

UNIVERSIDADE FEDERAL DE CAMPINA GRANDE CENTRO DE ENGENHARIA ELÉTRICA E INFORMÁTICA DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA ELÉTRICA TEEE BIOSENSORES: FUNDAMENTOS E APLICAÇÕES 2022.1

Estudo Teórico e Desenvolvimento de um Código Computacional para o Cálculo da Curva de Refletividade de um Sensor SPR Baseado na Configuração de Kretschmann, operando nos Modos AIM e WIM.

> Adeilson de Sousa Leal Prof. Dr. Antônio Marcus Nogueira Lima Prof. Dr. Jomar Sales Vasconcelos

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	2
2	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	3
2.1	POLARIZAÇÃO DA LUZ	3
2.2	REFLEXÃO INTERNA TOTAL DA LUZ	4
2.3	O FENÔMENO DA RESSONÂNCIA DE PLÁSMONS DE SUPERFÍCIE	
2.4	MODELAGEM MATEMÁTICA	6
2.5	MODO DE INTERROGAÇÃO ANGULAR	7
2.6	MODO DE INTERROGAÇÃO POR COMPRIMENTO DE ONDA .	7
2.7	EQUAÇÕES DE DISPERSÃO DOS MATERIAIS	8
3	CÓDIGO COMPUTACIONAL	9
4	CENÁRIO DE VALIDAÇÃO	13
5	RESULTADOS	15
6	CONCLUSÕES	17
	REFERÊNCIAS	18

1 INTRODUÇÃO

Neste trabalho, é realizado um estudo teórico sobre a formulação matemática do efeito da Ressonância de Plásmons de Superfície (SPR - Surface Plasmons Resonance), bem como, é feita a proposição de um código computacional em linguagem Python, para cálculo da curva de refletividade para um sensor SPR, baseado na configuração de Kretschmann, tanto no modo de interrogação angular (AIM - Angular interrogation mode) com no modo de interrogação por comprimento de onda (WIM - Wavelength Interrogation Mode).

Para tanto, foram estudados conceitos da propagação de ondas eletromagnéticas em estruturas multicamadas, levando em conta a análise de Fresnel. Foram analisadas também, as condições básicas para a excitação dos plásmons de superfície, juntamente a isso, foi estudado sobre os modos de interrogação, angular e por comprimento de onda, e como realizar a implementação dos mesmos.

O código computacional escrito em Python fornece a curva de refletividade para um sensor SPR baseado na configuração de Kretschmann, tanto no modo AIM como WIM. O código permite ao usuário inserir os respectivos parâmetros para a simulação, como ângulos de incidência e comprimento de onda do feixe de luz incidente, no modo AIM, e no modo WIM, faixa espectral de analise e ângulo de incidência. Além disso é possível ao usuário escolher os materiais para cada camada, com suas respectivas espessuras. Por fim, o código calcula a curva de refletividade, baseada na abordagem matricial das equações de Fresnel, e fornece os resultados gráficos e numéricos, em termos de ângulo de ressonância (θ_{SPR}) — ou comprimento de onda de ressonância (λ_{SPR}).

Para modelar a dispersão da onda eletromagnética nos materiais em função do comprimento de onda, foi utilizada a base de dados encontrada no website RefractiveIndex.INFO (POLYANSKIY, 2022). E, para validação do código computacional, os cenários apresentados no trabalho de Oliveira et. al. (OLIVEIRA et al., 2016) foram simulados.

2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

Nesta seção serão tratados dos conceitos básicos para a geração do efeito SPR, as condições básicas para a excitação dos plásmons de superfície, os modos de interrogação, angular e por comprimento de onda, bem como, é feita uma descrição matemática da propagação de ondas eletromagnéticas em estruturas multicamadas, levando em conta a análise de Fresnel, considerando sua forma matricial. E ainda, a modelagem empregada para calcular a dispersão nos materiais empregados para construção do sensor.

2.1 POLARIZAÇÃO DA LUZ

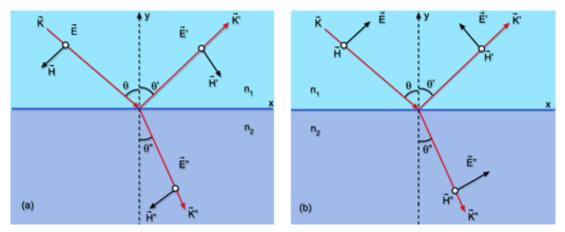
A luz ao se propagar por um meio possui a intensidade e a direção do vetor campo elétrico variando no tempo. A polarização de uma onda eletromagnética consiste na curva traçada pelo vetor campo elétrico (OLIVEIRA et al., 2011).

Ao observar a Figura 1, considera-se plano de incidência o plano formado pelo feixe de luz incidente e vetor normal à superfície. Considerando a polarização linear, podem ser classificados dois tipos:

- Transversal Magnética (TM) ou tipo p quando o campo magnético incide perpendicularmente ao plano de incidência enquanto o campo elétrico incide paralelamente;
- Transversal Elétrica (TE) ou tipo s quando o campo magnético incide paralelamente ao plano de incidência enquanto o campo elétrico incide perpendicularmente;

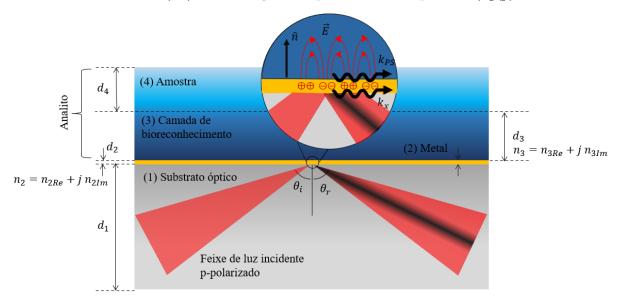
Ambos podem ser visualizados na Figura 1.

Figura 1 – Reflexão e refração de uma onda a) TE (s-polarizada) e b) TM (p-polarizada).



Fonte: (ZILIO, 2004)

Figura 2 – Estrutura de um Biossensor SPR com quatro camadas em que (1) é o meio dispersivo, (2) metal, (3) e (4) representam o analito sob análise. Reflexão interna total, com destaque para o campo evanescente gerado na interface entre os meios com diferentes índices de refração, a componente horizontal do feixe de luz (k_x) e a oscilação dos plásmons de superfície (k_{PS}) .



Fonte: Adaptado de Oliveira et. al. (OLIVEIRA et al., 2011).

2.2 REFLEXÃO INTERNA TOTAL DA LUZ

Quando uma onda luminosa desloca-se de um meio com alto índice de refração (n_1) para um meio com índice de refração menor (n_2) , a luz é parcialmente refletida e parcialmente refratada, segundo a lei de Snell (OLIVEIRA *et al.*, 2011):

$$n_1 sen(\theta_1) = n_2 sen(\theta_2) \tag{1}$$

Entretanto, acima de um determinado ângulo, a luz não é mais refratada, e uma reflexão interna total é observada. O ângulo de incidência crítico (θ_c) para o qual a reflexão interna total ocorre é dado por (OLIVEIRA et al., 2011):

$$\theta_c = arcsen(\frac{n_1}{n_2}). \tag{2}$$

O que acontece em certas circunstâncias é que uma componente da onda eletromagnética penetra no meio de menor índice de refração criando um campo elétrico evanescente. Esse efeito é melhor observado quando na superfície de menor índice de refração é depositado um filme metálico, tal como apresentado em destaque na Figura 2 (OLIVEIRA et al., 2011).

2.3 O FENÔMENO DA RESSONÂNCIA DE PLÁSMONS DE SUPERFÍCIE

Segundo Oliveira et. al, ao se incidir um feixe de luz sobre o metal, os elétrons livres movem-se devido a presença do campo elétrico e os íons positivos deixados para trás exercem uma força de atração sobre os elétrons, tentando puxá-los de volta para suas posições originais. Essa interação é o que faz oscilar os plásmons, surgindo uma onda de plasma. Quando essa oscilação ocorre na superfície de um metal denomina-se onda de plásmons de superfície (OLIVEIRA et al., 2011). Nesse caso os metais mais apropriados são aqueles cuja permissividade elétrica complexa possui valores elevados e negativos, para a parte real, e valores baixos para a parte imaginaria. Entre eles, são encontramos os metais nobres como a prata, o ouro, o cobre e o alumínio, onde o ouro e a prata são os metais mais utilizados devido ao fato de suas ressonâncias de plásmons de superfície ocorrerem no espectro de luz visível (OLIVEIRA et al., 2011).

Na Figura 2, temos a direção e o sentido do vetor de onda de plásmons, denotado por k_{PS} (OLIVEIRA $et\ al.,\ 2011$):

$$k_{PS} = \frac{2\pi}{\lambda} \sqrt{\frac{\epsilon_{mr} n_3^2}{\epsilon_{mr} + n_3^2}},\tag{3}$$

onde, λ é o comprimento da onda luminosa incidente, ϵ_{mr} é a parte real da permissividade elétrica da superfície do metal e n_3 é o índice de refração do analito (OLIVEIRA et al., 2011).

Para que haja a excitação dos plásmons de superfície, isto é, a absorção da energia proveniente do feixe de luz para deslocar os elétrons, algumas condições devem ser verificadas: (1) Uma vez que a onda de plásmons de superfície possui polarização transversal magnética (TM) (HOMOLA; YEE; GAUGLITZ, 1999), o feixe de luz incidente deve possuir a mesma polarização para que haja a ressonância; (2) A onda luminosa deve incidir na interface na condição de reflexão interna total; (3) A espessura da camada de metal dever ser inferior ao comprimento de onda incidente, pois o campo elétrico evanescente penetra, no máximo, a uma distância igual ao comprimento de onda da luz incidente, deste modo, caso tenhamos uma superfície metálica muito espessa, não será possível excitar os plásmons de superfície; (4) Conservação da energia e momento do campo eletromagnético durante a excitação dos plasmas de superfície; e (5) O vetor do feixe luminoso incidente deve ser maior que o vetor de oscilação dos plásmons de superfície, pois os mesmos não podem ser excitados por uma luz proveniente de um meio (ex.: ar) incidindo diretamente na interface metal/dielétrico, porque as condições de conservação de energia e momento não podem ser satisfeitas simultaneamente. Por esta razão, faz-se necessário a utilização de um meio dispersivo, exemplos: prismas, grade de dispersão, guia de onda e fibra óptica (OLIVEIRA et al., 2011).

A ressonância ocorre quando a componente do campo evanescente (k_x) oscila na mesma frequência e amplitude dos plásmons de superfície, ou seja, quando o vetor k_x

iguala-se ao vetor k_{PS} . O valor da componente do campo evanescente na direção dos plásmons é (OLIVEIRA $et\ al.$, 2011):

$$k_x = \frac{2\pi}{\lambda} n_1 sen(\theta), \tag{4}$$

em que n_1 é o índice de refração do meio dispersivo utilizado e θ , o ângulo de incidência.

Assim, na ressonância tem-se:

$$\frac{2\pi}{\lambda} \sqrt{\frac{\epsilon_{mr} n_3^2}{\epsilon_{mr} + n_3^2}} = \frac{2\pi}{\lambda} n_1 sen(\theta_{SPR})$$
 (5)

Nesse momento a energia transportada pelo feixe luminoso é absorvida pelos elétrons o que gera uma diminuição na intensidade da onda luminosa refletida.

2.4 MODELAGEM MATEMÁTICA

Dada uma estrutura multicamada, conforme apresentado na Figura 2, encontra-se na literatura uma formulação para descrever a transferência de uma onda entre os meios j para j+1, formulação esta, descrita na forma matricial (OLIVEIRA et al., 2011):

$$M_{j} = \begin{bmatrix} \cos(\beta_{j}) & -\frac{i}{q_{j}} \operatorname{sen}(\beta_{j}) \\ -iq_{j} \operatorname{sen}(\beta_{j}) & \cos(\beta_{j}) \end{bmatrix}, \tag{6}$$

 M_n é a chamada matriz de transferência do sistema, b_n e q_n são os valores de admissão (absorbância), e o deslocamento de fase em cada camada, respectivamente, e são calculados pelas expressões (OLIVEIRA *et al.*, 2011):

$$\beta_j = \frac{2\pi d_j}{\lambda} \sqrt{n_j^2 - n_1^2 \operatorname{sen}^2(\theta_i)},\tag{7}$$

$$q_j = \frac{\sqrt{n_j^2 - n_1^2 \operatorname{sen}^2(\theta_i)}}{n_j^2} \tag{8}$$

em que: $n_j = n_{jre} + i n_{jim}$: índice de refração complexo do meio j; θ_i angulo de incidência da luz que se propaga; λ : comprimento de onda da luz incidente; d_j : a espessura da camada.

Desta forma, a transferência total pode ser calculada em função da matriz de transferência de cada interface entre os meios, pela formula (OLIVEIRA et al., 2011):

$$M_{tot} = M_2 \cdot M_3 \cdot \dots \cdot M_{N-1} = \prod_{n=2}^{N-1} M_j = \begin{bmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{bmatrix}$$
(9)

Assim, por meio da matriz de transferência total M_{tot} (Eq. (9)) e da equação Eq. (8), pode-se calcular a amplitude total refletida no sistema de N camadas (OLIVEIRA $et\ al.$, 2011):

$$r = \frac{(M_{11} + M_{12}q_N)q_1 - (M_{21} + M_{22}q_N)}{(M_{11} + M_{12}q_N)q_1 + (M_{21} + M_{22}q_N)},$$
(10)

onde r é denominado coeficiente de Fresnel de reflexão, e a refletividade R é dada por:

$$R = |r|^2 \tag{11}$$

2.5 MODO DE INTERROGAÇÃO ANGULAR

No modo de interrogação angular (AIM-Angular Interrogation Mode), o espectro do feixe incidente é mantido o mais estreito possível, idealmente, fixo em um comprimento de onda específico, variando-se o ângulo de incidência e consequentemente a componente k_x do vetor de onda, até que a condição de ressonância seja alcançada. Conhecendo o ângulo em que ocorreu a ressonância, pode-se determinar o índice de refração (IR) do meio sobre a camada sensível. A partir de (4) obtêm-se a expressão para o IR:

$$n_3 = \sqrt{\frac{\epsilon_{mr}(n_1 sen(\theta_{SPR}))^2}{\epsilon_{mr} - (n_1 sen(\theta_{SPR}))^2}}$$
(12)

2.6 MODO DE INTERROGAÇÃO POR COMPRIMENTO DE ONDA

No modo de interrogação de comprimento de onda (WIM - Wavelength Interrogation Mode), o ângulo de incidência é mantido constante. O espectro da fonte luminosa é empregado para medir a refletividade como função do comprimento de onda. Devido a dispersão do metal, as condições de ressonância dependem do comprimento de onda e é evidenciada por um valor mínimo de reflexão para um comprimento de onda específico no espectro da luz.

A partir de Eq. (4), é possível obter as expressões:

$$\epsilon_3 = \frac{\epsilon_m n_1^2 sen(\theta)^2}{\epsilon_m - n_1^2 sen(\theta)^2} \tag{13}$$

$$\epsilon_3 = \frac{(\epsilon_{mr} + i\epsilon_{mi})n_1^2 sen(\theta)^2}{(\epsilon_{mr} + i\epsilon_{mi}) - n_1^2 sen(\theta)^2}$$
(14)

Onde, após alguns rearranjos matemáticos, obtêm-se a permissividade complexa do analito para o modo WIM:

$$\epsilon_{3} = \frac{\epsilon_{mr} n_{1}^{2} sen(\theta)^{2} + (\epsilon_{mr} n_{1}^{2} sen(\theta)^{2}) + \epsilon_{mi}^{2} n_{1}^{2} sen(\theta)^{2}}{(\epsilon_{mr} - n_{1}^{2} sen(\theta)^{2})^{2} + \epsilon_{mi}^{2}} - i \frac{\epsilon_{mi} n_{1}^{4} sen(\theta)^{4}}{(\epsilon_{mr} - n_{1}^{2} sen(\theta)^{2})^{2} + \epsilon_{mi}^{2}}$$
(15)

e então pode-se obter,

$$n_3 = \sqrt{\sqrt{\epsilon_{3r}^2 + \epsilon_{3i}^2 + \epsilon_{3r}^2/2}} \tag{16}$$

2.7 EQUAÇÕES DE DISPERSÃO DOS MATERIAIS

Para modelagem da dispersão no prisma, foi considerado a formulação proposta por Sellmeier:

$$n_{\rm p}(\lambda) = \sqrt{1 + \frac{B_1 \lambda^2}{\lambda^2 - C_1} + \frac{B_2 \lambda^2}{\lambda^2 - C_2} + \frac{B_3 \lambda^2}{\lambda^2 - C_3}},$$
 (17)

considerando os coeficientes B_j e C_j (j = 1, 2, 3), específicos para cada material, conforme apresentado na tabela 1. Os coeficientes foram obtidos na base de dados do website RefractiveIndex.INFO (POLYANSKIY, 2022).

A modelagem da dispersão escolhida para descrever o índice de refração dos materiais do filme fino, em função do comprimento de onda, baseou-se na interpolação dos pontos do gráfico obtido a partir dos resultados experimentais de Johnson e Christy (JOHN-SON; CHRISTY, 1972), disponibilizados no website RefractiveIndex.INFO (POLYANS-KIY, 2022).

Tabela 1 – Coeficientes B_j e C_j (j=1,2,3) para a modelagem da dispersão em cada material.

Material	B_1	B_2	B_3	$C_1 \ (\mu m^2)$	$C_2 (\mu m^2)$	$C_3 (\mu m^2)$
BK7	1,03961212	0,231792344	1,01046945	$6,00069867 \cdot 10^{-3}$	$2,00179144 \cdot 10^{-2}$	103,560653
Sílica	0,696166300	$0,\!407942600$	0,897479400	$4,67914826 \cdot 10^{-3}$	$1,35120631 \cdot 10^{-2}$	97,9340025
Safira sintética (Al_2O_3)	1,43134930	0,65054713	5,3414021	$5{,}2799261{\cdot}10^{-3}$	$1,\!42382647 \cdot 10^{-2}$	325,017834
SF10	1,62153902	$0,\!256287842$	1,64447552	0,0122241457	0,0595736775	147,468793

Fonte: $Refrative\ index.INFO\ (POLYANSKIY,\ 2022)$

3 CÓDIGO COMPUTACIONAL

Neste trabalho é apresentado um código computacional, escrito em *Python*, que fornece a curva de refletividade para um sensor SPR baseado na configuração de Kretschmann, tanto no modo AIM como WIM.

Levando em conta o princípio de modularidade, o código computacional conta com a implementação de três módulos auxiliares ("Setting_Layers", "Reflectivity" e "tools"), os quais desempenham papéis específicos dentro do código principal (Simulador SPR.py). Conforme apresentado em Listing 3.1, além destes, foram utilizados alguns módulos básicos do Python, como o Numpy e cmath, para a utilização de constantes, funções matemáticas e manipulação de matrizes, e o módulo os, utilizado nesse caso, apenas para acesso a uma função de limpar a tela do terminal.

Listing 3.1 – Importação das bibliotecas e módulos necessários.

```
from cmath import nan, pi
import numpy as np
import os
import Setting_Layers as sl
import Reflectivity as ref
import tools
```

O módulo Setting Layers possui três funções utilizadas no código:

- I) setLayers(layer): é chamada dentro de um loop com número de repetições igual ao número de camadas da estrutura a ser simulada. Recebe o argumento 'layer', indicando a posição da camada em ordem crescente (ex.: layer = 0, representa a primeira camada, e assim sucessivamente até layer = n 1, indicando a última camada na estrutura de n camadas) e retorna para duas variáveis tipo list os dados de referentes a espessura da camada em nanômetros e o código do material informados pelo usuário, conforme descrito em Listing 3.2. A camada layer = 0 é considerada a camada do substrato óptico e por padrão recebe a espessura de valor unitário, conforme indicado na linha 7 da respectiva Listing, já que a espessura do substrato é muito maior do que a espessura do filme fino e não contribui efetivamente para o cálculo da refletividade.
- II) set_index(material, wi): tem a finalidade de calcular o índice de refração da camada solicitada dado um comprimento de onda específico. Ela recebe o código do material (material) e o comprimento de onda (wi) e, por meio da base de dados contida nessa função, retorna o índice de refração complexo do material da respectiva camada. Os meios utilizados para o cálculo dos índices de refração são descritos na seção 2.7 e podem ser obtidos no web site Refractive index.INFO (POLYANSKIY, 2022).
- III) set_index_custom(): é utilizada para realizar a inserção, pelo usuário, de um

índice de refração específico, disponível apenas para o modo de interrogação AIM, uma vez que no modo WIM não é possível calcular esse índice de refração em função do comprimento de onda.

Listing 3.2 – Função setLayers(layer).

```
def setLayers(layer):
      if layer = 0:
2
           print ("\n===
                                  Set Layers Characteristics
5
                                                                            =\n\n"
                        ==== 1st Layer - Optical substrate ====\n")
6
           material = int(input(f"\n1 - BK7 2 - Silica 3 - N-F2)
      Synthetic sapphire (Al2O3) "
                                  f" n5 - SF10 6 - FK51A 7 - N-SF14 8 -
      Acrylic SUVT "
                                  f" \setminus n9 - Other - (Custom only in AIM mode)
10
                                  f " \n \n
11
12
      else:
           print (
13
                                           {layer+1}st Layer
14
             ——\n " )
           material = int(input(f'' \setminus n 1 - BK7)) 2 - Silica
15
                                                                     3 - N - F2
        4 - Synthetic sapphire (Al2O3) "
                                  f'' \setminus n = 5 - SF10 = 6 - FK51A
                                                                      7 - N-SF14
16
        8 - Acrylic SUVT"
                                  f" \setminus n 9 - PVA  10 - Glycerin 11 - Quartz
17
       12 - Aluminium"
                                  f" \ n13 - Gold \ 14 - Silver \ 15 - Copper
       16 - \text{Water } (RI = 1.33)"
                                  f" \ 17 - Air   18 - LiF   19 - Cytop
19
       20 - Other - (Custom only in AIM mode) \n\mbox{nMaterial} \rightarrow ")
20
           d = float(input("Thickness (nm): ")) * 1e-9
21
22
      return d, material
```

O módulo *tools* possui duas funções:

- I) $point_SPR(reflet, ax_x, modo)$: recebe a lista com os valores de refletividade (reflet), procura a posição com o valor mínimo, que indica a condição de ressonância, e indica na lista de ângulos de incidência, ou comprimentos de onda de incidência, ax_x a posição correspondente ao mínimo da curva, retornando assim, o ponto de ressonância $(\theta_{SPR} \text{ ou } \lambda_{SPR})$, sendo a correspondência feita mediante o parâmetro modo, conforme apresentado na Listing 3.3
- II) plot(x_i, R_Tm, resonance_point, modo): é utilizada para traçar a curva de

refletividade. Recebe as variáveis tipo *list, x_i e R_Tm*, que correspondem a lista com os ângulos - ou comprimentos de onda - de incidência e a lista com os valores de refletividade, respectivamente, e, a partir delas, traça a curva de refletividade, indicando o ponto de mínimo, armazenado na variável *resonance_point*. A correspondência entre os modos AIM e WIM é feita pelo parâmetro *modo*.

Listing 3.3 – Função point_SPR(reflet, ax_x, modo).

```
def point_SPR(reflet, ax_x, modo):

# The "Point_SPR" method returns the resonance point of the curve,

# either the resonance angle in degrees or the resonance wavelength in nanometers

# Receives the position of the minimum point of the curve 
c = reflet.index(min(reflet))

if modo == 1:

return ax_x[c] * (180 / pi) # Returns the angle in degrees

else:

return ax_x[c] * 1E9 # Returns the wavelength in nanometers
```

O módulo Reflectivity possui apenas uma função: Reflectivity(nLayers, d, index, theta_i, wavelenght), que recebe o número de camada, nLayers, a espessura e o índice de refração de cada camada, de index, respectivamente, um ângulo e um comprimento de onda específicos, theta_i e wavelenght, e, a partir deles, utilizando a modelagem matemática descrita na seção 2.4, calcula-se o valor de refletividade para uma condição particular de ângulo e comprimento de onda de incidência na estrutura multicamadas. Esse valor de refletividade é armazenado em uma variável tipo list, que é utilizada pela função plot(), já apresentada anteriormente, para traçar a curva em função do ângulo ou comprimento de onda de incidência.

Desse modo, o código computacional permite ao usuário inserir os parâmetros para a simulação, como ângulos de incidência e comprimento de onda do feixe de luz incidente, no modo AIM, (e no modo WIM, faixa espectral de analise e ângulo de incidência), escolher os materiais para cada camada, com suas respectivas espessuras, e assim, calculase a curva de refletividade, baseada na abordagem matricial das equações de Fresnel, e fornece os resultados gráficos e numéricos, em termos de ângulo de ressonância (θ_{SPR}) — ou comprimento de onda de ressonância (λ_{SPR}).

Na Figura 3 é apresentado o fluxograma de funcionamento do código computacional implementado.

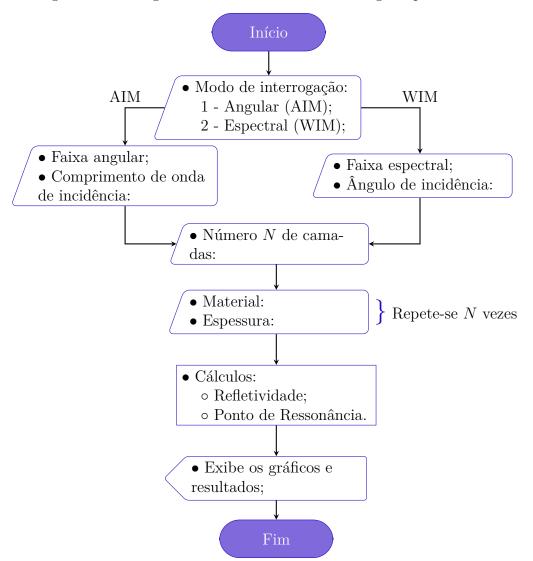


Figura 3 – Fluxograma de funcionamento do código implementado.

Fonte: Elaborado pelo autor.

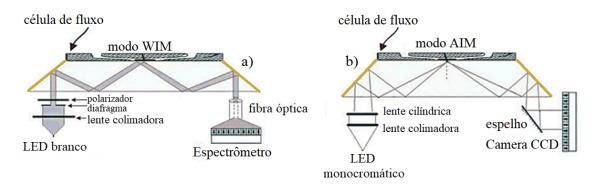
4 CENÁRIO DE VALIDAÇÃO

Os cenários de validação considerados foram baseados no trabalho experimental de Oliveira et.al (OLIVEIRA et al., 2016), que consiste na verificação das propriedades ópticas e desempenho instrumental de filmes finos de metais nobres em sensores SPR. As estruturas são compostas de prismas de BK7, revestidos com camadas de filmes finos metálicos, da ordem de 50 nm, aproximadamente, de ouro, prata e cobre, onde foram abordados, tanto o modo de interrogação angular como o modo de interrogação por comprimento de onda.

Vale ressaltar, que para esse código computacional, foram considerados condições ideais de simulação, onde o feixe de luz incidente, no modo AIM, é considerado monocromático com faixa extremamente estreita, e no modo WIM é considerada uma potência óptica uniformemente distribuída em todo o espectro analisado. Além disso, considera-se todas as condições de contorno satisfeitas para uma onda plana incidente.

Na Figura 4 é apresentado um esquemático das configurações utilizadas.

Figura 4 – Esquemático representando a estrutura utilizada no experimento, considerando (a) o modo WIM e (b) o modo AIM.



Fonte: Adaptado de Oliveira et. al. (OLIVEIRA et al., 2016)

Utilizando esta estrutura, os cenários analisados foram subdivididos em seis situações distintas, considerando o revestimento com filme fino de ouro, modo AIM e modo WIM, considerando o filme fino de prata, modos AIM e WIM, e considerando o filme fino de cobre com uma película de ouro, modos AIM e WIM. Um resumo das especificações é apresentado na Tabela 2. Os resultados obtidos com o código computacional são apresentados no capítulo seguinte.

Tabela 2 – Resumo das especificações em cada cenário analisado.

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

Fonte: Elaborado pelo autor a partir de Oliveira et. al. (OLIVEIRA et al., 2016).

5 RESULTADOS

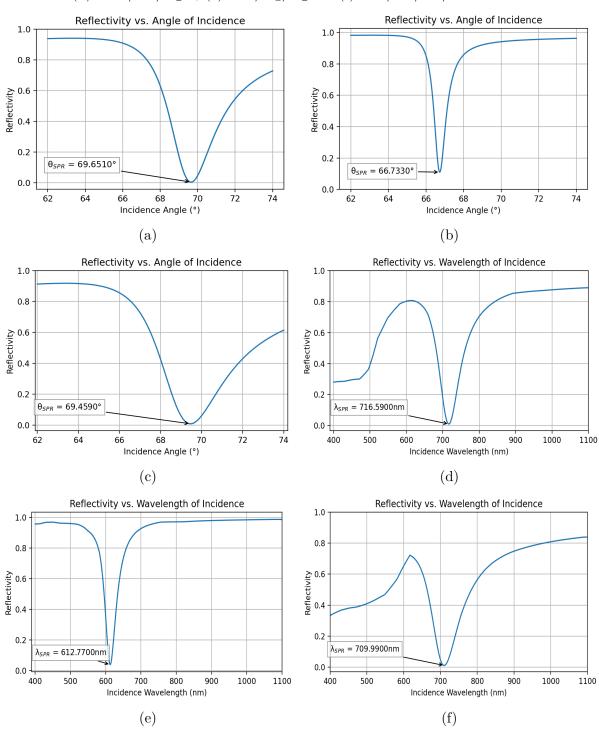
Na Figura 5 são apresentadas as curvas de refletividade em cada cenário, as Figuras 5a,5b e 5c, considerando o modo AIM, e Figuras 5d, 5e e 5f, considerando o modo WIM. Em cada caso foi avaliado o ponto de ressonância, θ_{SPR} ou λ_{SPR} , e na Tabela 3 é feito uma síntese dos resultados.

Tabela 3 – Resumo dos resultados obtidos nos seis cenários, considerando os modos de interrogação AIM e WIM.

Cenário	$ heta_{SPR}(^{\circ})$	λ_{SPR} (nm)
BK7/Au/H2O	69,65	716,59
$\mathrm{BK7/Ag/H2O}$	66,73	612,72
BK7/Cu/Au/H2O	$69,\!45$	709,99

Fonte: Elaborado pelo autor.

Figura 5 – Curvas de reflectância em função do ângulo de incidência nas configurações: (a) $BK7/Au/H_2O$, (b) $BK7/Ag/H_2O$ e (c) $BK7/Cu/Au/H_2O$; e curvas de reflectância em função do comprimento de onda de incidência nas configurações: (d) $BK7/Au/H_2O$, (e) $BK7/Ag/H_2O$ e (f) $BK7/Cu/Au/H_2O$.



Fonte: Elaborado pelo autor.

6 CONCLUSÕES

Através deste estudo teórico realizado, foi possível compreender melhor as condições para excitação do efeito da ressonância de plásmons de superfície, onde é necessário haver um feixe de luz p-polarizado incidindo em uma condição de reflexão interna total, respeitando as condições de conservação de energia e momento do campo eletromagnético, para que assim, haja uma combinação entre o vetor de onda dos plásmons de superfície e o vetor de onda do feixe de luz incidente e a energia luminosa seja absorvida pelos elétrons, gerando assim uma diminuição na intensidade da luz refletida.

Concluiu-se que por meio da análise de Fresnel é possível descrever expressões matriciais que modelam a propagação de uma onda eletromagnética em um sistema multicamadas, as quais foram utilizadas para a implementação de um código computacional em linguagem *Python* para o cálculo da curva de refletividade em estruturas na configuração de Kretschmann, nos modos de interrogação AIM e WIM.

O código computacional foi testado considerando cenários experimentais propostos por Oliveira et. al. (OLIVEIRA et al., 2016), onde foi possível obter-se a curva de refletividade e encontrar os pontos onde ocorre a ressonância de plásmons de superfície.

REFERÊNCIAS

HOMOLA, Jiří; YEE, Sinclair S; GAUGLITZ, Günter. Surface plasmon resonance sensors. **Sensors and actuators B: Chemical**, Elsevier, v. 54, n. 1-2, p. 3–15, 1999.

JOHNSON, Peter B; CHRISTY, R-WJPrB. Optical constants of the noble metals. **Physical review B**, APS, v. 6, n. 12, p. 4370, 1972.

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.

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

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

ZILIO, Sergio Carlos. A polarização da Onda Eletromagnética - Cap. 6. http://www.cepa.if.usp.br/e-fisica/otica/universitario/cap06/cap6_06.php, 2004.