



Universidade Federal de Campina Grande - UFCG
Centro de Engenharia Elétrica e Informática - CEEI
Departamento de Engenharia Elétrica - DEE
TEEE Biossensores: Fundamentos e Aplicações 2022.1

Estudo da Modelagem Matemática do Efeito SPR e Aplicação na Construção de um Código Computacional para Simulação, na Configuração de Kretschmann, nos modos AIM e WIM.

Adeilson de Sousa Leal
Prof. Dr. Antônio M. N. Lima
Prof. Dr. Jomar S. Vasconcelos

Campina Grande, PB. 31 de outubro de 2022.

Sumário

- Introdução;
- Modelagem matemática;
- Código computacional;
- Cenários de simulação;
- Resultados; e
- Considerações finais.

Introdução

- Neste trabalho, é realizado um estudo teórico sobre a formulação matemática do efeito da Ressonância de Plásmons de Superfície (SPR);
- É feita a proposição de um código computacional em linguagem *Python*, para cálculo da curva de refletividade para um sensor SPR;
- Para tanto, foram estudados análise de Fresnel para a propagação de ondas eletromagnéticas em estruturas multicamadas;

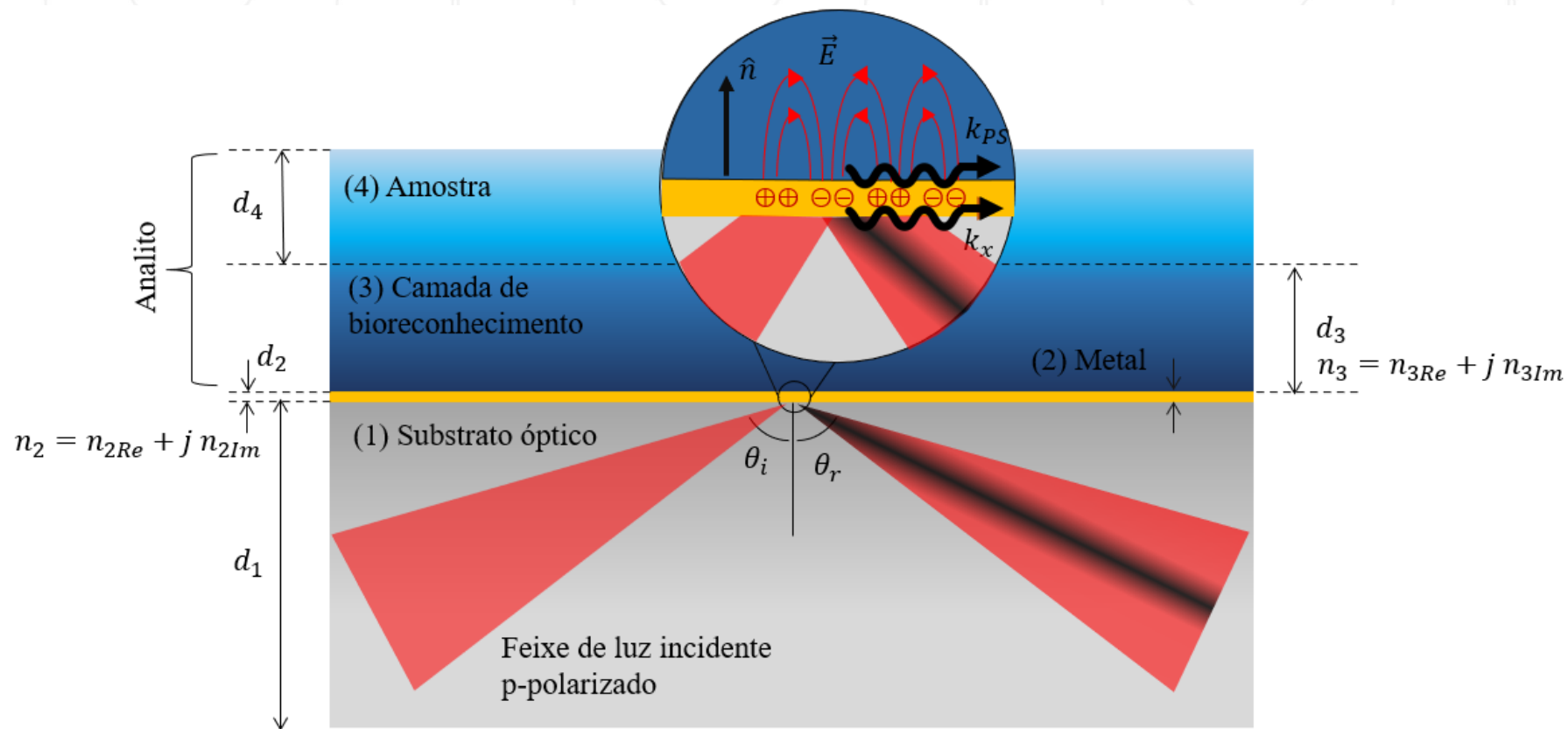
Introdução

- Condições necessárias para a excitação dos plásmons de superfície¹:
 - O feixe de luz incidente deve ser p-polarizado para que haja a ressonância;
 - A onda luminosa deve incidir na interface na condição de reflexão interna total;
 - A espessura da camada de metal dever ser inferior ao comprimento de onda incidente;
 - Conservação da energia e momento do campo eletromagnético durante a excitação dos plasmas de superfície;
 - Utilização de um meio dispersivo para acoplamento óptico, exemplos: prismas, grade de dispersão, guia de onda e fibra óptica;

¹ OLIVEIRA, Leiva Casemiro et al. Sistema computacional para biossensor baseado na ressonância de plasma de superfície. Universidade Federal de Campina Grande, 2011.

Introdução

Figura 1: Estrutura de um Biossensor SPR com quatro camadas.



Fonte: Adaptado a partir de OLIVEIRA *et. al.*² (2011).

² OLIVEIRA, Leiva Casemiro et al. Sistema computacional para biossensor baseado na ressonância de plasma de superfície. Universidade Federal de Campina Grande, 2011.

Introdução

- O vetor de onda dos plásmons de superfície³ :

$$k_{PS} = \frac{2\pi}{\lambda} \sqrt{\frac{\epsilon_{mr} n_3^2}{\epsilon_{mr} + n_3^2}}$$

- A componente tangencial do campo evanescente³ :

$$k_x = \frac{2\pi}{\lambda} n_1 \sin(\theta)$$

³ OLIVEIRA, Leiva Casemiro et al. Sistema computacional para biossensor baseado na ressonância de plasma de superfície. Universidade Federal de Campina Grande, 2011.

Introdução

- Na condição de ressonância⁴:

$$\frac{2\pi}{\lambda} \sqrt{\frac{\epsilon_{mr} n_3^2}{\epsilon_{mr} + n_3^2}} = \frac{2\pi}{\lambda} n_1 \sin(\theta_{SPR})$$

⁴ OLIVEIRA, Leiva Casemiro et al. Sistema computacional para biossensor baseado na ressonância de plasma de superfície. Universidade Federal de Campina Grande, 2011.

Modelagem Matemática

- Segundo OLIVEIRA *et. al.*⁵, dada uma estrutura multicamada, é possível descrever a transferência de uma onda entre os meios j para $j + 1$, por:

$$M_j = \begin{bmatrix} \cos(\beta_j) & -\frac{i}{q_j} \sin(\beta_j) \\ -iq_j \sin(\beta_j) & \cos(\beta_j) \end{bmatrix}$$

- Onde,

$$\beta_j = \frac{2\pi d_j}{\lambda} \sqrt{n_j^2 - n_1^2 \sin^2(\theta_i)}$$

$$q_j = \frac{\sqrt{n_j^2 - n_1^2 \sin^2(\theta_i)}}{n_j^2}$$

⁵ OLIVEIRA, Leiva Casemiro et al. Sistema computacional para biossensor baseado na ressonância de plasma de superfície. Universidade Federal de Campina Grande, 2011.

Modelagem Matemática

- Sendo um sistema de N camadas, conforme OLIVEIRA *et. al.*⁶:

$$M_{tot} = M_2 \cdot M_3 \cdot \dots \cdot M_{N-1} = \prod_{n=2}^{N-1} M_j = \begin{bmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{bmatrix}$$

- E,

$$r = \frac{(M_{11} + M_{12}q_N)q_1 - (M_{21} + M_{22}q_N)}{(M_{11} + M_{12}q_N)q_1 + (M_{21} + M_{22}q_N)}$$

$$R = |r|^2$$

⁶ OLIVEIRA, Leiva Casemiro et al. Sistema computacional para biossensor baseado na ressonância de plasma de superfície. Universidade Federal de Campina Grande, 2011.

Modelagem Matemática

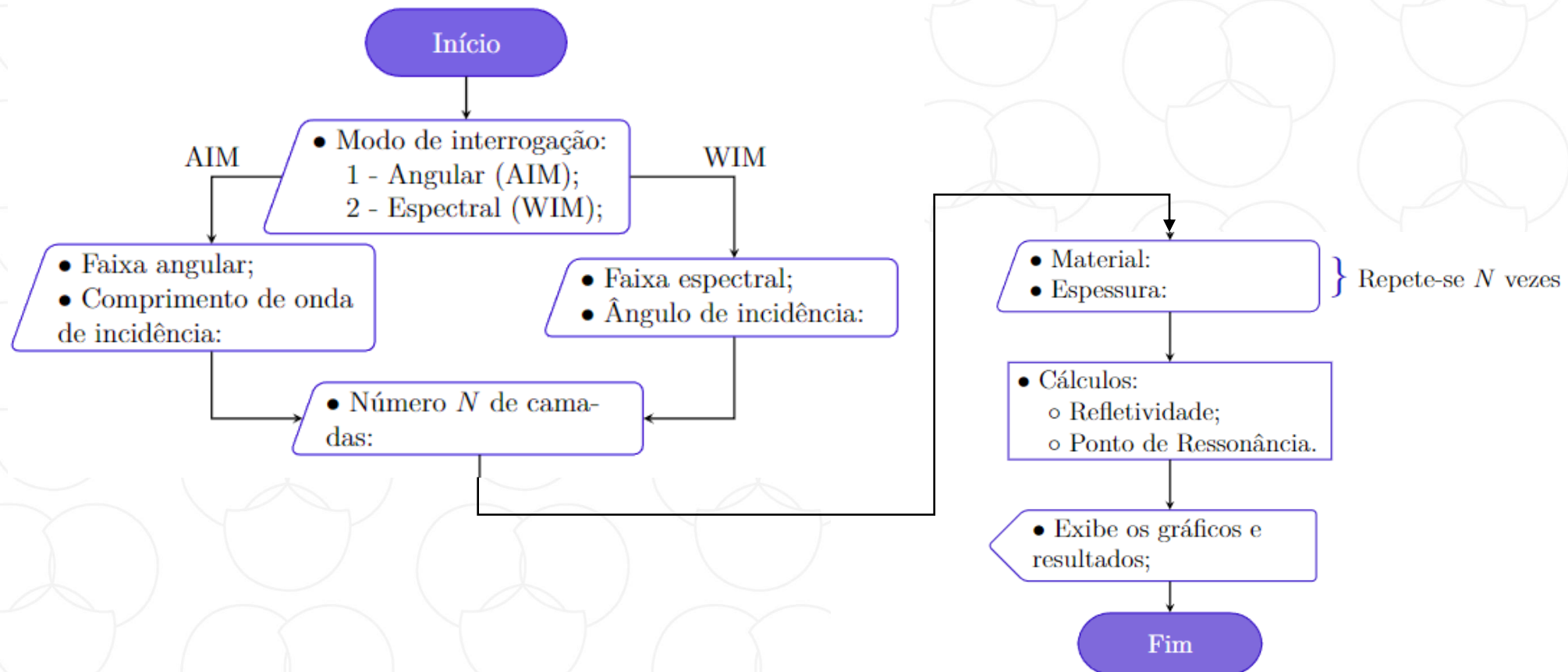
- Para modelar a dispersão dos substratos ópticos⁷:

$$n_p(\lambda) = \sqrt{1 + \frac{B_1\lambda^2}{\lambda^2 - C_1} + \frac{B_2\lambda^2}{\lambda^2 - C_2} + \frac{B_3\lambda^2}{\lambda^2 - C_3}}$$

⁷ POLYANSKIY, Mikhail. RefractiveIndex.INFO website. [S.l.: s.n.], 2022. Disponível em: <https://refractiveindex.info/>.

Código Computacional

Figura 2: Fluxograma de funcionamento do código computacional.



Fonte: Elaborado pelo autor.

Código Computacional

Figura 3: Módulos e bibliotecas utilizadas

```
1  from cmath import nan, pi
2  import numpy as np
3  import os
4  import Setting_Layers as sl
5  import Reflectivity as ref
6  import tools
```

Fonte: Elaborado pelo autor.

Código Computacional

- Módulo *Setting_Layers*:
 - *setLayers(layer);*
 - *set_index(material, wi);*
 - *set_index_custom();*
- módulo *tools*:
 - *point_SPR(reflet, ax_x, modo);*
 - *plot(x_i, R_Tm, resonance_point, modo);*
- módulo *Reflectivity*:
 - *Reflectivity(nLayers, d, index, theta_i, wavelenght).*

Código Computacional

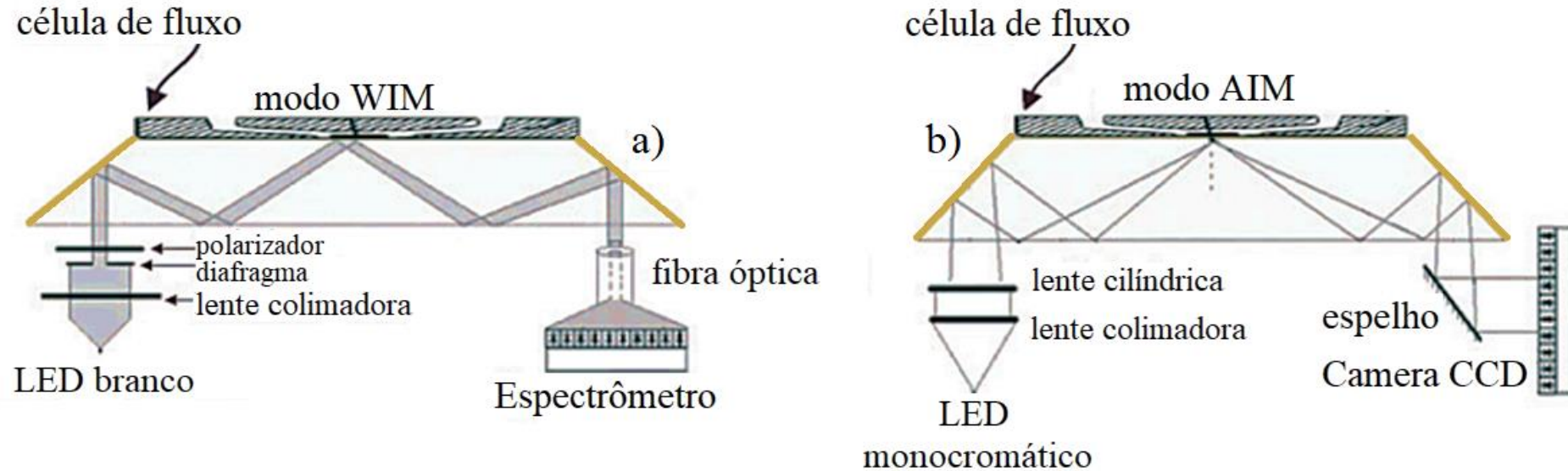
Figura 4: Função *point_SPR(reflet, ax_x, modo)*.

```
1 def point_SPR(reflet , ax_x, modo):  
2     # The 'Point_SPR' method returns the resonance point of the curve,  
3     # either the resonance angle in degrees or the resonance wavelength in  
4     nanometers  
5  
6     # Receives the position of the minimum point of the curve  
7     c = reflet.index(min(reflet))  
8     if modo == 1:  
9         return ax_x[c] * (180 / pi) # Returns the angle in degrees  
10    else:  
11        return ax_x[c] * 1E9 # Returns the wavelength in nanometers
```

Fonte: Elaborado pelo autor.

Cenário de Simulação

Figura 5: Esquemático representando a estrutura utilizada no experimento, considerando: (a) o modo WIM e (b) o modo AIM.



Fonte: Adaptado a partir de OLIVEIRA *et. al.*⁸ (2016).

⁸ OLIVEIRA, LC; MOREIRA, CS; NEFF, H; LIMA, AMN. Optical properties and instrumental performance of thin noble metal (Cu, Au, Ag) films near the surface plasmon resonance. Procedia Engineering, Elsevier, v. 168, p. 834–837, 2016

Cenário de Simulação

Figura 6: Resumo das especificações em cada situação analisada.

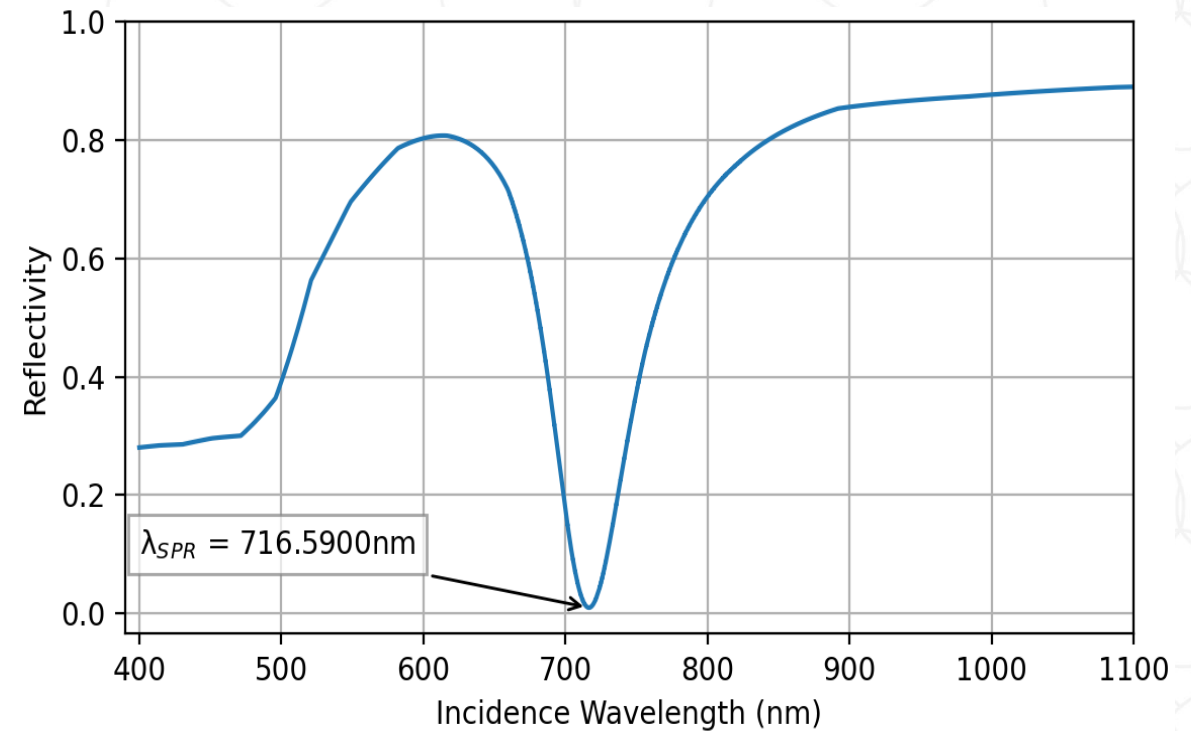
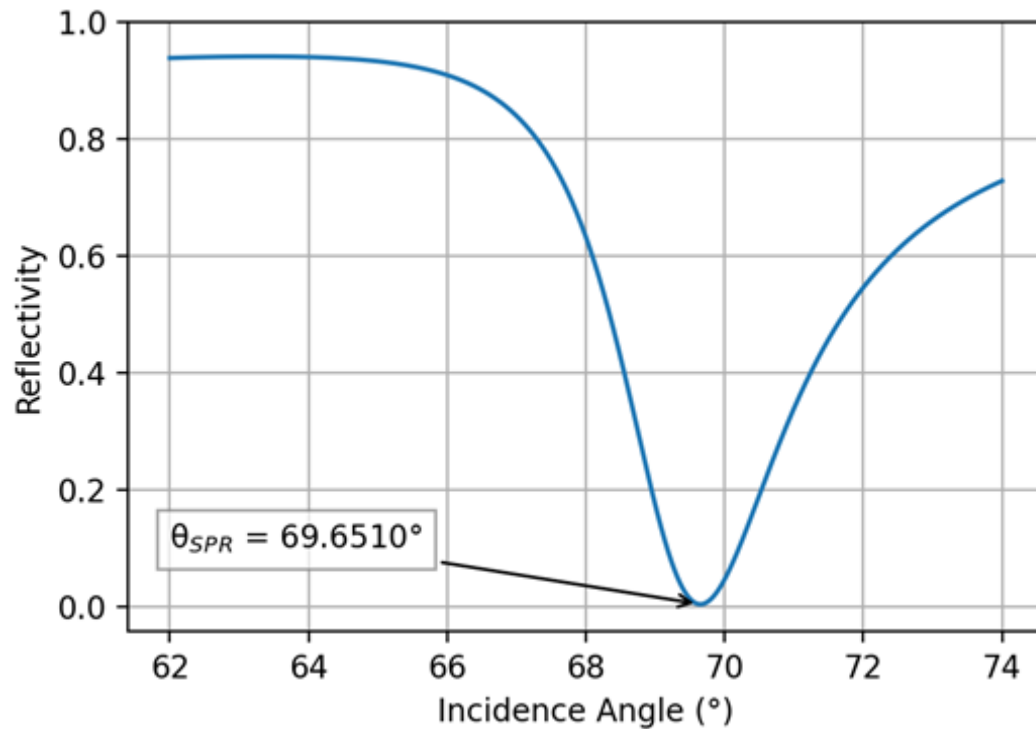
Modo AIM			
Cenário	Faixa angular (°)	Comprimento de onda de incidência (nm)	Espessura do filme fino (nm)
BK7/Au/H2O	62 - 74	670	50
BK7/Ag/H2O	62 - 74	670	50
BK7/Cu/Au/H2O	62 - 74	670	40 (Cu) + 5 (Au)
Modo WIM			
Cenário	Faixa espectral (nm)	Ângulo de incidência (°)	Espessura do filme fino (nm)
BK7/Au/H2O	400 - 1100	68	50
BK7/Ag/H2O	400 - 1100	68	50
BK7/Cu/Au/H2O	400 - 1100	68	40 (Cu) + 5 (Au)

Fonte: Adaptado a partir de OLIVEIRA *et. al.*⁹ (2016).

⁹ OLIVEIRA, LC; MOREIRA, CS; NEFF, H; LIMA, AMN. Optical properties and instrumental performance of thin noble metal (Cu, Au, Ag) films near the surface plasmon resonance. Procedia Engineering, Elsevier, v. 168, p. 834–837, 2016

Resultados

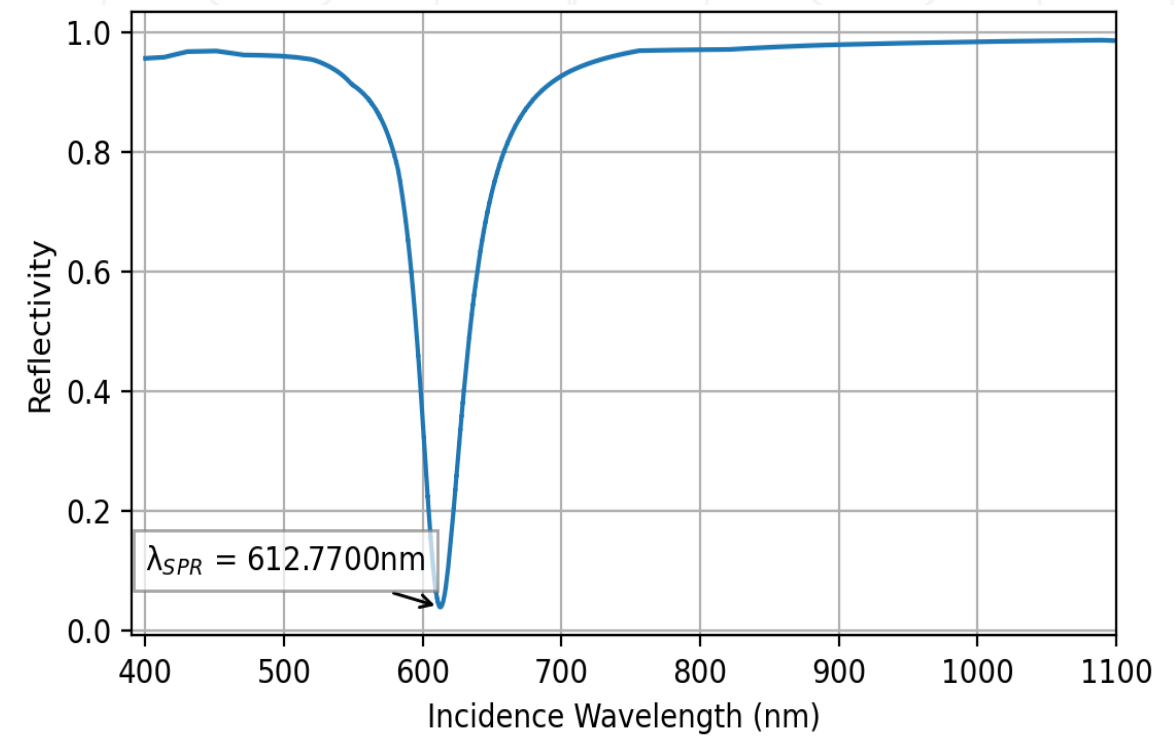
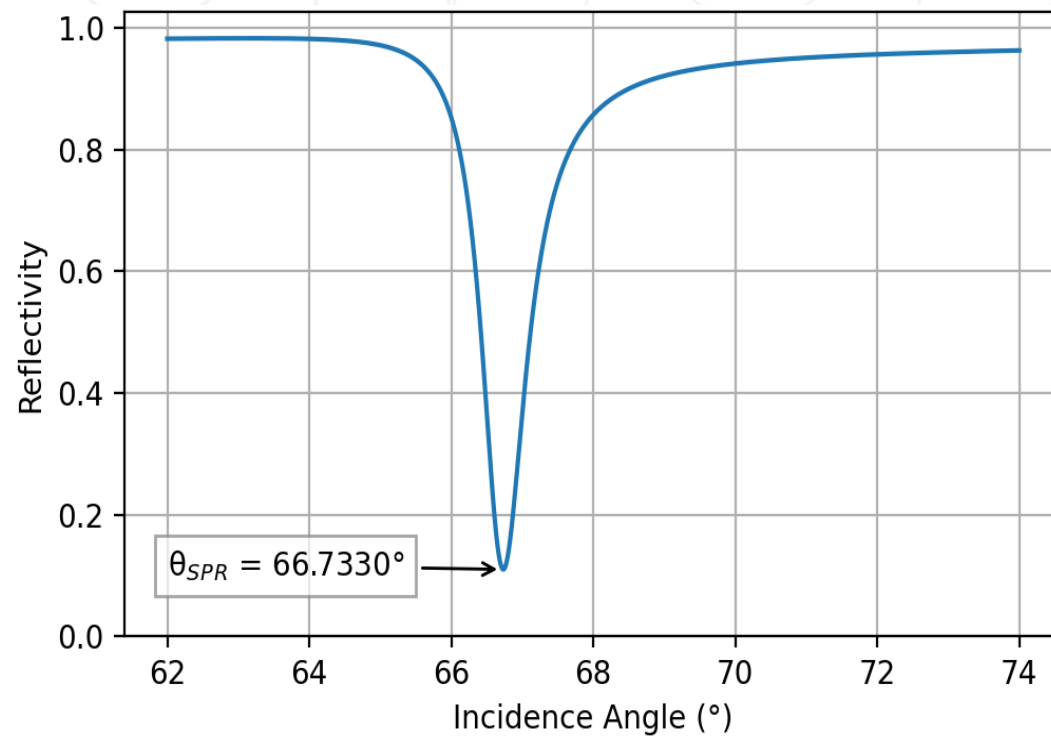
Figura 7: Curva de refletividade vs. Ângulo de incidência para uma configuração BK7/Au/H₂O nos modo AIM e WIM.



Fonte: Elaborado pelo autor.

Resultados

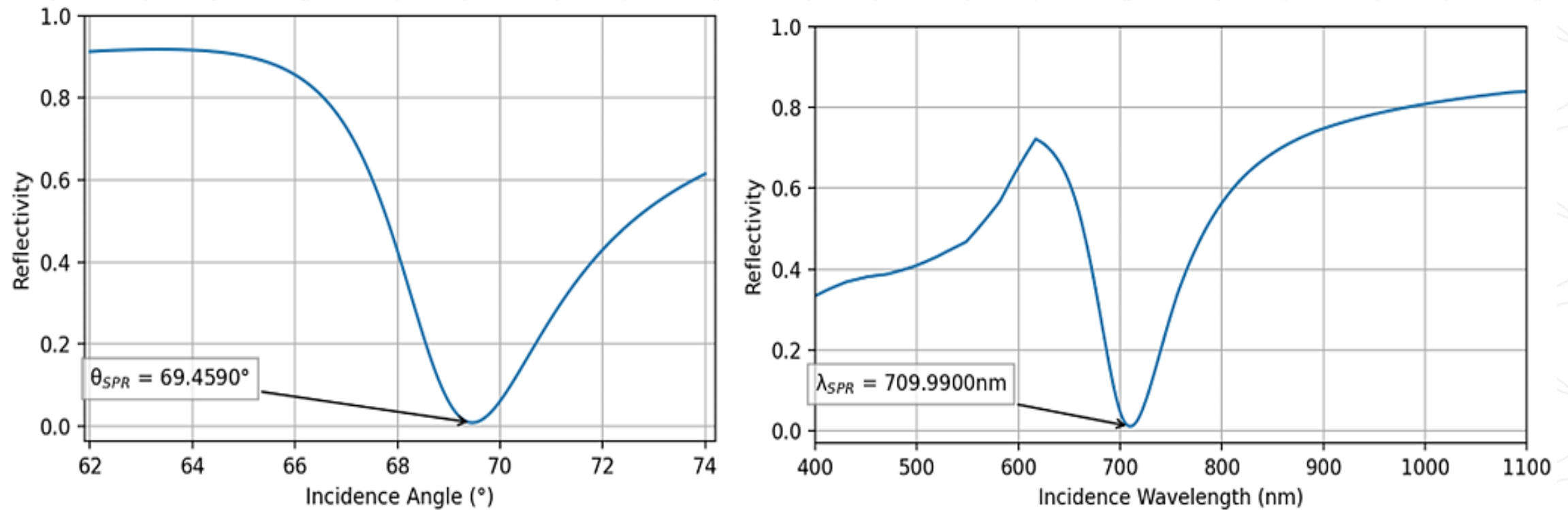
Figura 8: Curva de refletividade vs. Ângulo de incidência para uma configuração BK7/Ag/H₂O nos modo AIM e WIM.



Fonte: Elaborado pelo autor.

Resultados

Figura 9: Curva de refletividade vs. Ângulo de incidência para uma configuração BK7/Cu/Au/H₂O nos modo AIM e WIM.



Fonte: Elaborado pelo autor.

Resultados

Tabela 1: Resumo dos resultados obtidos nos seis cenários, considerando os modos de interrogação AIM e WIM.

Cenários	θ_{SPR} (°)	λ_{SPR} (nm)
BK7/Au/H ₂ O	69,65	716,59
BK7/Ag/H ₂ O	66,73	612,77
BK7/Cu/Au/H ₂ O	69,45	709,99

Fonte: Elaborado pelo autor.

Considerações Finais

- Foi possível compreender melhor as condições para excitação do efeito da ressonância de plásmons de superfície;
- O código computacional foi testado considerando cenários experimentais propostos por Oliveira *et. al*¹⁰.(OLIVEIRA et al., 2016);
- Obteve-se a curva de refletividade e os pontos onde ocorre a ressonância de plásmons de superfície em cada situação.

¹⁰ OLIVEIRA, LC; MOREIRA, CS; NEFF, H; LIMA, AMN. Optical properties and instrumental performance of thin noble metal (Cu, Au, Ag) films near the surface plasmon resonance. Procedia Engineering, Elsevier, v. 168, p. 834–837, 2016



Universidade Federal de Campina Grande - UFCG
Centro de Engenharia Elétrica e Informática - CEEI
Departamento de Engenharia Elétrica - DEE
TEEE Biossensores: Fundamentos e Aplicações 2022.1

Estudo da Modelagem Matemática do Efeito SPR e Aplicação na Construção de um Código Computacional para Simulação, na Configuração de Kretschmann, nos modos AIM e WIM.

Adeilson de Sousa Leal
Prof. Dr. Antônio M. N. Lima
Prof. Dr. Jomar S. Vasconcelos

Campina Grande, PB. 31 de outubro de 2022.