos para obtenção do grau de **Doutor em Engenharia Elétrica**

ORIENTADOR: PROF. EDUARDO FONTANA, PHD.

Recife, Agosto de 2013.

©Ernande Ferreira de Melo, 2013

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

Ernande Ferreira de Melo

**Otimização de Sensores Ópticos por Ressonância de
Plásmons de Superfície em Grades de Difração
Metalizadas**

‘Esta Tese foi julgada adequada para obtenção do Título de Doutor em Engenharia Elétrica, Área de Concentração em Fotônica, e aprovada em sua forma final pelo Programa de Pós-Graduação em Engenharia Elétrica da Universidade Federal de Pernambuco’.

Prof. Cecílio Lins Pimentel, PhD.
Coordenador do Programa de
Pós-graduação em Engenharia Elétrica

Banca Examinadora:

Prof. Eduardo Fontana, PhD.
Orientador
Universidade Federal de Pernambuco

Prof. Marcelo Sampaio de Alencar, PhD
Universidade Federal de Campina Grande

Prof. Frederico Dias Nunes , PhD.
Universidade Federal de Pernambuco

30 de Agosto de 2013

Dedico este trabalho em memória a
Francisco Pedro de Melo ... "pai, você foi meu herói"
Francisca Ferreira de Melo ... "mãe, você foi mãe até o final".

AGRADECIMENTOS

Agradeço a todos que direta ou indiretamente, ao longo destes cinco anos, ajudaram a manter-me erguido para que eu pudesse caminhar e chegar ao final deste projeto. Se nomeasse a todos, parentes, amigos, suporte administrativo e professores, não caberia nesta página.

Mas, em especial agradeço ao professor Dr. Eduardo Fontana, que acreditou no meu trabalho e que foi mais que um orientador ... um amigo. Ao meu querido amigo e irmão Richard Douglas Costa que caminha comigo desde o início deste projeto e a minha amada esposa Solange Monteiro de Souza, um presente de Deus na minha vida.

ERNANDE FERREIRA DE MELO

Universidade Federal de Pernambuco

30 de Agosto de 2013

*Quem, de três milênios, não é capaz de se
dar conta, vive na ignorância , na sombra,
à mercê dos dias, do tempo.*

— Johann Goethe

Resumo da Tese apresentada à UFPE como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Doutor em Engenharia Elétrica

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

Ernande Ferreira de Melo

Agosto/2013

Orientador: Prof. Eduardo Fontana, PhD.

Área de Concentração: Fotônica

Palavras-chaves: Sensor Ótico, Ressonância de Plásmons de Superfície (RPS), Grade de Difração, Otimização, Incidência Normal, Otimização.

Número de páginas: 81

Nesta Tese é apresentada uma formulação para a análise das propriedades ópticas de estruturas multicamadas com interfaces de perfil periódico e o emprego desta formulação no desenvolvimento de metodologia e algoritmos para projeto de sensores de máxima sensibilidade, baseados no efeito de Ressonância de Plásmons de Superfície (RPS) em grades metálicas. Os resultados desse desenvolvimento têm as seguintes aplicações: Excitação de plásmons de superfície com incidência normal externa, para o desenvolvimento de substratos descartáveis e sistemas de leitura óptica mais simples para aplicações em biossensores ópticos; Excitação de plásmons de superfície com incidência normal interna para o desenvolvimento de sensores RPS em fibras ópticas; Desenvolvimento de software aplicativo para projeto de grades metálicas otimizadas; Definição das condições de operação otimizadas para uso do efeito de RPS em dispositivos de leitura óptica, como CDs e DVDs em aplicações de sensoriamento óptico em larga escala e a baixo custo.

Abstract of Thesis presented to UFPE as a partial fulfillment of the requirements for the degree of
Doctor in Electrical Engineering

**OPTIMIZATION OF OPTICAL SENSORS FOR
SURFACE PLASMON RESONANCE IN METALLIZED
DIFFRACTION GRATING**

Ernande Ferreira de Melo

August/2013

Supervisor: Prof. Eduardo Fontana, PhD.

Area of Concentration: Photonics

Keywords: Optical sensor, Surface Plasmons Resonance, Diffraction Grating, Optimization, Normal Incidence, Optimization.

Number of pages: 81

This thesis present a formulation for the analyzing the optical properties of multilayer structures with a periodic profile interfaces and the use of this formulation in the development of methods and algorithms to the sensors design of maximum sensibility based on the effect of surface plasmon resonance (SPR) in metal gratings. The results of this development are the following applications:Excitation of surface plásmons, from external normal incidence to the development of disposable substrates and optical reading systems easier for applications in optical biosensors;Excitation of surface plásmons, from internal normal incidence to the development of SPR optical fiber sensors;Development of application software to design metal gratings optimized;Definition of the optimized conditions operating for use of SPR effect in optical devices such as CDs and DVDs in optical sensing applications in large scale and at low cost.

LISTA DE FIGURAS

2.1	Esquema de um sensor RPS.	16
2.2	Configuração de prisma de acoplamento proposta por Andreas Otto	18
2.3	Configuração de prisma de acoplamento proposta por Kretschmann	20
2.4	Ilustração do processo de geração de ordens de difração em uma grade metálica de periodicidade Λ , amplitude h e espessura d	21
2.5	Números de artigos publicados anualmente, no intervalo de 1960 a 2008, cujos títulos contêm as palavras “surface plasmon”.	22
2.6	Representação esquemática de um biossensor baseado em RPS.	23
2.7	Configuração de sensor SPR em fibra ótica similar ao proposto por Jorgenson e Yee.	24
2.8	Decomposição espectral em sensor SPR baseado em fibra ótica com um núcleo de índice de refração 1.5 e 1.33 para o meio sob teste, ângulo de incidência 65 graus e metal ouro (Au).	25
2.9	Representação esquemática, adaptada, do sistema de excitação do biossensor BIND® da empresa SRU Biosystems.	25
3.1	Figura 3.1 Esquema para uma grade com uma interface dielétrico/metal tendo um perfil de forma arbitrária $s(x)$ com periodicidade Λ	28
3.2	Análise Comparativa do modelo desenvolvido com os métodos RCWA e Integral: profundidade $50nm$	35
3.3	Análise Comparativa do modelo desenvolvido com os métodos RCWA e Integral: profundidade $25nm$	36
4.1	Curva de RPS e parâmetros representativos na aproximação lorentziana.	38
4.2	Aproximação lorentzian em termos da meia largura à meia altura em função do comprimento de onda	39
4.3	Configuração de interface simples paea grade senoidal	40
4.4	Comparativo entre curvas de reflectância com e sem otimização	43
4.5	Variação da Sensibilidade dR/dn com o comprimento de onda em grades otimizadas	44
4.6	Seleção de parâmetros ótimos para grade com uma interface senoidal, em função do comprimento de onda	45
5.1	Curvas experimental e teórica para reflectância em CDs, obtidas por Fontana2004	47
5.2	Representação esquemática da geometria do CD-R de acordo com o fabricante	47

5.3	Modelo de grade poligonal proposto para estudo do problema do CD	48
5.4	Comparativo entre curva teórica, estratégia 1, e experimental	49
5.5	Comparativo entre curva teórica, estratégia 2, e experimental	50
5.6	Convergência da curva para L variando de 10 a 50	51
5.7	Geometria da grade poligonal aproximada por série de Fourier	51
6.1	Interface inicial do Sistema Gerador de Grades de Difração Otimizadas - SGGDO . .	56
6.2	SGGDO: Opções de geração de grades senoidais.	57
6.3	SGGDO: Exemplo curva de reflectância otimizada com declividade nula em $\theta_{max} = 0$	58
6.4	SGGDO: Configurações propostas para RPS com incidência normal	59
6.5	SGGDO: variação na reflectância em incidência normal: (a) gasos , (b) aquoso, para um comprimento de onda de $1\mu m$	60
6.6	SGGDO: variação na reflectância em incidência normal, para uma variação incremental no índice de refração do meio sob teste: (a) gasos 10^{-4} e (b) aquoso, para um comprimento de onda de $1.3\mu m$	61
6.7	SGGDO: Dependências espectrais (a) dos parâmetros ótimos e (b) sensibilidade em grade de ouro para aplicações em meios gasosos.	61
6.8	SGGDO: Dependências espectrais dos parâmetros ótimos (a) periodicidade e amplitude e, (b) sensibilidade, em grade de ouro para aplicações em meios aquoso.	62
6.9	SGGDO: resultado típico para configuração de duas interfaces senoidal e plana. Pequena faixa dinâmica mas sensibilidade explorável.	63
6.10	SGGDO: Escolha de parâmetros ótimos (a) periodicidade e amplitude e (b) espessura e sensibilidade.	64

LISTA DE TABELAS

3.1	Parâmetros utilizados na análise comparativa dos modelos	35
4.1	Parâmetros utilizados na aproximação lorentzian	39
4.2	Parâmetros utilizados na aproximação lorentzian	39
4.3	Parâmetros utilizados na comparação entre as curvas com e sem otimização	43
5.1	Parâmetros para obtenção da curva de reflectância mais próxima à curva experimental no modelo de grade poligonal	49
6.1	Parâmetros de entrada e saída referentes às curvas geradas e mostradas nas Figuras 6.5 e 6.6	60

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	13
2	RESSONÂNCIA DE PLÁSMONS DE SUPERFÍCIE E APLICAÇÕES	15
2.1	Fundamentos sobre Ressonância de Plásmons de Superfície	15
2.2	Técnicas de excitação de Plásmons de Superfície	17
2.2.1	Técnicas de excitação por prisma	18
2.2.2	Técnicas de excitação por grade metálica	20
2.3	Aplicações de Sensores Ópticos baseados em RPS	22
2.3.1	Sensores baseados na configuração de Kretschmann	22
2.3.2	Sensores em fibra óptica	23
2.3.3	Sensores em grade de difração	24
2.4	Resumo do capítulo	25
3	MODELAGEM DE GRADES DE DIFRAÇÃO COM MÚLTIPLAS INTERFACES PERIÓDICAS	27
3.1	Modelagem de RPS em Grade de Difração	27
3.2	Reflexão e Transmissão em uma interface	29
3.3	Solução com truncamento para o Sistema de Equações	34
4	METODOLOGIA DE OTIMIZAÇÃO DE GRADES METÁLICAS PARA SENSORES RPS	37
4.1	Otimização na Configuração de Kretschmann	37
4.2	Otimização em Grades Metálicas	40
4.2.1	Curva de reflectância em interface senoidal simples	40
4.2.2	Determinação da periodicidade da grade ótima	41
4.2.3	Determinação da amplitude ótima	42
4.2.4	Medida da Sensibilidade	42
4.3	Avaliação do processo de otimização	42
5	GRADES POLIGONAIS	46
5.1	Modelagem de estrutura de CD como grade de geometria senoidal	46
5.2	Modelagem de estrutura de CD como grade poligonal	46
5.3	Resultados da implementação do modelo	49
5.4	Análise dos Resultados	50

5.5	Determinação do comprimento de onda ótimo para o CD	51
5.6	Resumo do capítulo	52
6	PROPOSTAS DE SENSORES OTIMIZADOS BASEADOS EM RPS COM INCIDÊNCIA NORMAL GERADAS POR SOFTWARE	53
6.1	Software Aplicativo	53
6.1.1	Geração de curva de reflectância	54
6.1.2	Geração de grades otimizadas	54
6.1.3	Implementação	55
6.2	Propostas de Sensores baseados em RPS com Incidência Normal	56
6.2.1	RPS sob incidência normal	57
6.2.2	Possíveis configurações	58
6.2.3	Desempenho do efeito RPS em filmes de ouro para incidência normal: cenário 6.4(a)	59
6.2.4	Desempenho do efeito de RPS em filmes de ouro para incidência normal: Cenário 6.4(b)	62
6.3	Resumo do capítulo	64
7	SUMÁRIO DAS CONTRIBUIÇÕES DA TESE	65
	Apêndice A PUBLICAÇÕES	66
	A.1 APÊNDICE III - CÁLCULO DA GRADE POLIGONAL	76
	REFERÊNCIAS	78

CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO

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

O efeito de RPS pode ser observado em uma interface metal-dielétrico com o emprego de um prisma de acoplamento [17–19], para o caso de uma interface planar, ou em superfícies não planares, como por exemplo, em grades de difração metálicas [19]. Sensores RPS baseados em acoplamento por prisma, na configuração de Kretschmann [18; 19], são utilizados na prática.

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

Por outro lado, determinar parâmetros estruturais de grades metálicas - periodicidade, amplitude e espessura - em um dado comprimento de onda, que permitam o desenvolvimento de sensores RPS com máxima sensibilidade, é um problema de otimização, para o qual não há estudos na literatura.

A solução desse problema é uma das propostas desta Tese de Doutorado.

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

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

Investiga-se, também, neste trabalho, os resultados experimentais obtidos na literatura para a excitação de plásmons de superfície em grades naturais presentes em CDs e DVDs comerciais [21]. Uma vez que essas estruturas são de baixo custo e possuem grande área de superfície o que poderia permitir a multiplicação de milhares de sensores em um único substrato. Neste contexto, uma questão importante a ser investigada nesta Tese é a determinação do comprimento de onda de operação em uma dada estrutura comercial, de CD e DVD, para obtenção do efeito de RPS com máxima sensibilidade.

Também é proposto o desenvolvimento de uma aplicação com acesso via Internet, para a geração de grades metálicas otimizadas para sensores RPS, como produto resultante do desenvolvimento deste trabalho.

O desenvolvimento desta Tese inicia-se no Capítulo 2 com a apresentação dos fundamentos sobre RPS e suas aplicações e a relação desta Tese com o estágio atual de desenvolvimento da área. Em seguida, no Capítulo 3 descreve-se o desenvolvimento de um modelo matricial para geração de curvas de reflectância RPS para grades de difração em estruturas de múltiplas camadas separadas por interfaces periódicas com perfil arbitrário. No Capítulo 4 é descrito o processo de otimização de grades de difração metálicas através da maximização da sensibilidade da curva de reflectância RPS, para aplicações em sensores ópticos, com base em Fontana [20]. No Capítulo 5 é feita uma abordagem sobre grades poligonais, onde é feita a aplicação de uma outra modelagem para o problema do CD-R, iniciado em Fontana2004 [21]. No Capítulo 6 é apresentado um software aplicativo, resultante do agrupamento de todos os procedimentos desenvolvidos neste trabalho. Tal software é aplicado para a geração de novas grades otimizadas para o projeto de sensores RPS com grades com incidência normal, para aplicações diversas e, mais especificamente em fibras ópticas. No Capítulo 7 são discutidas as implicações das contribuições desta Tese e propostas de trabalhos futuros.

CAPÍTULO 2

RESSONÂNCIA DE PLÁSMONS DE SUPERFÍCIE E APLICAÇÕES

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

2.1 Fundamentos sobre Ressonância de Plásmons de Superfície

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

Uma condição de ressonância ocorre quando luz polarizada no plano de incidência ilumina a interface em um ângulo tal que a componente do vetor de onda na direção paralela ao plano da interface iguala aquele do plásmon de superfície, que é uma oscilação de elétrons livres localizada na superfície do metal. Essa oscilação se propaga ao longo da interface permanecendo a ela confinada.

Dessa forma, parte da energia do feixe de luz incidente é subtraída parcial ou totalmente pelo plásmon de superfície [1–3].

A Figura 2.1 mostra a representação esquemática do sensor RPS com os principais elementos do sistema: as interfaces dielétric/metal e metal/dielétrico do meio sensoriado, o feixe de luz incidente e refletido, o fotodetector que converte a intensidade de luz em corrente elétrica e a curva de refletância em torno do ângulo do modo ressonante.

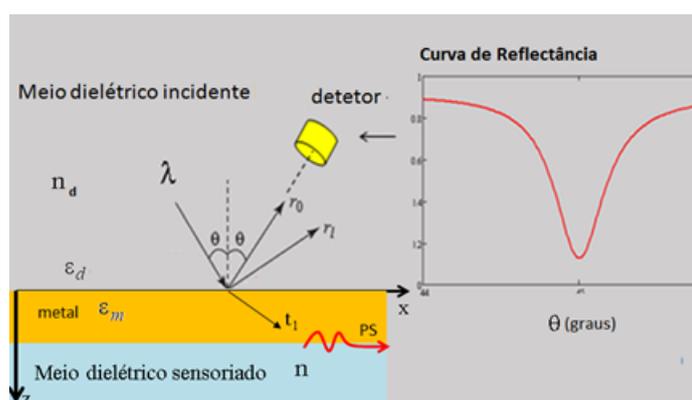


Figura 2.1: Esquema de um sensor RPS.

O fenômeno de RPS ocorre mediante as seguintes condições:

(i) Um dos meios deve ser metálico: os metais exibem, na faixa de comprimentos de onda maiores do que o comprimento de onda de plasma, uma permissividade complexa, cuja parte real é negativa, que é uma condição necessária para a existência de PS [2; 3];

(ii) Para uma interface metal-dielétrico, com ambos considerados semi-infinitos, a constante de propagação do *PS* é dada por

$$K_{PS} = k_0 \sqrt{\frac{\varepsilon_m \varepsilon_d}{\varepsilon_m + \varepsilon_d}} \quad (2.1)$$

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

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

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

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

$$\varepsilon_d Re(\varepsilon_m) < 0, \quad (2.3)$$

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

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

$$k_x = Re(K_{PS}) \quad (2.5)$$

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

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

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

2.2 Técnicas de excitação de Plásmons de Superfície

Técnicas de excitação de PS por prisma de acoplamento e por grade metálica são comumente utilizadas na construção de sensores ópticos RPS. Essas técnicas são descritas a seguir.

2.2.1 Técnicas de excitação por prisma

A primeira técnica controlada de excitação de *PS* foi proposta por Andreas Otto em 1968, também denominada de configuração de Otto [17; 19]. Nessa configuração, ilustrada na Figura 2.2, a onda incidente vinda do espaço livre, com polarização no plano de incidência — polarização TM — atravessa o prisma de vidro com índice de refração n_p , penetrando no meio dielétrico de permissividade relativa ϵ_d e incidindo na interface metálica de permissividade relativa ϵ_m .

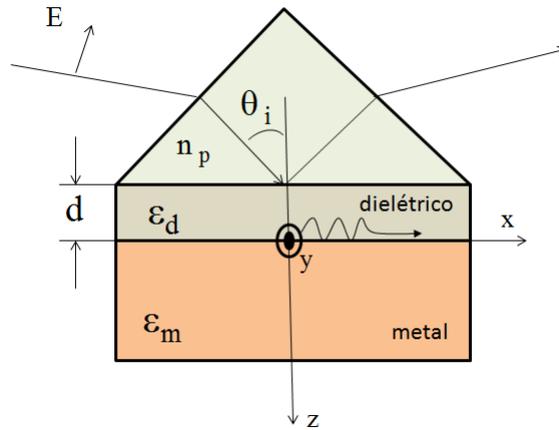


Figura 2.2: Configuração de prisma de acoplamento proposta por Andreas Otto

Para

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

e na faixa de ângulos de incidência satisfazendo a condição

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

em que θ_c representa o ângulo crítico de reflexão interna total [2; 3], uma onda evanescente é produzida no meio dielétrico. O prisma, portanto, é utilizado para aumentar o número de onda do campo incidente, que no exterior do prisma vale k_0 , para

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

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

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

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

$$\text{sen}(\theta_{SP}) = \frac{1}{n_p} \sqrt{\frac{|Re(\varepsilon_m)|\varepsilon_d}{|Re(\varepsilon_m)| - \varepsilon_d}} \quad (2.11)$$

com θ_{SP} representando o ângulo de incidência na condição de acoplamento ressonante com o PS. É importante notar que a oscilação será observada desde que o termo à direita de 2.11 seja menor do que 1, ou seja, escolhendo um prisma com índice de refração

$$n_p > \sqrt{\frac{|Re(\varepsilon_m)|\varepsilon_d}{|Re(\varepsilon_m)| - \varepsilon_d}} \quad (2.12)$$

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

$$R(\theta_i) = \frac{r_{12} + r_{23} \exp(-j2k_{z2}d)}{1 + r_{12}r_{23} \exp(-j2k_{z2}d)} \quad (2.13)$$

em que r_{uv} é o coeficiente de reflexão de Fresnel [22] associado à interface entre os meios u e v , com $u = 1$ representando o prisma, $u = 2$ o dielétrico e $u = 3$, o metal. O parâmetro k_{z2} que aparece em 2.13 é a componente z do vetor de onda no meio dielétrico de espessura d . A dependência no ângulo de incidência está implícita nos parâmetros r_{uv} e k_{z2} .

A configuração de Otto requer um delicado ajuste da espessura do dielétrico, que muitas vezes é simplesmente um espaço vazio de separação entre o prisma e o metal. Valores típicos de espessura

do dielétrico, para $\varepsilon_d = 1$ são da ordem do comprimento de onda da fonte de excitação. Dada essa dificuldade de controle da separação entre prisma e metal, a configuração de Otto não é muito utilizada na prática para o desenvolvimento de sensores.

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

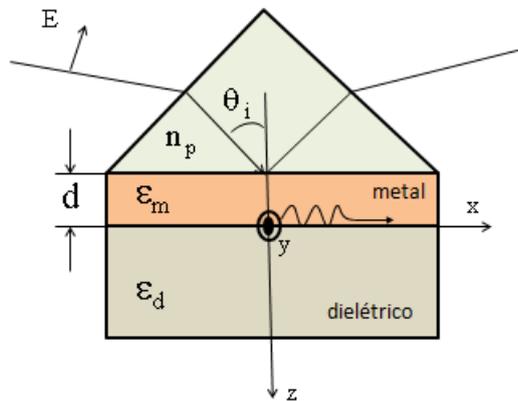


Figura 2.3: Configuração de prisma de acoplamento proposta por Kretschmann

2.2.2 Técnicas de excitação por grade metálica

A Figura 2.4 mostra uma representação esquemática do método de excitação de PS em uma grade metálica, com seus principais componentes. A grade ilustrada na Figura 2.4 tem perfil senoidal de periodicidade Λ , amplitude h e espessura d . Devido à periodicidade da interface, a luz incidente interage com a superfície gerando um conjunto discreto de ordens de difração

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

com

$$k_x = n_d k_0 \text{sen}(\theta) \quad (2.15)$$

e

$$k_g = \frac{2\pi}{\Lambda} \quad (2.16)$$

representando o número de onda da grade. Em 2.15, n_d é o índice de refração do meio dielétrico mostrado na Figura 2.4. Na configuração da Figura 2.4 é possível obter acoplamento com *PS* para uma dada ordem de difração, uma vez que a componente x do vetor de onda da m -ésima ordem não é mais igual àquele do campo incidente, como seria no caso de uma interface planar. Para obter a condição de ressonância, utiliza-se 2.14 e 2.15 e a condição 2.5 com o auxílio de 2.1 e assumindo o regime de pequenas perdas, o que fornece

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

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

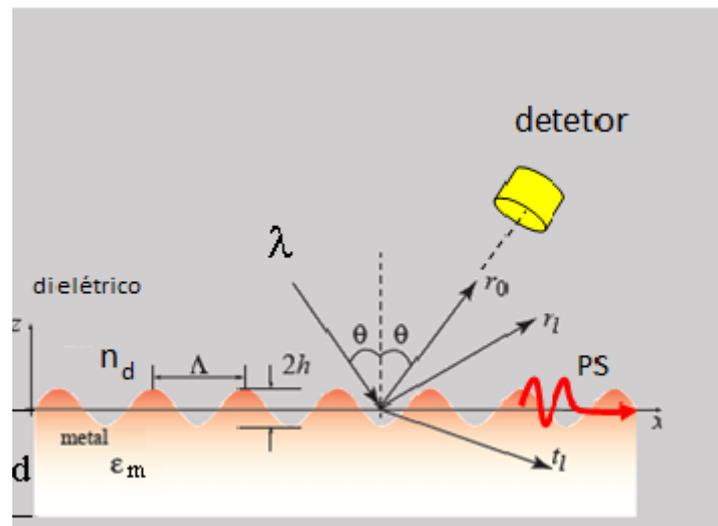


Figura 2.4: Ilustração do processo de geração de ordens de difração em uma grade metálica de periodicidade Λ , amplitude h e espessura d

2.3 Aplicações de Sensores Ópticos baseados em RPS

O gráfico da Figura 2.5 mostrar o número anual de artigos publicados no período de 1960 a 2008, cujos títulos contêm as palavras “surface plasmon” [24]. Este gráfico reflete o crescimento do interesse pela área de sensores RPS, nas últimas cinco décadas.

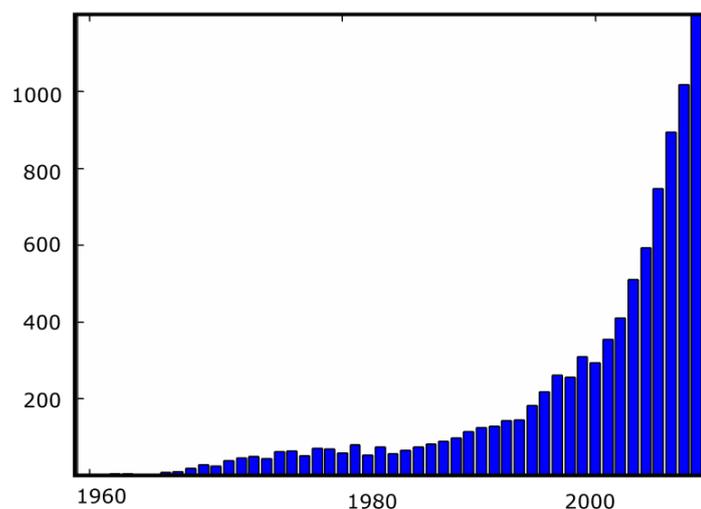


Figura 2.5: *Números de artigos publicados anualmente, no intervalo de 1960 a 2008, cujos títulos contêm as palavras “surface plasmon”.*

O interesse pela área de sensores ópticos RPS possibilitou o desenvolvimento de aplicações em diversas áreas que vão desde sensores químicos e biossensores com aplicações em estudos biológicos, pesquisas em ciências da saúde, na descoberta de drogas, no diagnóstico médico e no monitoramento ambiental [4–7], em redes ópticas com dispositivos de chaveamento ópticos [8; 9] e em dispositivos a fibra óptica [10–15], entre outras aplicações [16].

2.3.1 Sensores baseados na configuração de Kretschmann

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

A Figura 2.6 mostra a representação esquemática de um biossensor RPS típico [25]. Na figura

são identificados os elementos da configuração de Kretschmann, tais como as interfaces prisma/metalo e metal/meio sensoriado. O índice de refração do meio sensoriado é alterado pelo fluxo e interação das biomoléculas que atravessam o canal. A variação temporal do índice de refração e o deslocamento angular produzido são mostrados nos gráficos que compõem o cenário da Figura 2.6.

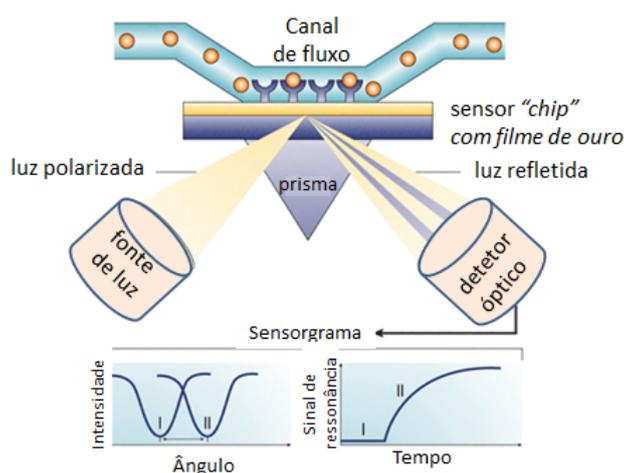


Figura 2.6: Representação esquemática de um biossensor baseado em RPS.

Sistemas biossensores RPS comercialmente disponíveis, como o Biacore 3000 SPR da General Electric, utilizam configurações de Kretschmann, similares ao mostrado na Figura 2.6. O Biacore 3000 utiliza múltiplos canais e trabalha com um meio sensoriado aquoso, com faixa de variação do índice de refração no intervalo de 1.33 a 1.4 e vazão menor que $100\mu\text{l}/\text{min}$, no canal de fluxo.

2.3.2 Sensores em fibra óptica

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

Em relação a sensores em fibra óptica baseada em RPS, diversas configurações têm sido testadas na literatura, incluindo remoção da casca da fibra e metalização do núcleo [10; 11], para o caso de fibras multimodo, fabricação de micropismas metalizados em pontas de fibras monomodo [12–14] ou o emprego de grades de Bragg inscritas no núcleo da fibra monomodo para permitir o acoplamento de modos vazados com plásmos de superfície em um filme metálico depositado diretamente na casca

da fibra [15].

Nessas configurações, a fibra é especialmente adaptada de forma a permitir que o feixe de luz atinja a superfície metálica com uma faixa angular que inclua o ângulo de ressonância no metal.

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

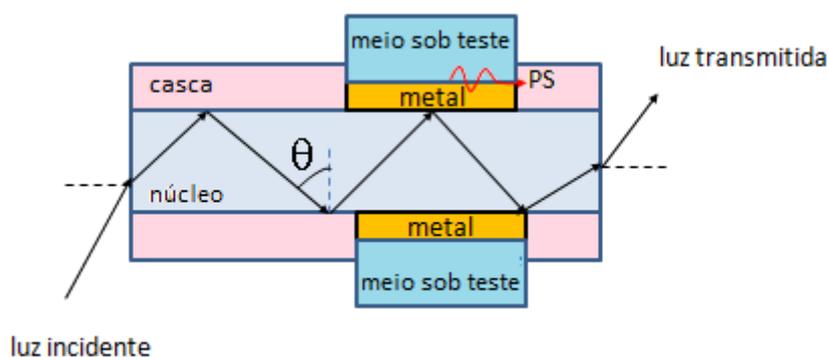


Figura 2.7: Configuração de sensor SPR em fibra óptica similar ao proposto por Jorgenson e Yee.

A seletividade de comprimento de onda ocorre em fibras multimodo, nas quais o espectro de luz incidente, sobre o sensor, é decomposto, tal que cada comprimento de onda de luz que compõe o espectro, excita o PS em um modo específico, conforme equações 2.9 e 2.11, resultando no deslocamento do ponto de ressonância da curva de reflectância. A Figura 2.8 mostra a decomposição do espectro de comprimento de onda para um núcleo de índice de refração 1.5 e de 1.33 para o meio sob teste, ângulo de incidência de 65 graus e filme metálico de ouro (Au).

2.3.3 Sensores em grade de difração

Embora sejam encontrados muitos trabalhos de pesquisas em sensores ópticos RPS com grade de difração, encontramos apenas uma referência de aplicação comercial desta técnica de excitação, a saber, o sistema biossensor BIND® da empresa SRU Biosystems [26]. A Figura 2.9 mostra uma representação esquemática adaptada do sistema de excitação, que utiliza uma grade de difração com interface metal/substrato composta por duas camadas, sendo uma planar (Cobertura) e outra poligo-

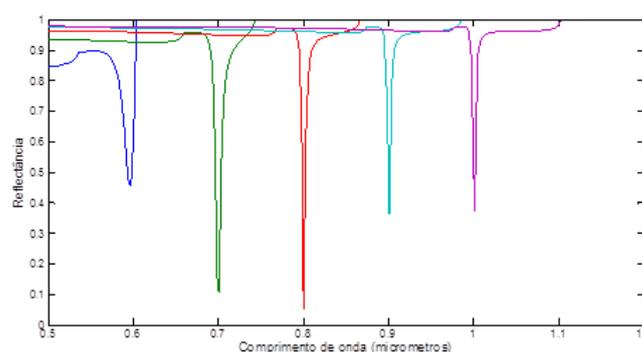


Figura 2.8: Decomposição espectral em sensor SPR baseado em fibra ótica com um núcleo de índice de refração 1.5 e 1.33 para o meio sob teste, ângulo de incidência 65 graus e metal ouro (Au).

nal binária. A modulação é feita por seleção de comprimento de onda.

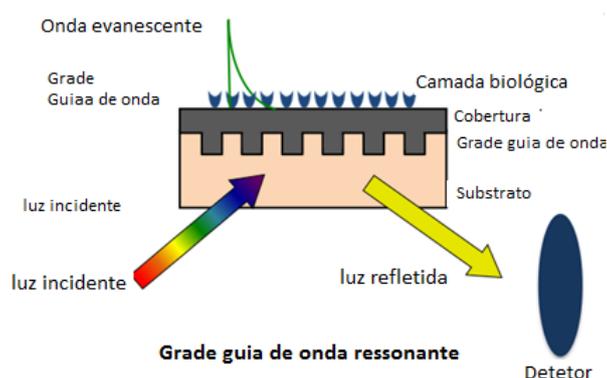


Figura 2.9: Representação esquemática, adaptada, do sistema de excitação do biossensor BIND® da empresa SRU Biosystems.

2.4 Resumo do capítulo

Neste capítulo foi mostrado que o princípio básico da Ressonância de Plásmons de Superfície é a excitação de um dos modos PS na interface metal/dielétrico através da incidência de luz polarizada em um dado ângulo e comprimento de onda e a consequente redução da intensidade da luz refletida cuja energia é subtraída para excitar o PS. Esta redução é identificada na Curva de Reflectância em torno do ângulo ressonância e percebida por um sistema de detecção.

As técnicas de excitação utilizam prisma de acoplamento e grades de difração, sendo o prisma de acoplamento na configuração de Kretschmann a técnica mais utilizada em sistemas baseados em

sensor RPS comerciais.

Um sensor RPS trabalha percebendo as variações no índice de refração que ocorrem no meio dielétrico sensoriado, devido à adição de substâncias reagentes ou variações de propriedades físicas tais como pressão, temperatura e volume, do meio sensoriado. Estas variações deslocam modo PS ressonante e conseqüentemente o ponto de ressonância na Curva de Reflectância. O sistema de detecção percebe o deslocamento do ponto, registra e relaciona as variações com o elemento que as produziram.

No próximo capítulo é mostrado o desenvolvimento de um modelo matemático para geração de Curvas de Reflectância para grades de difração com um número qualquer de interfaces. O modelo é aplicado em geometrias de interesse do desenvolvimento desta tese, a saber, geometrias senoidais e poligonais.

CAPÍTULO 3

MODELAGEM DE GRADES DE DIFRAÇÃO COM MÚLTIPLAS INTERFACES PERIÓDICAS

Neste capítulo descreve-se o desenvolvimento de um modelo para o cálculo e geração de curvas de reflectância baseado em RPS, para grades de difração, em estruturas de múltiplas camadas separadas por interfaces periódicas com perfil arbitrário.

O modelo é aplicado na geração de curvas de reflectância para grades com perfil senoidal e poligonal. Estas curvas serão otimizadas através de um conjunto de procedimentos desenvolvidos no capítulo 4, propiciando, assim, o projeto de grades otimizadas para sensores RPS, que é o foco central desta tese.

3.1 Modelagem de RPS em Grade de Difração

A modelagem de RPS em grade de difração é amplamente tratada na literatura. Métodos analíticos

A Figura 3.1 mostra um esquema para uma grade unidimensional com uma interface dielétrico/metal tendo um perfil de forma arbitrária $s(x)$ com periodicidade Λ . A figura também mostra os campos incidentes, refletidos e transmitidos, com polarização TM, na qual o campo elétrico está no plano de incidência e o magnético paralelo à superfície [3].

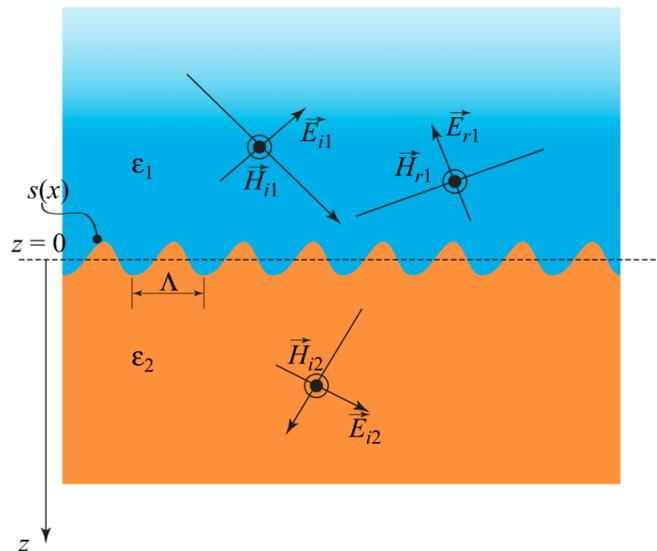


Figura 3.1: Esquema para uma grade com uma interface dielétrico/metal tendo um perfil de forma arbitrária $s(x)$ com periodicidade Λ

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

A abordagem desenvolvida neste trabalho utiliza um modelo simplificado através da aplicação da expansão de Rayleigh [27], tanto na região exterior quanto na interior. Na seção Este modelo se aplica bem a interfaces com geometria senoidal, como é mostrado na seção 3.3 e, embora não apresente bons resultados para geometrias poligonais, principalmente devido a problemas de convergência, alguns perfis poligonais podem ser descritos em termos de expansões senoidais com poucos termos, o que pode ser tratado como uma combinação de perfis senoidais [30].

Outro aspecto em relação à motivação para o desenvolvimento de um modelo é que, não há na literatura expressões disponíveis para o sistema de equações lineares que governa as amplitudes de campo para o caso de perfis periódicos arbitrários, conforme tratado no presente capítulo.

3.2 Reflexão e Transmissão em uma interface

Nesta seção apresenta-se o desenvolvimento do modelo para o cálculo dos coeficientes de reflexão e transmissão para uma interface com perfil arbitrário $s(x)$.

Assumindo uma grade unidimensional e a onda incidente plana com polarização TM, vinda de um meio dielétrico, como por exemplo do espaço livre, mostrado na Figura 3.1

Os campos incidentes são escrito na seguinte forma [21; 27]. A notação utilizada simplifica a descrição dos campos no domínio espacial, para ondas planas, em coordenadas cartesianas

$$\vec{E}_{i1} = \frac{Z}{\varepsilon_1 K_v} (p_{10}, 0, -k_{x0}) e^{-jk_0 x} e^{-jp_{10} z} \quad (3.1)$$

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

com o vetor de onda do campo incidente dado por

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

em que $Z = \sqrt{\frac{\mu_0}{\varepsilon_0}} = 120\pi\Omega$ é a impedância do espaço livre [2] e

$$K_v = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{\omega}{c} \quad (3.4)$$

é o número de onda no vácuo, ω a frequência angular e λ o comprimento de onda no espaço livre. Note que

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

e portanto,

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

Nessa notação, o subscrito 1 na variável p é usado para denotar o índice do meio e o subscrito zero em 3.1 e 3.3 denota a ordem zero de difração. Alternativamente uma notação matricial pode ser usada para os vetores de onda e os campos, assumindo que todos os vetores estejam representados em um sistema de coordenadas retangular. Assim, a forma matricial para 3.1 e 3.3 pode ser escrita como

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

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

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

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

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

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

$$\vec{E}_{r1} = \frac{Z}{\varepsilon_1 K_v} \sum_k r(k) (-p_1, 0, -k) e^{-jkx} e^{jp_1 z} \quad (3.11)$$

$$\vec{H}_{r1} = \sum_k r(k) (0, 1, 0) e^{-jkx} e^{jp_1 z} \quad (3.12)$$

Campos Transmitidos:

$$\vec{E}_{i2} = \frac{Z}{\varepsilon_2 K_v} \sum_k t(k) (p_2, 0, -k) e^{-jkx} e^{-jp_2 z} \quad (3.13)$$

$$\vec{H}_{i2} = \sum_k t(k) (0, 1, 0) e^{-jkx} e^{-jp_2 z} \quad (3.14)$$

em que

$$k^2 + p_1^2 = \varepsilon_1 K_v^2. \quad (3.15)$$

$$k^2 + p_2^2 = \varepsilon_2 K_v^2. \quad (3.16)$$

Assume-se que a interface metal-vácuo tenha um perfil de forma arbitrária $s(x)$ com periodicidade $\Lambda = 2\pi/K_g$. Para aplicar as condições de contorno, os campos, que em princípio são expansões válidas para as regiões externas $|z| > |h|$, em que h é a amplitude da função periódica $s(x)$, são assumidas também válidas na região $|z| < |h|$. Esta é a bem conhecida hipótese de Rayleigh [27] e

nessa condição uma solução que converge pode ser obtida para as amplitudes das ordens refletidas e refratadas. Então as condições de contorno podem ser escritas na forma

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

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

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

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

ou, equivalentemente

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

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

$$e^{-jk_0x} e^{-jp_{10}s(x)} + \sum_k r(k) e^{-jkx} e^{jp_1s(x)} = \sum_k t(k) e^{-jkx} e^{-jp_2s(x)}. \quad (3.21)$$

Fazendo a expansão em série de Fourier

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

com

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

e

$$e^{-jas(x)} = \sum_n C_n(a) e^{-jnK_g x}. \quad (3.24)$$

com

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

obtem-se

$$\begin{aligned}
e^{-jk_0x} \sum_m C_m(p_{10}) e^{-jmK_gx} + \sum_k r(k) e^{-jkx} \sum_n C_n(-p_1) e^{-jnK_gx} \\
= \sum_k t(k) e^{-jkx} \sum_n C_n(p_2) e^{-jnK_gx}
\end{aligned} \quad (3.26)$$

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

$$k \equiv k_l = k_0 + lK_g. \quad (3.27)$$

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

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

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

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

Aplicando as condições de contorno para o campo elétrico resulta em

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

que, após o cálculos dos produtos vetoriais, fornece

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

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

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

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

$$e^{-jas(x)} \frac{ds}{dx} = -jK_g \sum_n n C_n(a) e^{-jnK_g x}. \quad (3.32)$$

Combinando os resultados 3.31 e 3.32 resulta em

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

Usando as expansões 3.24 e 3.33 em 3.30 fornece

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\varepsilon_1} \sum_m \left(\frac{mk_0 K_g - p_{10}^2}{p_{10}} \right) C_m(p_{10}) e^{-jmK_g x} \\ &= \frac{1}{\varepsilon_2} \sum_{l,n} t(k_l) \left(\frac{nK_g k_l - p_{2l}^2}{p_{2l}} \right) C_n(p_{2l}) e^{-j(n+l)K_g x} \\ &+ \frac{1}{\varepsilon_1} \sum_{l,n} r(k_l) \left(\frac{nK_g k_l - p_{1l}^2}{p_{1l}} \right) C_n(-p_{1l}) e^{-j(n+l)K_g x} \end{aligned} \quad (3.34)$$

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

$$\begin{aligned} \frac{1}{\varepsilon_1} \left(\frac{mk_0 K_g - p_{10}^2}{p_{10}} \right) C_m(p_{10}) &= \frac{1}{\varepsilon_2} \sum_l t(k_l) \left(\frac{(m-l)K_g k_l - p_{2l}^2}{p_{2l}} \right) C_{m-l}(p_{2l}) \\ &+ \frac{1}{\varepsilon_1} \sum_l r(k_l) \left(\frac{(m-l)K_g k_l - p_{1l}^2}{p_{1l}} \right) C_{m-l}(-p_{1l}) \end{aligned} \quad (3.35)$$

Definindo a função

$$F_{ml}(j) = \frac{(m-l)K_g k_l - p_{jl}^2}{\varepsilon_j p_{jl}} \quad (3.36)$$

a expressão 3.35 pode ser reescrita na forma

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

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

$$\sum_l [t(k_l) C_{m-l}(p_{2l}) - r(k_l) C_{m-l}(-p_{1l})] = C_m(p_{10}) \quad (3.38)$$

$$\sum_l [F_{ml}(2)C_{m-l}(p_{2l})t(k_l) + F_{ml}(1)C_{m-l}(-p_{1l})r(k_l)] = F_{m0}(1)C_m(p_{10}), \quad (3.39)$$

$$C_m(a) = \frac{1}{\Lambda} \int_{-\Lambda/2}^{\Lambda/2} e^{j(mK_g x - as(x))} dx. \quad (3.40)$$

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

$$k_l^2 + p_{1l}^2 = \varepsilon_1 K_v^2$$

$$k_l^2 + p_{2l}^2 = \varepsilon_2 K_v^2$$

$$k_l = k_0 + lK_g$$

$$K_v = \frac{2\pi}{\lambda}$$

$$K_g = \frac{2\pi}{\Lambda}$$

em que λ é o comprimento de onda no espaço livre e Λ é o período da grade.

A determinação dos coeficientes de $r(k_l)$, e em particular os de ordem zero $r(k_0)$, no sistema de equações infinitas formado pelas equações 3.38 e 3.39 é necessária para a geração de curvas de reflectância (R), sendo $R = |r(k_l)|^2$. Na próxima seção é feita uma breve análise sobre uma solução finita para o sistema, através de truncamento do número de equações.

3.3 Solução com truncamento para o Sistema de Equações

Uma solução para o sistema infinito de Equações dado por 3.38 e 3.39 requer truncagem para um número finito de equações. Assumindo que o truncamento seja feito para um índice máximo L , obtém-se um sistema com $2(2L + 1) \times 2(2L + 1)$ equações.

O ponto de truncagem deve ser escolhido tal que os coeficientes de reflexão e transmissão converjam para um valor constante a partir de um dado valor de L . O valor de L está fortemente relacionado com o perfil da grade.

Testes mostraram que para um perfil senoidal, obtém-se uma rápida convergência para a curva de reflectância para $L=4$. Mas, para um perfil poligonal como, por exemplo, o trapezoidal, os experimentos, com o modelo desenvolvido não são conclusivos sobre convergência.

A Figura ?? mostra um comparativo deste modelo com os métodos RCWA e Integral para os parâmetros descritos na tabela 3.1. [6] Observa-se que o modelo, apesar da simplicidade, quando comparado aos outros modelos mais complexos, apresenta uma resposta muito próxima aos mesmos.

Tabela 3.1: Parâmetros utilizados na análise comparativa dos modelos

Parâmetro	Valor
Geometria da Grade	Senoidal
Período	$\Lambda = 455nm$
Profundidade	$h=25, 50nm$
Substrato	Ouro
Superstrato	Água
Ângulo de incidência	0 graus
Polarização	TM

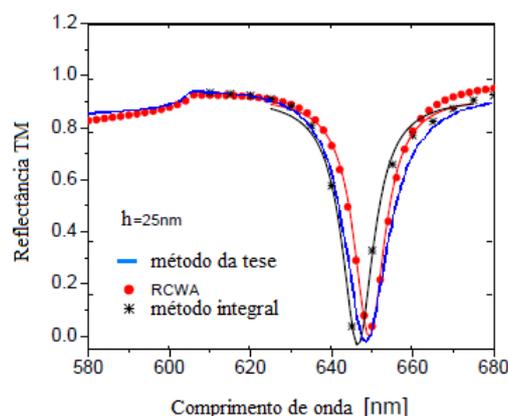


Figura 3.2: Análise Comparativa do modelo desenvolvido com os métodos RCWA e Integral: profundidade 50nm

O problema de convergência para a geometrias poligonais pode ser contornado, para alguns casos, no quais a função $s(x)$, que define a geometria da grade, possa ser descrita por uma aproximação senoidal.

O detalhamento da generalização do modelo para múltiplas interfaces é descrito no Apêndice 1, utilizando-se uma formulação matricial.

No próximo capítulo aplica-se um conjunto de procedimentos para otimizar as curvas de reflectâncias geradas pelo modelo desenvolvido neste capítulo, com base em Fontana [20].

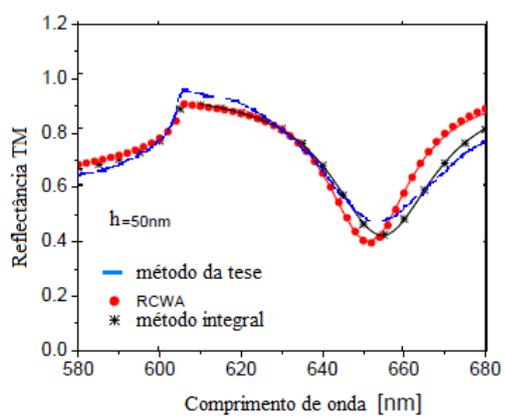


Figura 3.3: Análise Comparativa do modelo desenvolvido com os métodos RCWA e Integral: profundidade 25nm

CAPÍTULO 4

METODOLOGIA DE OTIMIZAÇÃO DE GRADES METÁLICAS PARA SENSORES RPS

EM problemas de otimização procura-se pelos valores extremos de uma função. O ponto central desta tese é a busca pela otimização da função que define a curva de reflectância sob o efeito de RPS em grades metálicas.

O Capítulo 3 descreve os sistemas de equações que governam as amplitudes dos campos e a reflectância, em grades com um número qualquer de interfaces. Neste capítulo propõe-se um procedimento de otimização, baseado nos parâmetros de desempenho obtidos para o caso de interfaces planares na configuração de Kretschmann, descritos em Fontana [20], aplicado para o caso de grades metálicas com máxima sensibilidade perante variações do índice de refração do meio externo. Os resultados desse estudo são portanto relevantes no projeto e construção de sensores baseados em RPS, configurados em grades metálicas.

4.1 Otimização na Configuração de Kretschmann

De acordo com Fontana [20] a curva de RPS é caracterizada pela reflectância mínima R_{min} , ângulo de ressonância θ_{PS} e meia largura à meia altura ω_{PS} , ilustrados na Figura 4.1.

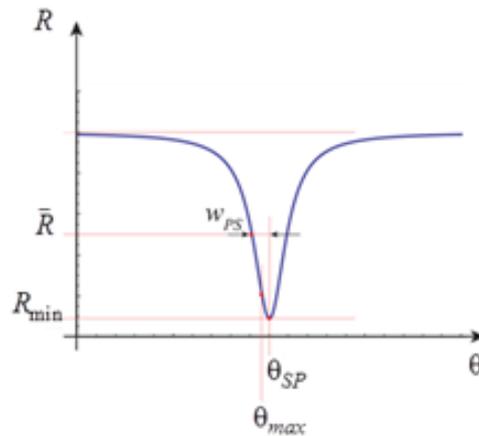


Figura 4.1: Curva de RPS e parâmetros representativos na aproximação lorentziana.

Fontana mostrou que na configuração de Kretschmann, na aproximação lorentziana, ou seja, no regime de pequenas perdas

$$\omega_{PS} \ll \theta_{PS} \quad (4.1)$$

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

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

com ω_{op} representando a meia largura à meia altura *HWHM*, da curva, obtida para uma espessura ótima do filme metálico. Nessas condições, ele demonstrou que a curva de RPS teria um valor de referência para a razão entre reflectâncias máxima e mínima, dado por

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

e o maior valor possível da declividade máxima dada por

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

Além disso, ele demonstrou que a curva de ressonância de maior sensibilidade seria aquela em que a constante de amortecimento da oscilação de plásmos de superfície por radiação seria metade daquela associada ao amortecimento por dissipação no metal.

A Figura ?? mostra uma avaliação qualitativa da aproximação lorentziana ou seja, no regime de pequenas perdas conforme 4.1, em função do comprimento de onda incidente. A tabela 4.1 descreve

os parâmetros utilizados na avaliação. Observa-se no gráfico que a aproximação lorentziana ocorre com o estreitamento da meia largura à meia altura, ou seja, a partir de comprimentos de onda em torno de 1μ . Observa-se também que o parâmetro R_{min}/R_{max} se aproxima do valor de referência ($1/9$) na região em torno de 1μ .

Tabela 4.1: Parâmetros utilizados na aproximação lorentzian

Parâmetro	Valor
Geometria da Grade	Planar (Configuração Kretschmann)
Comprimento de onda	$\lambda = [600a1100]nm$
No. de Interfaces	2
Superestrato	Vidro (n=1.5)
Metal	Ouro
Espessura do metal	60 nm
Substrato	Ar

Tabela 4.2: Parâmetros utilizados na aproximação lorentzian

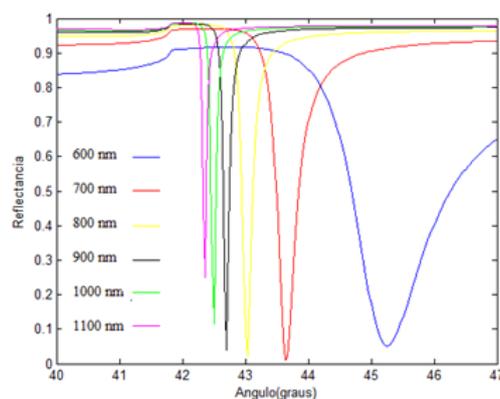


Figura 4.2: Aproximação lorentzian em termos da meia largura à meia altura em função do comprimento de onda

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

Na próxima seção, é descrita a aplicação dos parâmetros de otimização definidos por Fontana [20], na otimização da curva de reflectância do efeito RPS em grades metálicas. Os parâmetros da

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

4.2 Otimização em Grades Metálicas

Os parâmetros de otimização descritos na seção 4.1, embora tenham sido obtidos para uma configuração de Kretschmann, devem em princípio valer para qualquer curva de reflectância RPS, desde que seja preservada a condição de aproximação lorentziana. Essa condição independe do tipo de configuração usada para excitação de plásmons de superfícies.

Para o caso de uma interface simples de perfil periódico, separando dois meios semi-inifnitos, um dos quais metálico, o problema então é determinar a periodicidade Λ e amplitude h para um dado comprimento de onda e ângulo de incidência, definidos no projeto do dispositivo sensor.

Para o caso de duas interfaces periódicas de amplitudes distintas, definindo um filme metálico de espessura média d , tem-se mais dois parâmetros de otimização, e assim sucessivamente. No presente capítulo, descreve-se a metodologia de otimização para o caso de uma interface simples senoidal.

4.2.1 Curva de reflectância em interface senoidal simples

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

$$s(x) = h \operatorname{sen}\left(\frac{2\pi}{\Lambda}x\right) \quad (4.5)$$

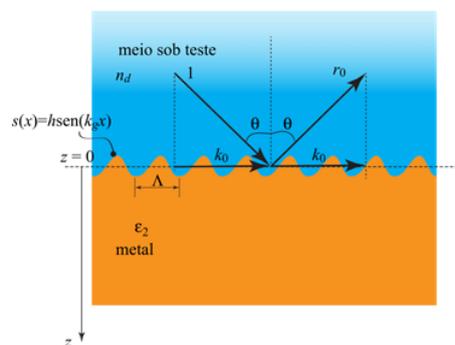


Figura 4.3: Configuração de interface simples paea grade senoidal

Nessa configuração o meio sob teste é considerado o meio de incidência de índice de refração n_d , assumido não-absorvedor. Na prática pode ser um meio gasoso ou aquoso contido em uma célula

de reação de material transparente (plástico ou vidro) de forma a permitir a penetração do feixe de luz. O ângulo de incidência é e a componente tangencial do número de onda do campo incidente é simplesmente

$$k_0 = n_d K_v \text{sen}(\theta). \quad (4.6)$$

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

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

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

$$R = f(L, \theta, \lambda, \Lambda, h, n_d, \varepsilon_2) \quad (4.8)$$

em que L é o índice de truncamento, definido no Capítulo 3.

O objetivo é determinar o valor de L que garanta convergência do sistema de equações para as amplitudes dos campos e sob essas condições os valores de Λ e h para obtenção de uma curva de reflectância de máxima sensibilidade perante variações do índice de refração n_d , para um dado metal, comprimento de onda e ângulo de incidência.

4.2.2 Determinação da periodicidade da grade ótima

Na Equação 4.6, dado um comprimento de onda λ , um ângulo de incidência θ_{max} , um metal com permissividade ε_2 e o meio sob teste com índice de refração n_d define-se os parâmetros Λ , h que proporcionem a geração de uma curva de reflectância que satisfaça os parâmetros de otimização, tal que o ângulo de incidência seja sintonizado no valor θ_{max} . Com a especificação de θ_{max} , o ângulo de ressonância θ_{PS} é estimado de 4.2 e 2.17, para o caso $m=1$, obtém-se a aproximação inicial para o período da grade

$$\Lambda = \frac{\lambda}{n_d} \left(\pm \sqrt{\frac{|Re(\varepsilon_m)|}{|Re(\varepsilon_m)| - n_d^2} - \text{sen}(\theta_{SP})} \right)^{-1} \quad (4.9)$$

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

utilizar o sinal positivo, *i.e.*,

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

A diferencial do ângulo de ressonância, como função da diferencial do período da grade é obtida de

$$cos(\theta_{SP})\Delta\theta_{SP} = \frac{\lambda}{n_d} \frac{1}{\lambda} \Delta\Lambda$$

o que fornece a correção desejada, *i.e.*,

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

4.2.3 Determinação da amplitude ótima

A estimativa para a amplitude da grade ótima é obtida por solução computacional do sistema de Equações

O valor de h é obtido a partir de um laço de iteração que inicia em um valor h_0 muito pequeno, que é incrementado. Em cada passo de iteração, isto é, para cada valor de h , a declividade máxima da reflectância em torno de θ_{max} , é calculada e comparada com a anterior, e o procedimento é repetido até que a o maior valor de declividade máxima seja obtido. Com isso obtem-se os valores ótimos de h para o caso de uma interface simples. Essa metodologia de otimização independe da geometria da grade.

4.2.4 Medida da Sensibilidade

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

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

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

4.3 Avaliação do processo de otimização

Nesta seção são apresentados alguns resultados do processo de otimização, através de simulações resultantes da implementação dos algoritmos apresentados na seção ??.

A Figura 4.4 mostra um comparativo entre as curvas de reflectâncias de duas grades senoidais de interface simples ar-ouro, sendo uma delas otimizada. Na Tabela 4.3 estão descritos os dados utilizados na comparação entre as curvas. A principal característica da curva otimizada é que a melhor posição do detetor não é no ponto de mínimo da curva e sim em θ_{max} que, no caso da curva otimizada do gráfico da Figura 4.4 é em torno de 19.5 graus.

Tabela 4.3: Parâmetros utilizados na comparação entre as curvas com e sem otimização

Grade	Periodicidade(nm)	Amplitude (nm)	Comp. Onda(nm)	Sens.(dR/dn)
não Otimizada	1000	25	700	137
Otimizada	1000	20	700	168

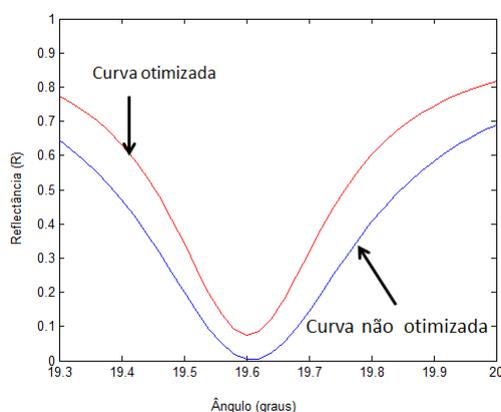


Figura 4.4: Comparativo entre curvas de reflectância com e sem otimização

A curva otimizada tem uma sensibilidade dR/dn de 168 unidades, contra 130 da curva não otimizada. Esta diferença tende a um crescimento significativo à medida em que o comprimento de onda se aproxima de $1\mu m$, devido à aproximação lorentzian, na qual está baseado o modelo, conforme visto no início deste capítulo, no gráfico da Figura 4.2.

O gráfico da Figura 4.5 mostra a variação da sensibilidade dR/dn com o comprimento de onda, em grades otimizadas, em incidência normal. O gráfico confirma a análise feita sobre o aumento da sensibilidade com o comprimento de onda. Este resultado motiva a aplicação de grades otimizadas na faixa de comprimento de onda usados em fibras ópticas, com incidência normal.

O gráfico da Figura 4.6 propicia a escolha dos parâmetros ótimos, período Λ e amplitude h em função do comprimento de onda λ , para grade com uma interface, com filme metálico de ouro, espesso (> 200 nm), com incidência normal. pelo meio sensoriado, no caso o ar.

!hbt]

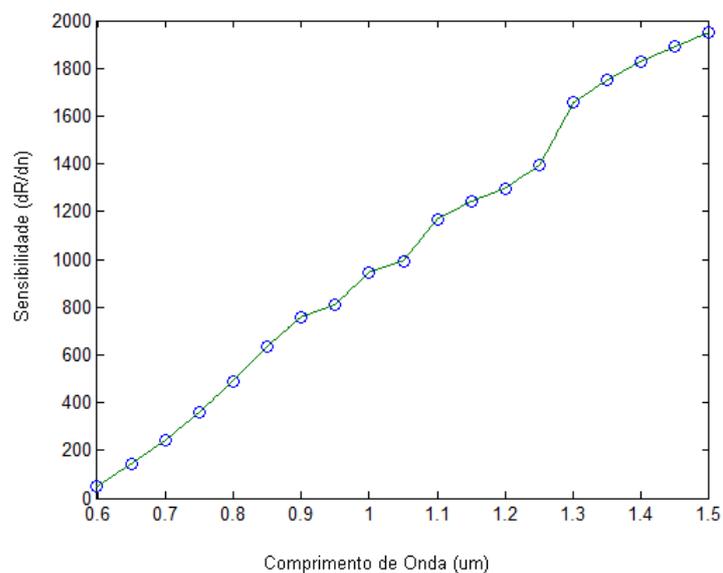


Figura 4.5: *Variação da Sensibilidade dR/dn com o comprimento de onda em grades otimizadas*

O conhecimento acumulado até este capítulo, é aplicado no próximo no capítulo na abordagem sobre modelagem de grades poligonais, necessária para a avaliação de CDs/DVDs no contexto de sua utilização como sensores RPS.

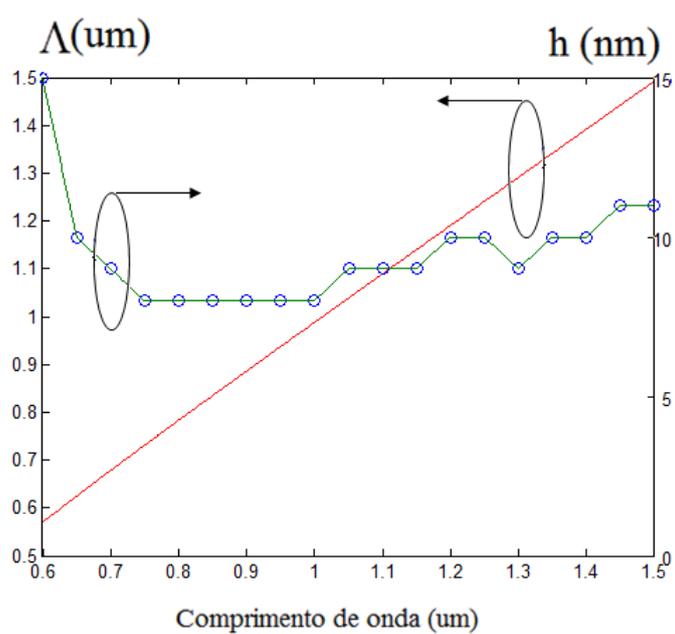


Figura 4.6: Seleção de parâmetros ótimos para grade com uma interface senoidal, em função do comprimento de onda

GRADES POLIGONAIS

O estudo sobre sensores RPS baseados em grades poligonais é relevante quando se pensa, por exemplo, em construção de sensores de baixo custo utilizando CDs e DVDs reutilizáveis, conforme já sugerido em trabalhos como [21; 31] ou em sistemas comerciais como o exemplo descrito na seção 2.3.3 do Capítulo ??.

Neste capítulo a abordagem sobre grades poligonais é feita a partir dos resultados obtidos por Fontana [21]. Em seguida é proposta uma modelagem do problema, baseado no modelo desenvolvido no Capítulo ??

5.1 Modelagem de estrutura de CD como grade de geometria senoidal

Um dos objetivos deste trabalho é investigar o problema de modelagem de um CD-R, a partir dos resultados obtidos por Fontana em [21]. No referido trabalho a estrutura do CD foi modelada como uma interface de grade senoidal. O resultado desta abordagem é mostrado no gráfico da Figura 5.1. Observa-se no gráfico da Figura, que a curva em linha contínua, gerada pelo modelo senoidal, não consegue capturar todos os pontos da curva experimental obtida para ordem zero de difração.

Na próxima seção é descrita a modelagem da grade com geometria poligonal.

5.2 Modelagem de estrutura de CD como grade poligonal

De acordo com o manual do fabricante, o CD, utilizado no experimento que gerou a curva experimental mostrada na Figura

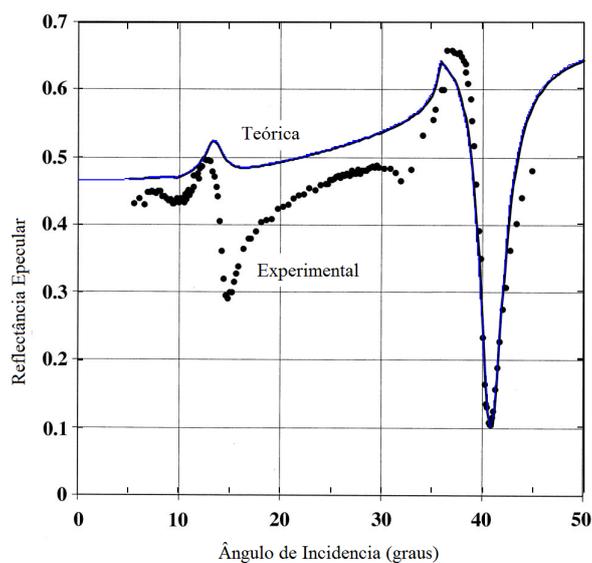


Figura 5.1: Curvas experimental e teórica para reflectância em CDs, obtidas por Fontana2004 . Reprodução autorizada

Em vista da estrutura da superfície do CD ser de perfil poligonal, investiga-se a possibilidade de melhorar a previsão teórica da medida experimental utilizando o modelo poligonal em substituição ao senoidal.

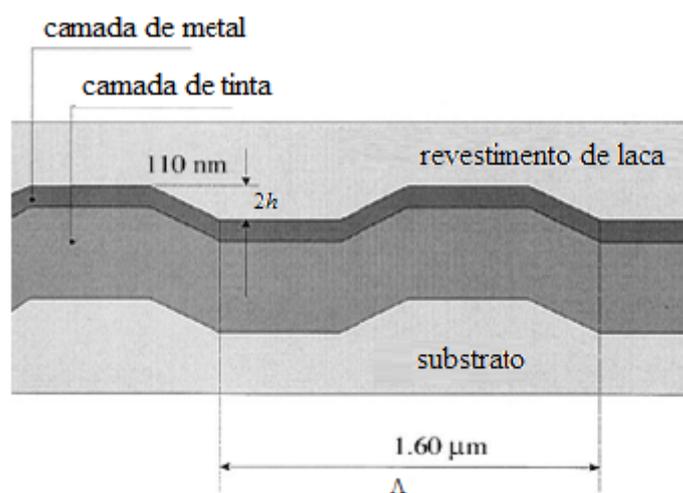


Figura 5.2: Representação esquemática da geometria do CD-R de acordo com o fabricante

Com base na Figura 5.2, a grade é modelada na forma ilustrada na Figura ??, em que $L1$, $L2$ e $L3$ são parâmetros ajustáveis, h é a altura e Λ é a periodicidade da grade. Não é considerada nesta

modelagem a camada de tinta, o revestimento de laca e nem o substrato. Por simplicidade o modelo considera apenas dois meios, um dielétrico, espaço livre, o outro o filme metálico espesso de ouro, com geometria poligonal definida pela função $s(x)$ definida na Equação

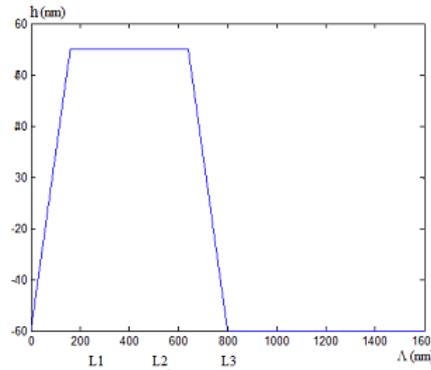


Figura 5.3: Modelo de grade poligonal proposto para estudo do problema do CD

A função $s(x)$ que descreve a geometria da grade poligonal é

$$s(x) = \begin{cases} \frac{h}{L1} & \text{se } 0 \leq x < L1; \\ h & \text{se } L1 \leq x < L2; \\ \frac{-h}{(L3 - L2)}x + \frac{hL3}{(L3 - L2)} & \text{se } L2 \leq x < L3; \\ 0 & \text{se } L3 \leq x \leq \Lambda. \end{cases}$$

Os coeficientes de transmissão e reflexão são obtidos substituindo

$$C_m = \frac{1}{\Lambda} \int_{-\Lambda/2}^{\Lambda/2} e^{j(mK_g x - as(x))} dx. \quad (5.2)$$

$$\sum_l [t(k_l)C_{m-l}(p_{2l}) - r(k_l)C_{m-l}(-p_{1l})] = C_m(p_{10}) \quad (5.3)$$

$$\sum_l [F_{ml}(2)C_{m-l}(p_{2l})t(k_l) + F_{ml}(1)C_{m-l}(-p_{1l})r(k_l)] = F_{m0}(1)C_m(p_{10}) \quad (5.4)$$

A solução completa do sistema está descrita no Apêndice 2 deste trabalho.

Na próxima seção são apresentados os resultados gerados em um ambiente de simulação desenvolvido a partir da implementação computacional, em Matlab® R2011a, do sistema formado pelas Equações (9) e (10) descritas no Apêndice 2.

5.3 Resultados da implementação do modelo

O objetivo da implementação do modelo descrito na seção ?? é obter uma curva de reflectância mais próximo possível da curva experimental obtida por Fontana [21]. A Tabela ?? mostra os conjuntos de parâmetros utilizados para a geração das curvas de reflectâncias teóricas em diversas estratégias para uma melhor aproximação à curva experimental.

Estas estratégias estão relacionadas à variações dos parâmetros da grade, periodicidade, altura e também da permissividade do metal. Além disso, outro parâmetro importante é o truncamento L, que implica diretamente na convergência da solução e da curva de reflectância, a qual será discutida no final deste capítulo. Os parâmetros L1, L2 e L3, foram determinados por sugestão descrita no manual do fabricante, a partir de uma relação entre as faces poligonais que compõem a geometria da grade e, mantidos em todas as estratégias, sendo: L1=400nm, L2=800, L3=1200.

Tabela 5.1: Parâmetros para obtenção da curva de reflectância mais próxima à curva experimental no modelo de grade poligonal

No	Periodo(nm)	Amplitude(nm)	Permissiv. metal	Comp. Onda(nm)	Truncagem(L)
1	1600	55	-10.78 -j0.77	632.8	50
2	1520	53	-8.23-j1.516	632.8	50

A estratégia No.1 utiliza os parâmetros experimentais, obtidos em Fontana [21] na segunda utiliza-se o conjunto de parâmetros teóricos do mesmo trabalho. Os gráficos das Figuras 5.4, e 5.5, mostram os resultados para cada estratégia.

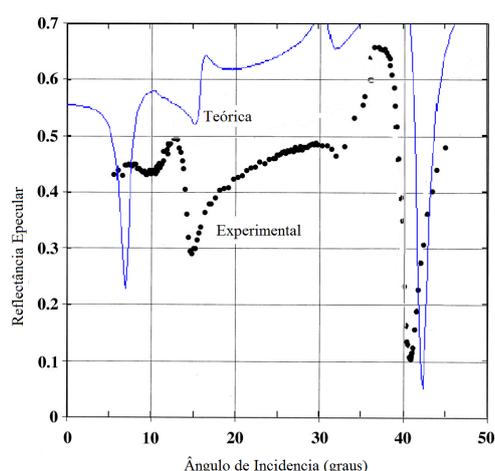


Figura 5.4: Comparativo entre curva teórica, estratégia 1, e experimental

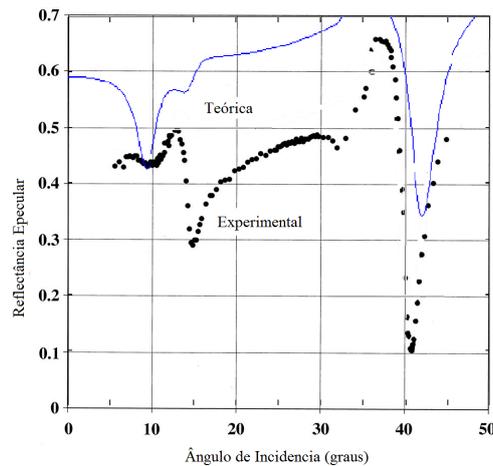


Figura 5.5: Comparativo entre curva teórica, estratégia 2, e experimental

5.4 Análise dos Resultados

Para a avaliação da melhor aproximação da curva experimental, considera-se aquela curva teórica que captura mais detalhes da curva experimental, mesmo que haja variação na amplitude. Neste sentido a melhor aproximação ocorre no gráfico da Figura

A diferença entre o modelo teórico e o experimental pode ser devido a uma ou combinação, das seguintes possibilidades:

(i) O modelo é baseado em interface simples, não considerando outros componentes já citados e portanto não reflete a estrutura real do CD.;

(ii) A solução baseada em expansão de Rayleigh não se aplica a grades com geometria poligonais devido a dificuldades na convergência. [30].

Observando o gráfico da Figura 5.5, observa-se que a curva, para os parâmetros da estratégia 01, assume uma forma e amplitude bem definida. Para este caso o valor de L foi variado de 10, onde a curva começa a assumir uma forma estável, até 50, que cuja curva em linha de cor preta contínua, Concluímos pela convergência da curva com turncagem em $L=50$. Portanto devmos ter um problema de modelagem física do CD.

Esta dúvida sobre o modelo e a convergência e aproximação da curva de reflectância à curva experimental, pode ser dirimida pela aplicação de modelos numéricos, conforme discutido no

$$s(x) = \frac{8h\sqrt{2}}{\pi^2} \left(\text{sen}(x) + \frac{1}{9}\text{sen}(3K_g x) - \frac{1}{25}\text{sen}(5K_g x) \right) \quad (5.5)$$

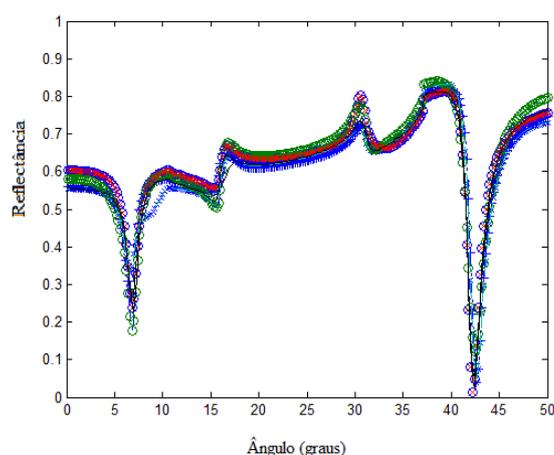


Figura 5.6: Convergência da curva para L variando de 10 a 50

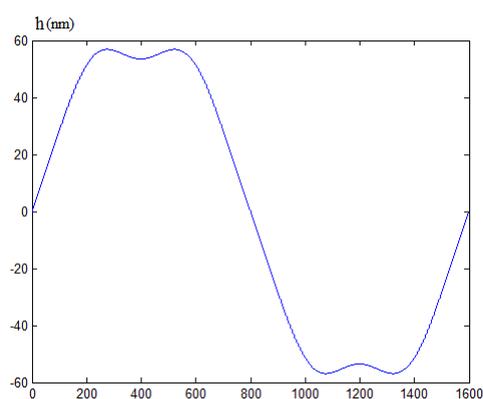


Figura 5.7: Geometria da grade poligonal aproximada por série de Fourier

Na próxima seção é descrita uma tentativa de encontrar o comprimento de onda ótimo para o CD, com os parâmetros encontrados nesta seção, admitindo-se a validade deste modelo decrito pelas Equações 5.2, 5.3 e 5.4.

5.5 Determinação do comprimento de onda ótimo para o CD

Considerando o aproveitamento de CDs e DVDs como grades para sensores RPS, é necessário definir em que comprimento de ondas obtem-se a máxima sensibilidade, por exemplo de uma CD cuja estutura, ou seja, geometria, periodicidade e altura, foi identificada com a metodologia descrita neste capítulo.

Outra questão relacionada é o fato de que o arranjo espacial dos CDs e DVDs favorece à incidência normal da luz. Neste contexto determina-se o comprimento de onda ótimo, para CDs e DVDs em incidência normal.

Para tal considera-se os parâmetros obtidos na seção 5.4, de modo que a grade usada para a determinação do comprimento de onda ótimo tem geometria poligona, com *periodicidade* = 1600nm, *amplitude* = 55nm e incidência normal.

Fazendo a variação do comprimento de onda, calculando a reflectância e medindo a sensibilidade dr/dn , determina-se a máxima sensibilidade .

No espectro de 600nm a 1500nm não foram encontrados valores relevantes, provavelmente devido aos já citados problemas do modelo.

5.6 Resumo do capítulo

Neste capítulo foi aplicados os procedimentos desenvolvidos nos capítulos 3 e 4 ,em grades poligonais, tendo como referênci o trabalho de Fontana [21]. Os resultados iniciais, não ainda satisfatória, devido a modelagem da grade não está completa ou o modelo matemático não ser adequad ao problema, devido a problemas de convergência.

As alternativas podem ser a mudança da modelo da grade, por exemplo para duas interfaces ou o modelo matemático, para algum método numérico. Outra possibilidade é a continuação do modelo atual, que se ajusta muito bem a perfis senoidais e descrever a geometria poligonal em termos de Fourier.

No próximo capítulo, decrete-se o desenvolvimento de um software aplicativo, resultante do agrupamento de todos os procedimentos desenvolvidos neste trabalho. Tal software é aplicado para o projeto de noas grades otimizadas para o projeto de sensores RPS com grades otimizadas e incidência normal, para aplicações diversas e, mais especificamente com fibras ópticas.

CAPÍTULO 6

PROPOSTAS DE SENSORES OTIMIZADOS BASEADOS EM RPS COM INCIDÊNCIA NORMAL GERADAS POR SOFTWARE

No capítulo 3 foi descrito um modelo para geração de curvas de reflectância RPS com grades metálicas para um número qualquer de interfaces. No Capítulo 4 foram descritos um conjunto de procedimentos para otimização de tais curvas, com a determinação dos parâmetros da grade geradora. Neste capítulo, estes resultados são reunidos em um software aplicativo, com o qual se descreve um conjunto de novos resultados, baseados na proposta desta tese, de construir sensores RPS com grades otimizadas para aplicações diversas e mais especificamente para aplicações em que incidência normal seja mais adequada, como por exemplo, em fibras ópticas e em CDs e DVDs.

6.1 Software Aplicativo

Nesta seção reúne-se o conjunto de procedimentos e modelos matemáticos desenvolvidos, para a geração de curvas de reflectância, no capítulo 3 e otimização, no capítulo 4. O software aplicativo apresenta, portanto, duas principais funcionalidades, a geração de curvas de reflectância e geração de grades otimizadas, nos dois casos, para grades senoidais. Nas subseções a seguir faz-se a descrição os dois procedimentos.

6.1.1 Geração de curva de reflectância

A geração de curva de reflectância é um procedimento que calcula os coeficientes $r(k_{l=0})$, no sistema composto pelas Equações 3.38 e 3.39 e, determina a reflectância $R(X) = |r(k_{l=0})|^2$, onde X representa o conjunto de parâmetro de entrada tal que, para grade com uma interface $X = (L, \lambda, \theta, \Lambda, h1, n_d, \varepsilon_m)$. Para duas interfaces $X = (L, \lambda, \theta, \Lambda, h1, h2, d, n_{d1}, n_{d2}, \varepsilon_m)$, com

L Truncagrm

λ comprimento de onda

θ ângulo de incidência

L Truncagrm

Λ periodicidade da grade

h1 amplitude da interface 1

h2 amplitude da interface 2

d espessura do metal

n_{d1} índice do meio de incidência

n_{d2} índice do dielétrico 2

ε_m permissividade do metal...

A dinâmica do procedimento ocorre com a variação do ângulo θ , tal que, para cada valor de θ , é calculado o valor de $R(\theta)$ e no final é gerada a curva de reflectância.

6.1.2 Geração de grades otimizadas

O objetivo deste procedimento é receber como entrada $E = (L, \lambda, \theta_{max}, n_d, \varepsilon_m)$ e gerar como saída $S = (\Lambda_{otimo}, h1_{otimo})$, os parâmetros da grade otimizada. Os procedimentos foram desenvolvidos para grades de mesma periodicidade. A sequência do procedimento, para uma interface é descrita a seguir.

Passo	Ação	Referência
01	receber entrada(E)	Parâmetros
02	calcular o ângulo de ressonância(θ_{SP})	Eq:(4.2)
03	calcular periodicidade da grade (Λ)	Eq:(4.9)
04	calcular amplitude da grade(h1)	SEC:(4.2.3)
05	calcular correção da grade($\Delta\Lambda$)	Eq:(4.11)
06	medir a sensibilidade da grade(dR/dn)	Eq:(4.12)
07	gerar saída($\Lambda_{otm}, h1_{otm}, h2_{otm}, d_{otm}$)	saída

Para duas interfaces muda a entrada para

$$E = (L, \theta_{max}, n_{d1}, n_{d2}, \varepsilon_m)$$

e saída

$$S = (\Lambda_{otimo}, h1_{otimo}, h2_{otimo}, d_{otimo})$$

Assim como $h1_{otimo}$ e $h2_{otimo}$, a espessura d_{otimo} também é gerada por iteração, dentro do procedimento e, os resultados obtidos estão sempre dentro da faixa de espessura ótima obtida em Fontana2006 [20], para interface Au-Ar e Au-água, podendo, portanto, esta faixa, ser utilizada como referência como valor inicial d_0 , para a iteração.

Para a adição de cada nova interface ocorre o acréscimo de mais um índice de refração nos parâmetros de entrada e mais um espessura e amplitude, na saída.

6.1.3 Implementação

O software aplicativo é implementado em dois módulos distintos e recebe o nome de Sistema Gerador de Grades de Difração Otimizadas (SGGDO). Um módulo é a interface com o usuário desenvolvido e implementado para web, utilizando-se o ambiente de desenvolvimento PHP-Apache, sendo PHP software de programação para web e Apache software servidor de páginas web. Este ambiente integrado faz parte do pacote de software livre XAMPP 1.6.5, utilizado no desenvolvimento desta aplicação. O outro módulo, chamado de gerador implementa os procedimentos descritos para a geração das curvas de reflectância e geração de grades otimizadas, implementados nesta versão inicial, em Matlab®2011, gerando módulo executável para ambiente MS-Windows®.

A integração dos ambientes é feita por troca de arquivos.txt, nesta versão, e controlada pelo servidor web. A dinâmica da aplicação entre usuário, interface web e módulo gerador ocorre na seguinte sequência: o usuário preenche os dados de entrada através da interface web, os dados são

armazenados em arquivos, o módulo gerador é ativado, lê os dados de entrada dos arquivos, processa as entradas, gera as saídas e grava em arquivo.txt, o módulo interface web lê os arquivos de saída e exibe os resultados para o usuário.

A Figura ?? mostra a interface inicial do SGGDO, cujo endereço internet, até a data de conclusão desta tese pode ser acessada em <http://200.247.49.57/sensores>.

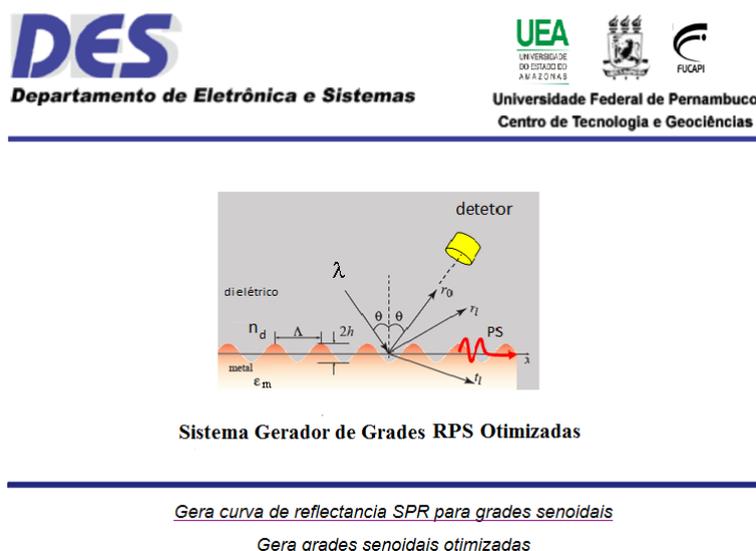


Figura 6.1: Interface inicial do Sistema Gerador de Grades de Difração Otimizadas - SGGDO

Na próxima seção o SGGDOO é utilizado como ferramenta de apoio, para o desenvolvimento da proposta inovadora de sensores RPS baseada em grades de difração otimizadas com incidência normal, proposto por esta Tese.

6.2 Propostas de Sensores baseados em RPS com Incidência Normal

Nesta seção explora-se a opção de geração de grades senoidais otimizadas, do SGGDO. As opções de geração são mostradas na Figura :6. 2. Embora o SGGDO proporcione muitas opções de projeto, tais como uma a três interfaces, amplitudes diferenciadas e escolha do ângulo ótimo de operação desejado, particularmente, o interesse é em projeto de grades com incidência normal, para aplicações em fibras ópticas e para a implementação de outras configurações de sensores, cuja leitura óptica seria mais facilitada com o alinhamento ortogonal da superfície sob teste em relação ao feixe de luz de excitação.

Geração de Grades senoidais RPS otimizadas : selcione uma grade

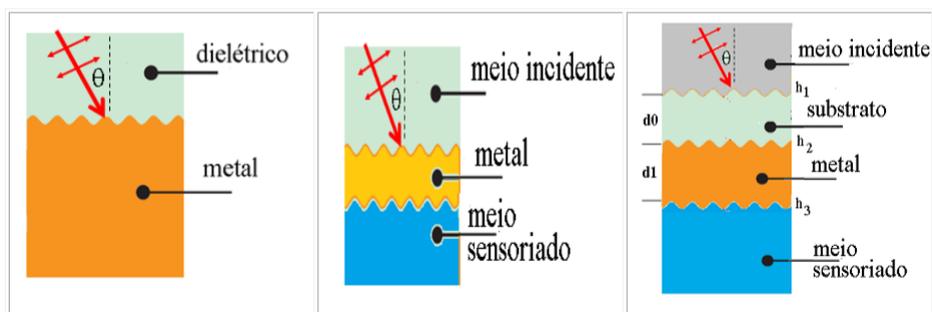


Figura 6.2: SGGDO: Opções de geração de grades senoidais.

6.2.1 RPS sob incidência normal

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

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

Propõe-se neste trabalho o emprego de grade de difração projetada de tal forma a permitir atingir a sensibilidade máxima no ponto de declividade nula. Mostramos que isso pode ser obtido para incidência normal do feixe de luz em relação ao plano médio da interface. Sob essa condição o feixe de entrada, auxiliado pelo perfil periódico da grade, acopla parcialmente com dois plásmons

de superfície contra-propagantes e a curva de resposta apresenta sensibilidade máxima no ponto de declividade nula. A Figura 6.3 gerada pelo SGGDO, tendo como parâmetros $\lambda = 850nm$, incidência normal, filme metálico de ouro, interface de incidência ar-metal, interface metal-vidro e, grade espessa ($> 200 nm$), mostra um exemplo de uma curva otimizada com declividade nula em $\theta_{max} = 0$.

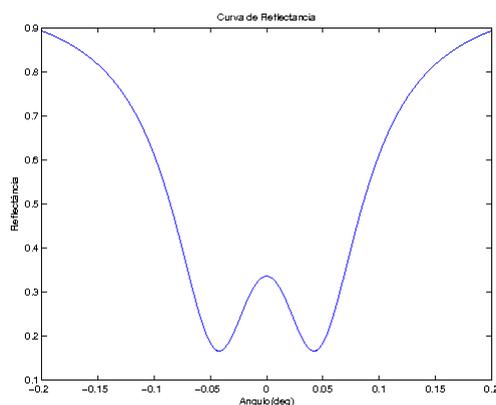


Figura 6.3: SGGDO: Exemplo curva de reflectância otimizada com declividade nula em $\theta_{max} = 0$

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

6.2.2 Possíveis configurações

Duas possíveis configurações são propostas neste Projeto de Tese, conforme cenários (a) e (b) da Figura

A configuração da Figura.6.4b, é composta de um filme metálico de espessura d depositado sobre uma grade de difração no material de suporte (em geral feito de vidro ou plástico). Uma vez que, do ponto de vista de fabricação dessa estrutura, o filme é depositado sobre o suporte de perfil periódico, as interfaces do filme exibem perfil de mesma periodicidade, mas de amplitudes distintas. Esta seria uma possível configuração de um sensor em fibra óptica, em que o meio de suporte é a própria fibra, utilizada para excitação, e detecção do efeito de RPS da luz refletida para a extremidade de entrada.

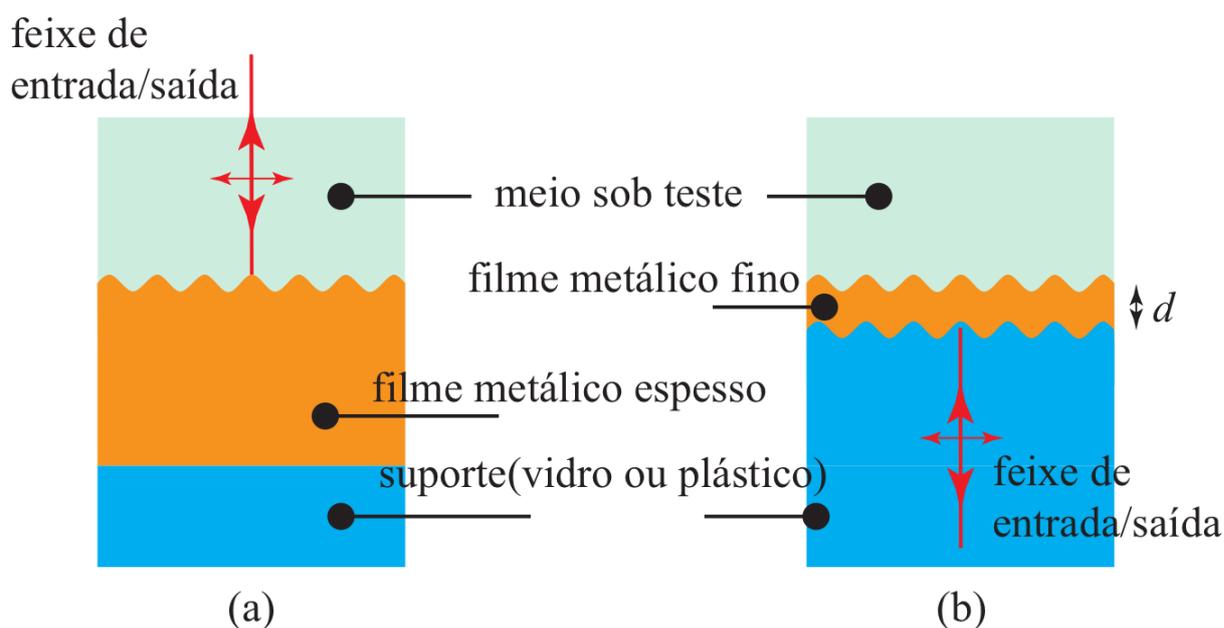


Figura 6.4: SGGDO: Configurações propostas para RPS com incidência normal

θ_{max}

Nas próximas subseções são descritos os resultados obtidos para cada configuração, em relação ao desempenho.

6.2.3 Desempenho do efeito RPS em filmes de ouro para incidência normal: cenário 6.4(a)

Para a configuração ilustrada na Figura 6.4a, os cálculos foram realizados o emprego do SGGDO, admitindo que o feixe de luz, polarizado no plano de incidência, atinge a superfície periódica do metal através do meio sob teste. O filme metálico é espesso o suficiente para não haver interferência da interface metal/suporte, mostrada na Figura 6.4a. O meio sob teste é considerado não absorvente de índice de refração n . Para incidência normal, o ângulo de incidência é fixado em 0° . A escolha de ouro como metal foi feita em vista de sua boa estabilidade química, em soluções aquosas, e por ser utilizado na maioria de dispositivos sensores baseados em RPS. As constantes ópticas para o ouro foram obtidas a partir de valores tabelados na literatura [33].

A Figura 6.5a mostra o grau de variação na reflectância em $\theta_{max} = 0^\circ$, para uma variação incremental de 10^{-4} no índice de refração do meio sob teste, tendo valor $n = 1$, um exemplo típico de aplicação em meios gasosos. Nessa simulação, o sensor foi projetado para operação no comprimento de onda e os parâmetros obtidos para a grade otimizada estão descritos na Tabela 6.1.

A Figura 6.5b mostra o grau de variação na reflectância, quando o valor do índice de refração

do meio sob teste é substituído por $n=1.33$, aproximado a um meio aquoso, mantendo-se os outros parâmetros de entrada. Os parâmetros obtidos para a grade também são descritos na Tabela 6.1.

No último experimento, para esta configuração, o comprimento de onda é aumentado para $\lambda = 1.3\mu m$, tanto para o meio sob teste gasoso quanto o aquoso. Os resultados são mostrados no gráfico da Figura 6.6(a), para o meio gasoso e Figura 6.6(b) para o meio aquoso, com parâmetros na Tabela 6.1.

Tabela 6.1: Parâmetros de entrada e saída referentes às curvas geradas e mostradas nas Figuras 6.5 e 6.6

Ref.	$\lambda(nm)$	$\Lambda(nm)$	$h(nm)$	$d(nm)$	Sens.(dR/dn)
Fig6.5(a)	1000	987.61	10	> 200	927
Fig6.5(b)	1000	735.33	9	> 190	380
Fig6.6(a)	1300	1291.2	12	> 190	1500
Fig6.6(b)	1300	965.67	10	> 200	650

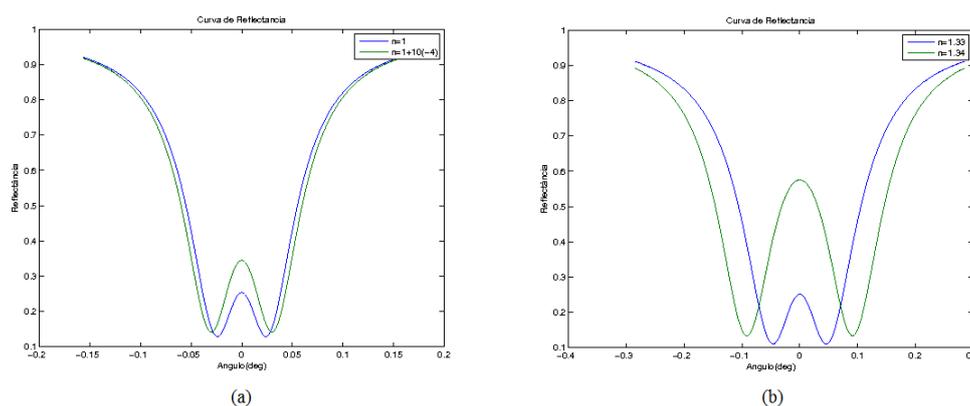


Figura 6.5: SGGDO:variação na reflectância em incidência normal:(a) gasos , (b) aquoso, para um comprimento de onda de $1\mu m$.

Também foram calculados os parâmetros ótimos de grades de ouro na região espectral entre $0.6\mu m$ e $1.5\mu m$. Os resultados estão agrupados nas Figuras 6.7 e Figura 6.8, para os tipos de meio sob teste: gasoso e aquoso, respectivamente. Sensores para substâncias gasosas operariam na condição ($n \approx 1$), ao passo que biossensores em meios líquidos operariam aproximadamente na condição ($n \approx 1.33$). A dependência espectral do índice de refração de água foi obtido em [34]. As curvas obtidas permitem projetar um sensor de sensibilidade máxima dR/dn , no comprimento de onda correspondente para operação com incidência normal.

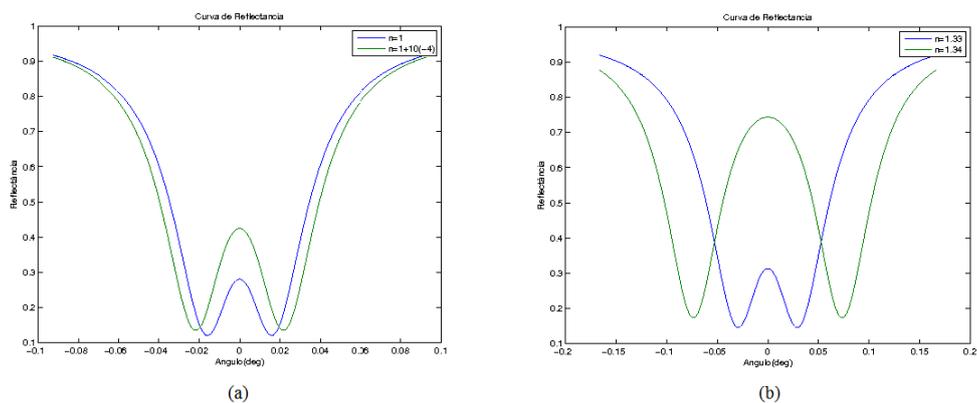


Figura 6.6: SGGDO: variação na reflectância em incidência normal, para uma variação incremental no índice de refração do meio sob teste: (a) gases 10^{-4} e (b) aquoso, para um comprimento de onda de $1.3\mu\text{m}$.

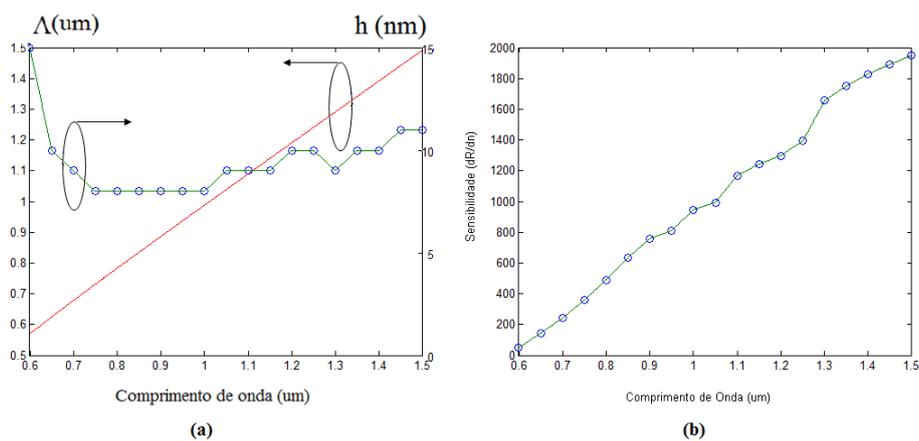


Figura 6.7: SGGDO: Dependências espectrais (a) dos parâmetros ótimos e (b) sensibilidade em grade de ouro para aplicações em meios gasosos.

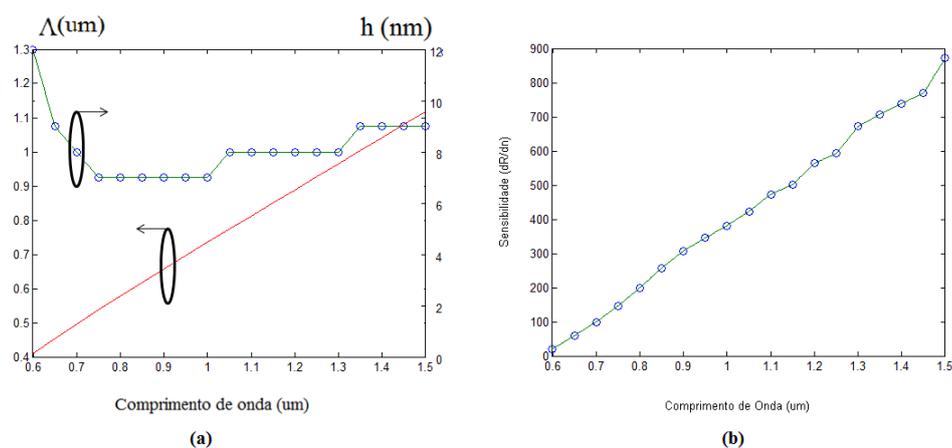


Figura 6.8: SGGDO: Dependências espectrais dos parâmetros ótimos (a) periodicidade e amplitude e, (b) sensibilidade, em grade de ouro para aplicações em meios aquoso.

Dois observações importantes podem ser feitas a partir dessas duas figuras. Em primeiro lugar, pode-se notar que a sensibilidade no ar, por exemplo, aumenta por um fator de aproximadamente 40, pela mudança do comprimento de onda de operação de $0.6\mu\text{m}$ para $1.5\mu\text{m}$, chegando a um valor de cerca de 2000. A segunda observação a ser destacada é sensibilidade de 2.4 vezes maior, obtida em ar, relativamente àquela obtida em água. Este é um efeito esperado uma vez que o efeito de RPS é muito mais acentuado no ar.

Na próxima seção são descritos os resultados para o caso do cenário mostrado em 6.4(b)

6.2.4 Desempenho do efeito de RPS em filmes de ouro para incidência normal: Cenário 6.4(b)

Diferente da configuração mostrada na figura 6.4a, a configuração 64(b) envolve a otimização de duas interfaces periódicas, bem como a espessura do filme metálico. Nesta configuração o feixe de luz polarizado no plano de incidência, atinge a superfície periódica do metal através do suporte, como por exemplo fibra óptica. O filme metálico é fino o suficiente, de modo que as variações do índice de refração do meio sob teste, module a luz refletida do metal de volta para o meio suporte.

Através do SGGDO, foram aplicados os mesmos testes de desempenho, que no caso da configuração 6.4(a), considerando a quantidade e possibilidades de configuração de parâmetros que afetam o desempenho, como por exemplo, uma ou das interfaces senoidais, diversas combinações de amplitudes para as interfaces e a espessura do filme metálico.

Após alguns experimentos não conclusivos, estamos modificando o SGGDO para permitir o pro-

jeto de grades com opções de flexibilidade em termos da escolha de grades com amplitudes variáveis. Até então as opções do sistema so permitiam interfaces senoidais com as amplitudes iguais ou planar, com amplitude nula. Estes parâmetros não são suficientes para explorar as possibilidades, principalmente quanto a limitação da faixa de variação da sensibilidade.

No contexto atual das opções, a Figura 6.9 mostra um típico resultado para a melhor configuração e resultados, obtido com interface de entrada senoidal ($h1 \neq 0$) e a interface metal-meio teste plana ($h2 = 0$). Observa-se nos gráficos da referida figura, uma faixa de variação disponível (faixa de variação dinâmica) muito pequena. Nos dois casos $\lambda = 1\mu m$, com sensibilidade $dR/dn=300$, para o meio gasoso e ≈ 150 para o meio aquoso.

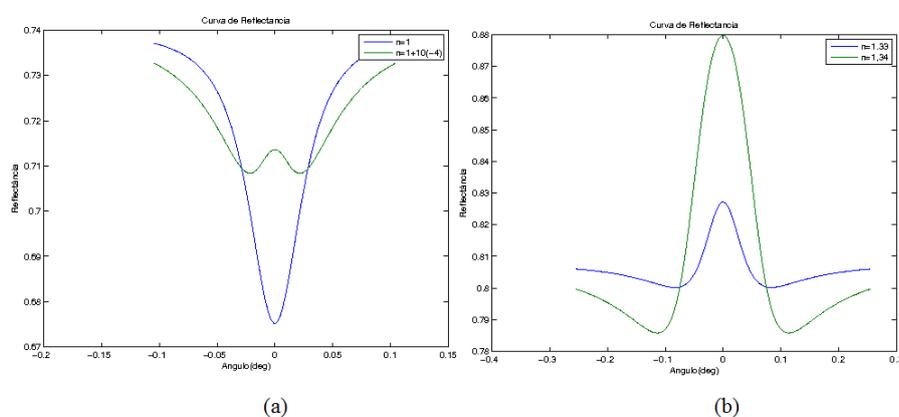


Figura 6.9: SGGDO: resultado típico para configuração de duas interfaces senoidal e plana. Pequena faixa dinâmica mas sensibilidade explorável.

A Figura 6.10 mostra, para esta configuração senoidal-plana para as interfaces, os parâmetros ótimos de grades de ouro na região espectral entre $0.6\mu m$ e $1.5\mu m$. Embora os resultados pareçam satisfatórios, a limitação na faixa dinâmica é um fator limitante do ponto de vista de implementação. É necessário investigar outras possibilidades ainda não exploradas.

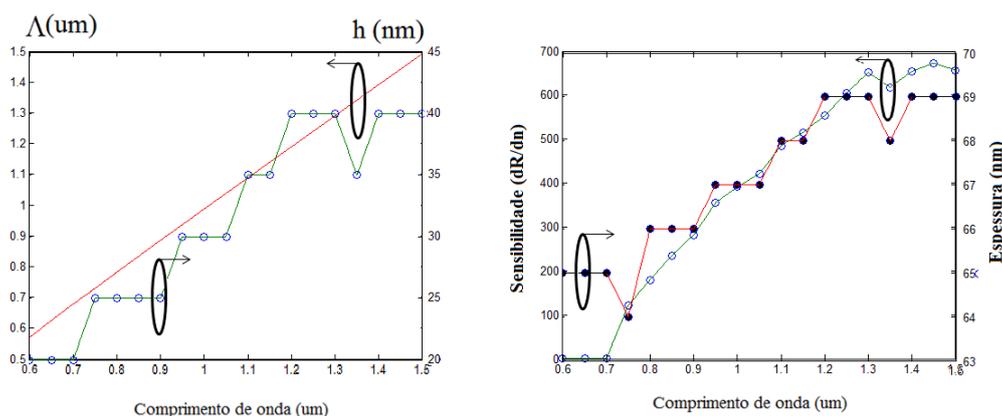


Figura 6.10: SGGDO: Escolha de parâmetros ótimos (a) periodicidade e amplitude e (b) espessura e sensibilidade.

6.3 Resumo do capítulo

Neste capítulo completa-se o conjunto de propostas desta Tese. Foi apresentado o software aplicativo, chamado de SGGDO, desenvolvido ao longo do projeto, disponível para testes e sugestões de melhorias, no endereço <http://200.247.49.57/sensores>.

Na segunda parte do capítulo foram apresentadas estratégias inovadoras para o projeto de sensores otimizados em incidência normal. Embora neste caso ainda haja questões em aberto, os resultados surpreendem no primeiro caso, seção 6.2.3 onde para cada variação de 10^{-4} no índice de refração do meio sensoriado, obtém-se um acréscimo de 0.1 unidades de reflectância. Outra observação em relação à inovação é que neste novo cenário o sistema de detecção não precisa fazer conversão de energia em deslocamento angular, isto é, a medida é direta.

Ainda em relação aos resultados da seção 6.2.3 é que o esquema da luz atravessar o meio a ser sensoriado antes de refletir no metal, requer algumas estratégias de montagem e design para o sensor que utilizará esta configuração de grade otimizada.

No próximo capítulo são discutidas as implicações das contribuições desta Tese e propostas de trabalhos futuros.

CAPÍTULO 7

SUMÁRIO DAS CONTRIBUIÇÕES DA TESE

As propostas desta Tese são todas correlacionadas, tendo como foco central a hipótese de que é possível determinar parâmetros estruturais de grades metálicas - periodicidade, amplitude e espessura - para o desenvolvimento de sensores RPS com máxima sensibilidade, e, que opere em um dado comprimento de onda em incidência normal. Esta hipótese se confirma, quando se obtém um gráfico como o da Figura 6.7 e 6.8, nos quais é possível escolher os parâmetros de fabricação de uma grade com estes requisitos.

A proposta de investigar o efeito RPS em CDs/DVDs, passa necessariamente pela abordagem de grades poligonais. O trabalho ainda não é conclusivo. Quando for concluído, será possível determinar o comprimento de onda ótimo para o reaproveitamento destes dispositivos para trabalhar como sensores RPS de baixo custo em incidência normal.

Também são propostas e apresentadas estratégias para novas aplicações de grades senoidais otimizadas com foco de utilização com fibras ópticas, conforme cenários descritos nas Figuras 6.4(a) e 6.4(b), ainda não conclusivos.

Também é proposto o desenvolvimento de uma aplicação com acesso via Internet, para fornecer suporte e rapidez na continuidade do desenvolvimento deste projeto. O SGGDO já está disponível no endereço <http://200.247.49.57/sensores>, para testes e sugestões de melhorias.

APÊNDICE A

PUBLICAÇÕES

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

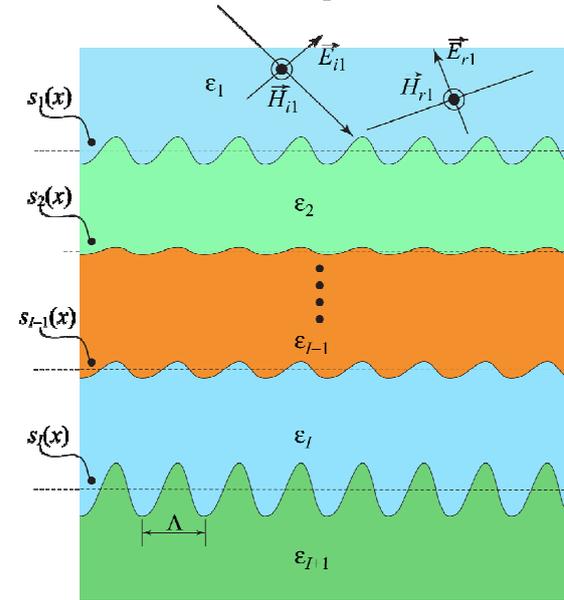
E. F. Melo and E. Fontana, "Optimized Front Surface SPR Sensors for Operation at Normal Incidence". In: *MOMAG 2012*, 2012, João Pessoa. *Anais do MOMAG 2012*. João Pessoa: SBMO, 2012. v. 1. p. 1-4.

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

[12pt]article makeidx multirow multicol [dvipsnames,svgnames,table]xcolor graphicx epstopdf
ulem hyperref amsmath amssymb [paperwidth=595pt,paperheight=841pt,top=70pt,right=70pt,bottom=70pt,left=70pt]

APÊNDICE II MODELAGEM PARA MÚLTIPLAS INTERFACES PERIÓDICAS

Nesta seção desenvolve-se o modelo para o cálculo dos coeficientes de transmissão e reflexão para



uma estrutura multicamadas com I interfaces, mostrada na Figura.3.2.

Figura.3.2. Grade com estrutura de multicamadas.

Inicialmente é necessário determinar a relação entre amplitudes incidentes e refletidas em meios adjacentes que têm a i -ésima interface em comum. Essa situação está ilustrada na Fig.3.3. Novamente a análise é restrita ao caso de modos TM. Os campos no i -ésimo meio, com $i = 1, 2, 3, \dots, I-1$, podem ser escritos na forma

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

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

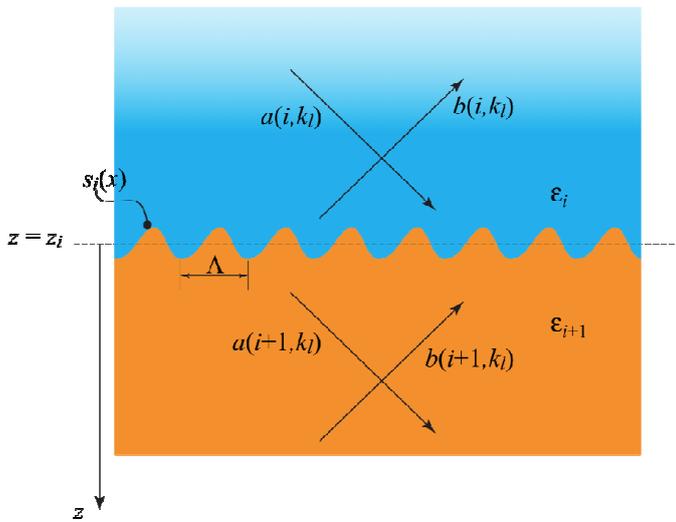


Figura. 3.3 Descrição dos campos em

meios adjacentes que têm a i -ésima interface em comum. Note que o primeiro plano médio está localizado em $z=0$, e nas Definições (A.52) e (A.53), z_0 é um plano virtual também localizado em $z=0$, para manter a consistência com a formulação no caso particular de uma única interface. Portanto $z_0=0$. Isso é também equivalente a definir uma espessura virtual $d_1=0$, como se tornará evidente ainda neste capítulo. Com essas considerações, defie-se o conjunto de coordenadas para os planos que definem as interfaces

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

e espessuras

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

O vetor de onda é dado por

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

com

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

Os campos refletidos podem ser escritos com

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

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

Os campos no $(i+1)$ -ésimo meio são obtidos fazendo a troca $i \rightarrow i+1$. As condições de contorno dadas por (3.16) e (3.17) para o campo total em cada lado da interface, podem ser escritas como

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

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

com

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

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

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

produz

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

Para a i -ésima superfície

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

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

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

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

Aplicando (A.11) obtém-se

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

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

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

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

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

com

$$\tilde{C}_{i\pm}^{(j)} = \left(\tilde{C}_{i\pm}^{(j)\langle -L \rangle} \quad \tilde{C}_{i\pm}^{(j)\langle -L+1 \rangle} \quad \dots \quad \tilde{C}_{i\pm}^{(j)\langle 0 \rangle} \quad \tilde{C}_{i\pm}^{(j)\langle 1 \rangle} \quad \dots \quad \tilde{C}_{i\pm}^{(j)\langle L \rangle} \right) \quad (\text{A.15})$$

tendo a l -ésima coluna dada por

$$\tilde{C}_{i\pm}^{(j)\langle l \rangle} = \left(C_{-L-l}(\pm p_{jl}, \tilde{g}_i) \quad C_{-L-l+1}(\pm p_{jl}, \tilde{g}_i) \quad \dots \quad C_{-l}(\pm p_{jl}, \tilde{g}_i) \quad C_{-l+1}(\pm p_{jl}, \tilde{g}_i) \quad \dots \quad C_{L-l}(\pm p_{jl}, \tilde{g}_i) \right) \quad (\text{A.16})$$

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

$$\tilde{A}^{(i)} = \left(a(i, -L) \quad a(i, -L+1) \quad \dots \quad a(i, 0) \quad \dots \quad a(i, L-1) \quad a(L) \right)^T \quad (\text{A.17})$$

$$\tilde{B}^{(i)} = \left(b(i, -L) \quad b(i, -L+1) \quad \dots \quad b(i, 0) \quad \dots \quad b(i, L-1) \quad b(L) \right)^T \quad (\text{A.18})$$

$$\tilde{P}^{(i)} = \left(p_{i(-L)} \quad p_{i(-L+1)} \quad \dots \quad p_{i0} \quad \dots \quad p_{i(L-1)} \quad p_{iL} \right)^T \quad (\text{A.19})$$

e o termo exponencial é a matriz diagonal tendo elementos

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

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

$$e^{j\tilde{\Phi}(i)} e^{-j\tilde{\Phi}(i)} = \tilde{\mathcal{I}}. \quad (3.75)$$

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

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

Repetindo o procedimento da expansão exponencial e usando a propriedade da derivada (3.32),

obtem-se

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

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

$$\begin{aligned} \sum_l \begin{bmatrix} \left(\frac{(m-l)k_l k_g - p_{il}^2}{\varepsilon_i p_{il}} \right) C_{m-l}(p_{il}, \tilde{g}_i) e^{jp_{il}d_i} a(i, l) \\ - \left(\frac{(m-l)k_l k_g - p_{il}^2}{\varepsilon_i p_{il}} \right) C_{m-l}(-p_{il}, \tilde{g}_i) e^{-jp_{il}d_i} b(i, l) \end{bmatrix} \\ = \sum_l \begin{bmatrix} \left(\frac{(m-l)k_l k_g - p_{(i+1)l}^2}{\varepsilon_{i+1} p_{(i+1)l}} \right) C_{m-l}(p_{(i+1)l}, \tilde{g}_i) a(i+1, l) \\ - \left(\frac{(m-l)k_l k_g - p_{(i+1)l}^2}{\varepsilon_{i+1} p_{(i+1)l}} \right) C_{m-l}(-p_{(i+1)l}, \tilde{g}_i) b(i+1, l) \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (\text{A.21})$$

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

$$F_{ml}(i) = \frac{(m-l)k_l k_g - p_{il}^2}{\varepsilon_i p_{il}^2} \quad (\text{A.22})$$

a expressão (A.21) pode ser colocada na forma

$$\sum_l [F_{ml}(i) C_{m-l}(p_{il}, \tilde{g}_i) e^{jp_{il}d_i} a(i, l) - F_{ml}(i) C_{m-l}(-p_{il}, \tilde{g}_i) e^{-jp_{il}d_i} b(i, l)] =$$

$$\sum_l [F_{ml}(i+1) C_{m-l}(p_{(i+1)l}, \tilde{g}_i) a(i+1, l) - F_{ml}(i+1) C_{m-l}(-p_{(i+1)l}, \tilde{g}_i) b(i+1, l)] \quad (\text{A.23})$$

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

$$\tilde{D}_{i\pm}(j) = \tilde{F}(j) \circ \tilde{C}_{i\pm}(j) \quad (\text{A.24})$$

com

$$\tilde{F}(i) = \left(\tilde{F}(i)^{\langle -L \rangle} \quad \tilde{F}(i)^{\langle -L+1 \rangle} \quad \dots \quad \tilde{F}(i)^{\langle 0 \rangle} \quad \tilde{F}(i)^{\langle 1 \rangle} \quad \dots \quad \tilde{F}(i)^{\langle L \rangle} \right) \quad (\text{A.25})$$

tendo a l -ésima coluna dada por

$$\tilde{F}(i)^{\langle l \rangle} = \left(F_{-Ll}(i) \quad F_{(-L+1)l}(i) \quad \dots \quad F_{0l}(i) \quad F_{1l}(i) \quad \dots \quad \tilde{F}_{Ll}(i) \right)^T \quad (\text{A.26})$$

e com $\tilde{C}_{i\pm}(j)$ dada por (A.15). Usando (A.17), (A.18) e (A.24), (A.23) pode ser colocada na forma

$$\tilde{D}_{i+}(i) e^{j\tilde{\Phi}(i)} \tilde{A}(i) - \tilde{D}_{i-}(i) e^{-j\tilde{\Phi}(i)} \tilde{B}(i) = \tilde{D}_{i+}(i+1) \tilde{A}(i+1) - \tilde{D}_{i-}(i+1) \tilde{B}(i+1). \quad (3.82)$$

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

$$\tilde{C}_{i+}(i) e^{j\tilde{\Phi}(i)} \tilde{A}(i) + \tilde{C}_{i-}(i) e^{-j\tilde{\Phi}(i)} \tilde{B}(i) = \tilde{C}_{i+}(i+1) \tilde{A}(i+1) + \tilde{C}_{i-}(i+1) \tilde{B}(i+1) \quad (\text{A.27})$$

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

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

$$\tilde{M}'_i(j) = \begin{pmatrix} \tilde{C}_{i+}(j) & \tilde{C}_{i-}(j) \\ \tilde{D}_{i+}(j) & -\tilde{D}_{i-}(j) \end{pmatrix} \quad (\text{A.29})$$

$$\tilde{E}(i) = \begin{pmatrix} e^{j\tilde{\Phi}(i)} & \tilde{0} \\ \tilde{0} & e^{-j\tilde{\Phi}(i)} \end{pmatrix} \quad (\text{A.30})$$

que satisfaz à relação

$$\tilde{E}^{-1}(i) = \tilde{E}'(i) = \begin{pmatrix} e^{-j\tilde{\Phi}(i)} & \tilde{0} \\ \tilde{0} & e^{j\tilde{\Phi}(i)} \end{pmatrix}. \quad (\text{A.30})$$

Definindo ainda a matriz de amplitudes

$$\tilde{S}(i) = \begin{pmatrix} \tilde{A}(i) \\ \tilde{B}(i) \end{pmatrix} \quad (\text{A.31})$$

então (A.27) e (A.28) podem ser escritas na forma

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

ou equivalentemente

$$\tilde{S}(i+1) = \left[\tilde{M}'_i(i+1) \right]^{-1} \tilde{M}'_i(i) \tilde{E}(i) \tilde{S}(i) \quad (\text{A.32})$$

Definindo ainda

$$\tilde{M}(i) = \left[\tilde{M}'_i(i+1) \right]^{-1} \tilde{M}'_i(i) \tilde{E}(i) \quad (\text{A.33})$$

(A.32) pode ser escrita como

$$\tilde{S}(i+1) = \tilde{M}(i) \tilde{S}(i) \quad (\text{A.34})$$

A expressão (A.34) pode ser aplicada iterativamente para determinar a relação entre as amplitudes dos campos de entrada (meio 1) e de saída (meio $I+1$). Essa relação pode ser colocada na forma

$$\tilde{S}(I+1) = \tilde{M} \tilde{S}(1) \quad (\text{A.35})$$

com

$$\tilde{M} = \prod_{i=1}^I \tilde{M}(I+1-i) \quad (\text{A.36})$$

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

Em (A.35) a matriz de amplitudes no $(I+1)$ -ésimo meio é simplesmente

$$\tilde{S}(I+1) = \begin{pmatrix} \tilde{A}(I+1) \\ \tilde{0} \end{pmatrix} \quad (\text{A.37})$$

e no meio 1,

$$\tilde{S}(1) = \left(\left(0 \quad \dots \quad 0 \quad 1 \quad 0 \quad \dots \quad 0 \right)^T \tilde{B}(1) \right)^T \quad (\text{A.38})$$

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

$$\tilde{M} = \begin{pmatrix} \tilde{M}_{11} & \tilde{M}_{12} \\ \tilde{M}_{21} & \tilde{M}_{22} \end{pmatrix} \quad (\text{A.39})$$

aplicando (A.37), (A.38) e (A.39) em (A.35), resulta em

$$\tilde{A}(I+1) = \tilde{M}_{11} \left(0 \quad \dots \quad 0 \quad 1 \quad 0 \quad \dots \quad 0 \right)^T + \tilde{M}_{12} \tilde{B}(1) \quad (\text{A.40})$$

$$\tilde{M}_{21} \left(0 \quad \dots \quad 0 \quad 1 \quad 0 \quad \dots \quad 0 \right)^T + \tilde{M}_{22} \tilde{B}(1) = \tilde{0} \quad (\text{A.41})$$

Note que

$$\tilde{M}_{11} \left(0 \quad \dots \quad 0 \quad 1 \quad 0 \quad \dots \quad 0 \right)^T = \tilde{M}_{11}^{(0)} \quad (\text{A.42})$$

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

e portanto, de (A.41) obtém-se

$$\tilde{B}(1) = -\tilde{M}_{22}^{-1} \tilde{M}_{21}^{(0)} \quad (\text{A.44})$$

e de (A.40) chega-se a

$$\tilde{A}(I+1) = \tilde{M}_{11}^{(0)} - \tilde{M}_{12} \tilde{M}_{22}^{-1} \tilde{M}_{21}^{(0)} \quad (\text{A.45})$$

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

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

De (A.35)

$$\tilde{S}(2) = \begin{pmatrix} \tilde{A}(2) \\ \tilde{0} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tilde{T} \\ \tilde{0} \end{pmatrix} \quad (\text{A.46})$$

$$\tilde{S}(1) = \left(\left(0 \dots 0 \ 1 \ 0 \dots 0 \right)^T \tilde{R} \right)^T \quad (\text{A.47})$$

$$\tilde{M}'_1(1) = \begin{pmatrix} \tilde{C}_+(1) & \tilde{C}_-(1) \\ \tilde{D}_+(1) & -\tilde{D}_i(1) \end{pmatrix} \quad (\text{A.48})$$

$$\tilde{M}'_1(2) = \begin{pmatrix} \tilde{C}_+(2) & \tilde{C}_-(2) \\ \tilde{D}_+(2) & -\tilde{D}_i(2) \end{pmatrix} \quad (\text{A.49})$$

$$\tilde{C}_+^{(0)}(1) + \tilde{C}_-(1) \tilde{R} = \tilde{C}_+(2) \tilde{T} \quad (\text{A.50})$$

$$\tilde{D}_+^{(0)}(1) - \tilde{D}_-(1) \tilde{R} = \tilde{D}_+(2) \tilde{T} \quad (\text{A.51})$$

[12pt]article makeidx multirow multicol [dvipsnames,svgnames,table]xcolor graphicx epstopdf
 ulem hyperref amsmath amssymb [paperwidth=595pt,paperheight=841pt,top=70pt,right=70pt,bottom=70pt,left=70pt]

A.1 APÊNDICE III - CÁLCULO DA GRADE POLIGONAL

Nesta seção desenvolve-se o cálculo da Grade Poligonal, partindo das Equações do modelo desenvolvido no Capítulo 3, ou seja, as equações (3.36), (3.38)- (3.40). Inicialmente define-se a geometria da grade poligonal proposta, definida no Capítulo 5, tal que

$$s(x) = \begin{cases} \frac{h}{L_1}x & \text{se } 0 \leq x \leq L_1 \\ h & \text{se } L_1 \leq x \leq L_2 \\ \frac{(-h)}{[L_3-L_2]}x + \frac{h(L_3)}{[L_3-L_2]} & \text{se } L_2 \leq x \leq L_3 \\ 0 & \text{se } L_3 \leq x \leq \lambda_g \end{cases} \quad (\text{A.52})$$

Cálculo dos coeficientes:

Partindo da Equação (3.40)

$$C_m(p_{10}) = \frac{1}{\lambda_g} \int_0^{\lambda_g} e^{-jp_{10}[s(x)]} e^{jmk_g x} dx = \quad (\text{A.53})$$

De (A.52)

$$\begin{aligned} C_m(p_{10}) &= \frac{1}{\lambda_g} \int_0^{\lambda_g} e^{-jp_{10}[s(x)]} e^{jmk_g x} dx = \frac{1}{\lambda_g} \int_0^{L_1} e^{-j[p_{10}h/L_1]x} e^{jmk_g x} dx \\ &+ \frac{1}{\lambda_g} \int_{L_1}^{L_2} e^{-j[p_{10}h]} e^{jmk_g x} dx + \frac{1}{\lambda_g} \int_{L_2}^{L_3} e^{-jp_{10} \left[\frac{(-h)}{[L_3-L_2]}x + \frac{h(L_3)}{[L_3-L_2]} \right]} e^{jmk_g x} dx \\ &+ \frac{1}{\lambda_g} \int_{L_3}^{\lambda_g} e^0 e^{jmk_g x} dx \end{aligned} \quad (\text{A.54})$$

Resultando em

$$\begin{aligned} C_m(p_{10}) &= \frac{j}{\lambda_g} \frac{L_1}{[p_{10}h - mk_g L_1]} \left[e^{-j[p_{10}h - mk_g L_1]} - 1 \right] \\ &- \frac{1}{mk_g} e^{-j[p_{10}h]} \left[e^{jmk_g L_2} - e^{jmk_g L_1} \right] \\ &- \left[\frac{[L_3 - L_2]}{[p_{10}h + mk_g [L_3 - L_2]]} \right] e^{-j \left[\frac{hp_{10}L_3}{[L_3 - L_2]} \right]} \left(e^{j \left[\frac{L_3[p_{10}h + mk_g [L_3 - L_2]]}{[L_3 - L_2]} \right]} - e^{j \left[\frac{L_2[k_1 h + mk_g [L_3 - L_2]]}{[\lambda_g - 2L_2]} \right]} \right) \\ &- \frac{1}{mk_g} \left[e^{jmk_g \lambda_g} - e^{jmk_g L_3} \right] \end{aligned} \quad (\text{A.55})$$

Fazendo o mesmo procedimento para o cálculo dos outros coeficientes, ou seja

$$C_n(p_1) = \frac{1}{\lambda_g} \int_0^{\lambda_g} e^{jp_1[s(x)]} e^{jnk_g x} dx = \quad (\text{A.56})$$

$$\begin{aligned}
C_{(m-l)}(-p_{1l}) &= -(1) \frac{L_1}{[p_{1l}h+(m-l)k_g L_1]} [e^{j[p_{1l}h+(m-l)k_g L_1]} - 1] \\
&- \frac{1}{(m-l)k_g} e^{j[p_{1l}h]} [e^{j(m-l)k_g L_2} - e^{j(m-l)k_g L_1}] \\
&+ \left[\frac{[L_3-L_2]}{[p_{1l}h-(m-l)k_g [L_3-L_2]]} \right] e^{j \left[\frac{p_{1l}h(L_3)}{[L_3-L_2]} \right]} \left(e^{-j \left[\frac{[p_{1l}h-(m-l)k_g [L_3-L_2]]}{[L_3-L_2]} \right] L_3} - e^{-j \left[\frac{[p_{1l}h-(m-l)k_g [L_3-L_2]]}{[L_3-L_2]} \right] L_2} \right) \\
&- \frac{(1)}{(m-l)k_g} [e^{j(m-l)k_g \lambda_g} - e^{j(m-l)k_g L_3}]
\end{aligned} \tag{A.57}$$

e,

$$C_n(p_{2l}) = \frac{1}{\lambda_g} \int_0^{\lambda_g} e^{-jp_{2l}[s(x)]} e^{jm k_g x} dx \tag{A.58}$$

$$\begin{aligned}
C_{(m-l)}(p_{2l}) &= \frac{L_1}{[p_{2l}h-(m-l)k_g L_1]} [e^{-j[k_{1l}h-(m-l)k_g L_1]} - 1] \\
&- \frac{1}{(m-l)k_g} e^{-j[(m-l)h]} [e^{j(m-l)k_g L_2} - e^{j(m-l)k_g L_1}] \\
&- \left[\frac{[L_3-L_2]}{[k_{2l}h+(m-l)k_g [L_3-L_2]]} \right] e^{-j \left[\frac{h k_{2l} L_3}{[L_3-L_2]} \right]} \left(e^{j \left[\frac{L_3[k_{2l}h+(m-l)k_g [L_3-L_2]]}{[L_3-L_2]} \right]} - e^{j \left[\frac{L_2[k_{2l}h+(m-l)k_g [L_3-L_2]]}{[L_3-L_2]} \right]} \right) \\
&- \frac{1}{(m-l)k_g} [e^{j(m-l)k_g \lambda_g} - e^{j(m-l)k_g L_3}]
\end{aligned} \tag{A.59}$$

Pela (3.36) $F_{ml}(j) = \left(\frac{(m-l)k_l k_g - p_{2l}^2}{\varepsilon_j p_{jl}} \right)$, (A.55), (A.57) e (A.59), aplicadas em (3.38) e (3.39), tem-se então o sistema de equações que definem o cálculo da reflectância para a grade poligonal, cuja a interface é definida por $s(x)$, da Equação (A.52) ‘é formado pelas Equações (A.60) e (A.61) .

$$\begin{aligned}
&\sum_m C_m(p_{10}) \left(\frac{m k_x k_g - p_{210}}{\varepsilon_1 p_{10}} \right) \\
&= \sum_l t(k_l) \left(\frac{(m-l)k_l k_g p_{2l}^2}{\varepsilon_2(p_{2l})} \right) C_{(m-l)}(p_{2l}) \\
&+ \sum_l r(k_l) \left(\frac{(m-l)k_l k_g p_{1l}^2}{\varepsilon_1(p_{1l})} \right) C_{(m-l)}(p_{1l})
\end{aligned} \tag{A.60}$$

$$C_m(p_{10}) = \left[\sum_l t(k_l) C_{(m-l)}(p_{2l}) - r(k_l) C_{(m-l)}(p_{1l}) \right] \tag{A.61}$$

No Capítulo 5 é descrito e discutido os resultados da implementação deste sistema, para a determinação de da reflectância $R = |r(k_l)|^2$.

REFERÊNCIAS

- [1] J. HOMOLA, I. KOUDELA, S. S. YEE, Surface plasmon resonance sensors based on diffraction gratings and prism couplers: sensitivity comparison, *Sensors and Actuators B: Chemical*, v. 54, n. 1-2, p. 16–24, January 1999.
- [2] C. KITELL, **Introduction to Solid State Physics**, 8^a ed. Wiley, 2005.
- [3] D. SARID, W. CHALLENGER, **Modern Introduction to Surface Plasmons. Theory. Mathematica Modeling and Applications**, 1^a ed. Cambridge, 2010.
- [4] X. D. HOA, A. G. KIRK, M. TABRIZIAN, Towards integrated and sensitive surface plasmon resonance biosensors: A review of recent progress, *Biosensors and Bioelectronics*, v. 23, n. 2, p. 151–160, September 2007.
- [5] N.-F. CHIU, T.-S. WAY, C. YU, T.-C. T.-C. HSIAO, C.-W. LIN, Advanced plasmonic biosensing devices and automation systems for disease diagnostic and drug screening applications, In: **Intelligent Systems Design and Applications, 2008. ISDA '08. Eighth International Conference**, v. 2, 2008, p. 171–176.
- [6] J. DOSTALÉK, Rich information optical biosensor based on surface plasmon resonance, Tese, Institute of Radio Engineering and Electronics, Academy of Sciences of the Czech Republic, Department of Optical Sensors., May 2006.
- [7] C. NYLANDER, B. LIEDBERG, T. LIND, Gas detection by means of surface plasmon resonance, *Sensors and Actuators*, v. 3, n. 1, p. 79–88, 1983.
- [8] N. ROTENBERG, M. BETZ, J. N. CASPERS, H. M. DRIL VAN, Ultrafast switching of light into surface plasmons: an active grating coupler, In: **Lasers and Electro-Optics and Conference on Quantum electronics and Laser Science**, v. 2, 2009, p. 1–2.
- [9] J.-M. LIU, **Photonic Devices**, 1^a ed. Cambridge University Press, 2005.

- [10] R. C. JORGENSEN, S. S. YEE, A fiber-optic chemical sensor based on surface-plasmon resonance, *Sensors and Actuators B: Chemical*, v. 3, n. 1, p. 79–88, 1993.
- [11] E. FONTANA, A novel gold-coated multimode fiber sensor, *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques*, v. 50, n. 1, p. 82–87, 2002.
- [12] L. DE MARIA, M. MARTINELLI, G. VEGETTI, Fiber-optic sensor based on surface plasmon interrogation, *Sensors and Actuators B: Chemical*, v. 12, n. 3, p. 221–223, 1993.
- [13] E. FONTANA, H. D. DULMAN, D. E. DOGGETT, R. PANTELL, Surface plasmon resonance on a single mode optical fiber, *IEEE Transactions on Instrumentation and Measurement*, v. 47, n. 1, p. 168–173, 1998.
- [14] E. FONTANA, A theoretical analysis of the coupling of light to surface-plasmon oscillations at the edge of a slab waveguide, *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques*, v. 46, n. 3, p. 234–241, 1998.
- [15] B. ŠPACKOVÁ, J. HOMOLA, Theoretical analysis of a fiber optic surface plasmon resonance sensor utilizing a bragg grating, *Optics Express*, v. 17, n. 25, p. 23 254–23 264, 2009.
- [16] D. SARID, W. CHALLENGER, **Modern Introduction to Surface Plasmons. Theory. Mathematica Modeling and Applications**, 1^a ed. Cambridge, 2010, ch 12.
- [17] A. OTTO, Excitation of nonradiative surface plasma waves in silver by the method of frustrated total reflection, *Zeitschrift für Physik*, v. 216, p. 398–410, 1968.
- [18] E. KRETSCHMANN, H. RAETHER, Radiative decay of nonradiative surface plasmons excited by light, *Z. Naturforsch*, v. 23, p. 2135–2136, 1971.
- [19] D. SARID, W. CHALLENGER, **Modern Introduction to Surface Plasmons. Theory. Mathematica Modeling and Applications**, 1^a ed. Cambridge, 2010, ch 10.
- [20] E. FONTANA, Thickness optimization of metal films for the development of surface-plasmon-based sensors for nonabsorbing media, *Applied Optics*, v. 45, n. 29, p. 7632–7642, 2006.
- [21] ———, Theoretical and experimental study of the surface plasmons resonance effect on a recordable compact disk, *Applied Optics*, v. 43, n. 1, p. 79–87, 2004.
- [22] A. F. FREDERIC, P. AND MILLER, M. J. VANDOME, **Fresnel Equations**, 1^a ed. VDM Publishing,, 2010.

- [23] W. P. CHEN, J. M. CHEN, Use of surface plasma waves for determination of the thickness and optical constants of thin metallic films, *Optical Society of America*, v. 71, n. 2, p. 189–191, 1981.
- [24] B. ASHALL, Plasmonics and ultrafast nanooptics, <http://www.ucd.ie/biophysics/surfaceplasmons.html>, June 2013.
- [25] M. A. COOPER, Optical biosensors in drug discovery, *Nature Reviews Drug Discovery*, n. 1, p. 515–528, July 2002.
- [26] N. D. HIKMAT, W. D. BILLY, Theory and applications of surface plasmon resonance, resonant mirror, resonant waveguide grating, and dual polarization interferometry biosensors, *Sensors* 2010, v. 10, p. 9630–9646, 2010.
- [27] M. HUBER, J. SCHOBBERL, A. SINWEL, S. ZAGLMARY, Simulation of diffraction in periodic media with a coupled finite element and plane wave approach, *SIAM Journal on Scientific Computing*, v. 31, n. 2, p. 909–913, November 2008.
- [28] M. MOHARAM, T. GAYLORD, Rigorous coupled-wave analysis of grating diffraction - e mode polarization and losses, *Optical Society of America*, v. 73, p. 451–455, 1983.
- [29] A. POMP, The integral method for coated gratings: computation cost, *Modern Optics*, v. 38, n. 1, p. 109–120, 1991.
- [30] VAN DEN BERG. P. M., J. T. FOKKEMA, The rayleigh hypothesis in the theory of reflection by a grating, *Optical Society of America*, v. 69, n. 1, January 1979.
- [31] D. XUAN, The applications of surface plasmon resonance based on commercial digital disks, *University of Florida*, 2012.
- [32] J. A. SILVER, Frequency modulation spectroscopy for trace species detection, *Applied Optics*, v. 31, n. 6, p. 707–717, January 1992.
- [33] D. R. LIDE, **Handbook of Chemistry and Physics**, 85^a ed. David R. Lide, 2005.
- [34] P. SCHIEBENER, J. STRAUB, J. M. H. L. SENGER, J. S. GALLAGHER, Refractive index of water and steam as function of wavelength, temperature and density, *Physical and Chemical Reference Data*, v. 19, p. 677–717, January 1990.

- [35] S. DICKOPF, K. SCHMIDT, D. VERTTER, Spr sensor and spr array, *United States Patent*, n. 6795192 B2, September 2004.
- [36] C. J., Progress in the implementation of label-free detection:part 2: binding analysis assays, In: **Drug Discovery World Fall 2008**, 2008.
- [37] C. HU, F. LIN, High-performance coupled grating surface plasmon resonance sensor based on al-au bimetallic layer, *Modern Applied Science*, v. 4, n. 6, 2010.
- [38] N. GLASS, M. WEBER, D. MILLS, Attenuation and dispersion of surface plasmon polaritons on gratings, *Physics Revive B.*, v. 29, p. 6548–6559, 1984.
- [39] M. WEBER, Highly accurate renormalized mode-coupling theory for reflectivity of diffraction grating, *Physics Revive B.*, v. 33, p. 909–913, 1986.