



UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO
INSTITUTO DE FÍSICA

Aplicando a Teoria Mie-Debye para Caracterização de Parâmetros Físicos em Pinças Óticas

Arthur Luna da Fonseca

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física do Instituto de Física da Universidade Federal do Rio de Janeiro - UFRJ, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Mestre em Ciências (Física).

Orientador: Paulo Américo Maia Neto

Coorientador: Rafael de Sousa Dutra

Rio de Janeiro

Agosto de 2019

P436(mudar) Fonseca, Arthur Luna da
Interação de Momento Angular de Spin e Orbital na Pinça
Ótica. / Arthur Luna da Fonseca - Rio de Janeiro: UFRJ/IF, 2019.

Orientador: Paulo Américo Maia Neto
Coorientador: Rafael de Sousa Dutra
Dissertação (mestrado) - UFRJ / Instituto de Física /
Programa de Pós-graduação em Física, 2019.

Referências Bibliográficas: f. 124-145.(mudar)

1. Pinça ótica. 2. Momento angular ótico. 3. Feixes não
paraxiais. 4. Interação spin-órbita. 5. Astigmatismo. 6. Absorção de
radiação. I. Neto, Paulo Américo Maia. II. Dutra, Rafael Sousa. III.
Universidade Federal do Rio de Janeiro, Instituto de Física, Programa
de Pós-graduação em Física.

Resumo

Aplicando a Teoria Mie-Debye para Caracterização de Parâmetros Físicos em Pinças Óticas

Arthur Luna da Fonseca

Orientador: Paulo Américo Maia Neto

Coorientador: Rafael de Sousa Dutra

Resumo da Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física do Instituto de Física da Universidade Federal do Rio de Janeiro - UFRJ, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Mestre em Ciências (Física).

Neste trabalho discutimos aplicações do modelo Mie-Debye para pinças óticas com correções para aberrações óticas(MDSA+). Apresentamos duas simulações com métodos numéricos. A primeira é de um experimento que mede a transferência de momento angular de spin para a microesfera aprisionada, e pelo resultado do experimento pode-se ajustar o parâmetro que caracteriza o astigmatismo do sistema. A segunda é uma sugestão de experimento, que ainda não foi realizado, para ajustar a parte imaginária do índice de refração da microesfera aprisionada. O modelo MDSA+ também é discutido para esclarecer o resultado do experimento realizado.

O resultado para o ajuste do parâmetro de astigmatismo está de acordo com outro método de obtenção dessa grandeza, o que valida o método desenvolvido no trabalho da dissertação. Comparando os dois métodos, ainda podemos concluir que o ajuste do parâmetro pelos dados experimentais se mostra mais simples e fácil de se realizar.

A proposta do experimento se baseia no cálculo de barreiras potenciais que uma esfera

deve ultrapassar para sair do aprisionamento. A intenção de medir esse parâmetro apareceu quando cálculos da força ótica com o modelo MDSA+ não previam aprisionamento de esferas grandes com o índice de refração fornecido pela literatura, enquanto o experimento apontava aprisionamento.

Palavras-chave: Pinça ótica, Momento angular ótico, Feixes não paraxiais, Interação spin-órbita, Astigmatismo, Absorção de radiação.

Abstract

Applying the Mie-Debye Theory to Characterize Physical Parameters in Optical Tweezers

Arthur Luna da Fonseca

Orientador: Paulo Américo Maia Neto

Coorientador: Rafael de Sousa Dutra

Abstract da Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física do Instituto de Física da Universidade Federal do Rio de Janeiro - UFRJ, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Mestre em Ciências (Física).

In this work, we discuss the Mie-Debye model for optical tweezers with aberrations correction (MDSA+) and its applications. We present two computational simulations with numerical methods. The first one is an experiment that measures the spin angular momentum transferred to the trapped sphere, whose results can be used to characterize the optical system astigmatism. The second one is a proposal of an experiment, which was not yet done, to measure the imaginary part of the refractive index of the trapped sphere.

The result for the astigmatism parameter agrees with another method to obtain it. This validates our method developed during the thesis work. Comparing both methods, we can also conclude that our method is easier and simpler to use.

The experiment proposal is based on the calculation of the optical potential barrier which the trapped sphere has to go through in order to scape the optical trap. The motivation for this study arises from the fact that the MDSA+ model would not predict

trapping of big polystyrene spheres (radius around 8 microns) when taking the imaginary part of the refractive index of polytyrene found on the literature, while spheres like this were being trapped in the lab.

Keywords: Optical Tweezers, Optical angular momentum, non-paraxial beams, Spin-orbit interaction , Astigmatism, Absorption of radiation.

Agradecimentos

Listar agradecimentos aqui, inclusive à agência de fomento que concedeu a bolsa de pós-graduação.

Sumário

Sumário	viii
Lista de Figuras	x
1 Introdução	1
1.1 Introdução	1
2 Teoria da Pinça Ótica	4
2.1 Ótica geométrica e limite de Rayleigh	4
2.2 Uma abordagem de ótica ondulatória	9
2.3 Modelo Mie-Debye	10
2.4 Efeito do perfil gaussiano	16
2.5 Efeitos de polarização	16
2.6 Aberração esférica produzida por refração na interface com o porta-amostra	18
2.7 Outras aberrações do sistema ótico	20
2.8 Força ótica em termos da expansão em multipolos	23
2.9 Interação Spin-Órbita	26
3 Caracterização de parâmetros físicos	30
3.1 Caracterização do astigmatismo por meio da análise do experimento de transferência de momento angular	30
3.2 Caracterização do parâmetro de absorção da amostra	40

4	Resultados	44
4.1	Transferência de momento angular e caracterização do astigmatismo	44
4.2	Caracterização do parâmetro de absorção da microesfera	47
5	Considerações Finais	52
A	Fator de eficiência e coeficientes de multipolo	59

Lista de Figuras

- 2.1 Centro da esfera (indicado pelo \times) na posição do foco do feixe ótico aprisionador (indicado pelo centro do círculo). Não há transferência de momento por refração, mas há transferência de momento por absorção e reflexão. 5
- 2.2 Centro da microesfera sobre o eixo de simetria do cone, abaixo (esquerda) e acima (direita) da posição do foco , para onde o vetor $\delta\mathbf{p}$ aponta. O momento que a esfera adquire $\delta\mathbf{P}$ é $-(\mathbf{P}' - \mathbf{P})$, que é menos a variação de momento do campo, por conservação. 6
- 2.3 Centro de massa da microesfera ganha momento na direção do foco do feixe por causa da refração. 7
- 2.4 Ilustração dos efeitos de reflexão (esquerda) e absorção (direita). O momento que a esfera ganha é $\delta\mathbf{p}$, enquanto \mathbf{p} é a fração do raio incidente que é refletido ou absorvido, e \mathbf{p}' é o raio refletido. 8
- 2.5 Ilustração do efeito de aberração esférica. Na figura, \mathbf{L}_a e \mathbf{L} são as distância entre a interface e o plano focal na ausência da interface e o plano focal efetivo paraxial, e \mathbf{S} é a distância do eixo ótico ao ponto de incidência de um raio na interface. 19
- 2.6 Feixe com astigmatismo. 22

2.7	Ilustração da conservação do momento angular. $\mathbf{P}_{antes} = \sigma \mathbf{S}$ é o momento angular intrínseco de uma onda plana com polarização σ , onde só há componente de spin. Após ser rotacionada, a onda passa a apresentar uma componente de momento angular orbital \mathbf{L}	27
2.8	Constante de torção κ_ϕ em função do raio da microesfera. O comprimento de onda do laser é de $1064nm$, a distância L entre o foco e a lamínula é de 4,5 unidades de raio e a polarização $\sigma+$. Astigmatismo não é levado em conta nessa simulação.	28
3.1	Propagação do feixe paraxial até entrar no microscópio e montagem da mesa ótica.	31
3.2	Propagação do feixe dentro do microscópio. O espelho dicróico reflete o feixe paraxial para a entrada da objetiva, e deixa a luz visível proveniente da amostra passar para a câmera CMOS, fornecendo as imagens de onde obtemos os dados.	32
3.3	Ilustração da placa de quarto de onda (QWP). O material da placa é um material birrefringente, onde o índice de refração do eixo \hat{e}_1 , chamado eixo rápido, é maior que o índice de refração do eixo \hat{e}_2 , chamado eixo lento. O eixo rápido faz um ângulo ψ com a direção x , que é definida pela direção da polarização do feixe incidente. As componentes do feixe incidente na direção \hat{e}_1 e \hat{e}_2 ganham fases diferentes, e assim a polarização do feixe passa a ser elíptica.	33
3.4	Equilíbrio de forças sobre a microesfera deslocada do eixo ótico.	35
3.5	Pontos experimentais do experimento. São mostradas várias baterias de dados, cada uma representada por uma velocidade. Podemos ver o efeito do movimento Browniano ao redor das posições de equilíbrio. As figuras 3.4 e 3.5 são cortesia de Kainã Diniz [1].	37

3.6	Comportamento da posição de equilíbrio em função do ângulo da placa de quarto de onda ψ . O valor do parâmetro de astigmatismo para essas posições é de $A_{ast} = 0.25$	39
3.7	Comportamento do fator de eficiência axial em função de z . O ponto z_{eq} indicado no gráfico corresponde à posição de equilíbrio estável na direção z , enquanto o ponto z_{inst} corresponde a um ponto de equilíbrio instável. Esse último também será o ponto em que $V(z)$ será um máximo local. . . .	42
3.8	Região onde há uma posição de equilíbrio estável a pelo menos 3 unidades de raio de distância do foco. O aumento da absorção de luz pela microesfera faz com que a posição de equilíbrio se desloque no sentido positivo do eixo z (sentido de propagação).	43
4.1	Simulação com $A_{ast} = 0$ (à esquerda) e $A_{ast} = 0.36$ (à direita).	45
4.2	Valores da função erro (equação 4.1) em função do parâmetro de astigmatismo A_{ast} . O mínimo se encontra aproximadamente em $A_{ast} = 0.24$	46
4.3	Pontos teóricos em azul, com o parâmetro $A_{ast} = 0.24$, ajustado como mínimo da função erro.	47
4.4	Componente Q_z do fator de eficiência em função de z . O raio da esfera é $a = 7.9\mu m$, o índice de refração $n_2 = 1.576 + 10^{-3}i$, o parâmetro de astigmatismo $A_{ast} = 0.1$ e a distância entre o plano focal e a interface com a lamínula $L = 2a$	48
4.5	Fator de eficiência Q_z para vários raios a da microesfera (em cores). O parâmetro de astigmatismo e a distância entre o foco e interface são iguais ao caso anterior. À esquerda, $\text{Im}(n_2) = 3 \times 10^{-4}$, e à direita, $\text{Im}(n_2) = 4 \times 10^{-4}$	49

4.6	Componente Q_z do fator de eficiência (em laranja) e o potencial (em azul) em função de z . Representamos no gráfico a altura Δ da barreira de potencial.	50
4.7	Altura da barreira potencial adimensional em função da parte imaginária do índice de refração.	51

Capítulo 1

Introdução

1.1 Introdução

A presente dissertação é um resultado do trabalho do grupo de pinças óticas da UFRJ, que tem sido desenvolvido há quase duas décadas. Os trabalhos de teoria do grupo têm como objetivo descrever a técnica experimental de pinças óticas, desenvolvida por Arthur Ashkin em 1986 [2, 3]. Suas contribuições para o ramo de armadilhamento ótico vêm desde 1970, com seu primeiro artigo publicado sobre o assunto[4]. Em 2018, seus trabalhos sobre a pinça ótica e toda a sua importância para aplicação em biologia lhe renderam o prêmio Nobel de 2018.

A importância desse aparato exigiu uma descrição teórica satisfatória. Os primeiros modelos que tentam descrever as forças da pinça ótica fazem uso de diversas aproximações para descrever o feixe que sai da objetiva e a interação da esfera com o campo. O capítulo 2 introduzirá alguns destes modelos. De acordo com Ashkin [5], a teoria que descreve o feixe e as interações da pinça ótica de forma exata se deve a Maia Neto e Nussenzveig [6]. No artigo publicado em 2000 é obtida a força axial (na direção z) na microesfera em cima do eixo para um feixe de polarização circular. Resultados seguintes estendem o anterior para uma posição arbitrária da microesfera em relação ao foco do feixe e derivam forças nas demais direções (em coordenadas cilíndricas: azimutal e radial) [7]. O caso da polarização linear é discutido em [8]. Posteriormente, também são inseridas correções relacionadas

à aberração esférica [9] (para interface vidro-água no porta-amostra) e para aberrações do feixe produzidas pelo sistema ótico (como astigmatismo e coma) [10]. Atualmente, o grupo desenvolve projetos como medição de força de Casimir com pinças óticas [11], estudos do efeito de quiralidade na esfera aprisionada [12], e medição do torque ótico [?], sendo este último uma das bases para essa dissertação.

No capítulo 2, discutirei o modelo desenvolvido pelo grupo (MDSA+, do inglês Mie-Debye Spherical Aberration, com correção de outras aberrações). Este foi usado para obter os resultados da presente dissertação. Ele leva em conta diversos efeitos, como efeitos de polarização da luz e acoplamentos de momento angular de spin e orbital, que são ignorados pelos demais, além de ser válido para um espectro maior de razões entre o comprimento de onda λ e o raio a . Esse tema já foi abordado em teses de doutorado de ex-alunos do grupo [13, 14], que tomaremos e recomendamos como referência para este texto. Apresentarei também nesse capítulo uma breve revisão de outros modelos, discutindo seus regimes de validade e comparando alguns destes com o modelo Mie-Debye.

Alguns parâmetros experimentais usados na teoria MDSA+ apresentam certa dificuldade de se medir, como o caso do coeficiente que quantifica o astigmatismo do sistema ótico. Uma vez que esse parâmetro seja medido, a teoria e o experimento têm boa concordância. No capítulo 3 será descrito o experimento de torque ótico, que é bastante sensível a esse parâmetro de astigmatismo. Será também descrito a simulação desse experimento, que fazemos com vários parâmetros de entrada diferentes a fim de ajustar cada um deles aos dados experimentais. A simulação que melhor ajustar os dados experimentais nos fornecerá os parâmetros de entrada com maior verossimilhança.

Ainda no capítulo 3, será apresentado um problema referente ao efeito de absorção de radiação pela microesfera. Experimentalmente, microesferas de raios muito maiores que o comprimento de onda são aprisionadas no laboratório. Ao utilizar o valor da parte imaginária do índice de refração da microesfera, que é a responsável pela absorção de radiação, a teoria prevê que não há posição de equilíbrio estável. Proporemos um

experimento para tentar ajustar esse parâmetro também, baseado em comportamentos estocásticos da microesfera na pinça.

No capítulo 4 discutiremos os resultados das simulações. Nesse mesmo capítulo apresentaremos a forma convencional de se obter o parâmetro de astigmatismo. Por fim, serão discutidas as conclusões no capítulo 5.

Capítulo 2

Teoria da Pinça Ótica

Esse capítulo será dedicado a apresentar teorias que descrevem o aparato de pinça ótica. A ênfase será no modelo Mie-Debye (MD), que foi usado para as simulações e obtenções dos resultados. Outros modelos importantes serão introduzidos, com a finalidade de gerar uma intuição acerca do assunto.

Alguns resultados que parecem contra-intuitivos pedem a introdução de alguns efeitos que os explicam. Portanto, a interação de momento angular de spin e orbital do feixe será discutida no contexto da teoria MD, onde a alta abertura numérica da objetiva é a responsável por efeitos de conversão entre os dois tipos de momento angular[15].

2.1 Ótica geométrica e limite de Rayleigh

Uma forma intuitiva de entender o aprisionamento ótico de objetos esféricos e transparentes é no regime em que estes possuem um raio muito maior que o comprimento de onda do feixe incidente. Este limite é chamado de ótica geométrica, ou ótica de raios, no qual feixes podem ser tratados de forma geométrica definindo-se sua trajetória.

Por outro lado, no limite em que o raio é muito menor que o comprimento de onda, temos o limite de Rayleigh, em que nós podemos aproximar a microesfera por um dipolo elétrico.

O feixe presente em uma pinça ótica tem a forma de um cone sólido com um perfil de

intensidade radial. Nessa explicação, vamos olhar o comportamento de uma casca desse cone sólido com ângulo de abertura θ fixo. Dependendo de como os vetores de momento \mathbf{p} diametralmente opostos mudarão ao passar pela esfera, podemos inferir a força que ela sofrerá pela variação dos pares desses vetores. Inicialmente, vamos ignorar efeitos de absorção e reflexão.

Começamos pelo caso mais simples: quando o vértice do cone, ou a posição focal do feixe, coincide com o centro da esfera (figura 2.1). Nesse caso, o ângulo de incidência dos raios é normal à superfície da esfera, e o ângulo de transmissão é igual ao de incidência pela lei de Snell. Assim como ao entrar na esfera, o raio que sai da esfera também incide

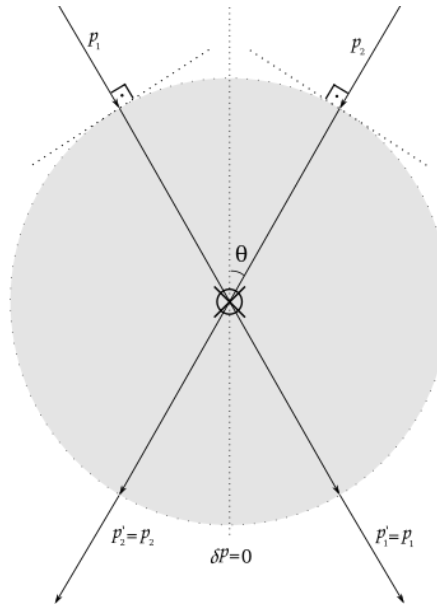


Figura 2.1: Centro da esfera (indicado pelo \times) na posição do foco do feixe óptico aprisionador (indicado pelo centro do círculo). Não há transferência de momento por refração, mas há transferência de momento por absorção e reflexão.

normalmente à superfície de dentro. Não há mudança na direção do vetor momento, e portanto não há força sendo exercida sobre a esfera por efeito da refração. Por simetria, não esperamos que as outras componentes do cone sólido façam força sobre a esfera.

Quando deslocamos a posição do foco em relação ao centro da microesfera, a lei de Snell prevê que os raios serão refratados. Começamos deslocando na direção axial, ou

seja, com o centro da esfera sobre o eixo de simetria do cone (eixo ótico), como ilustra a figura 2.2.

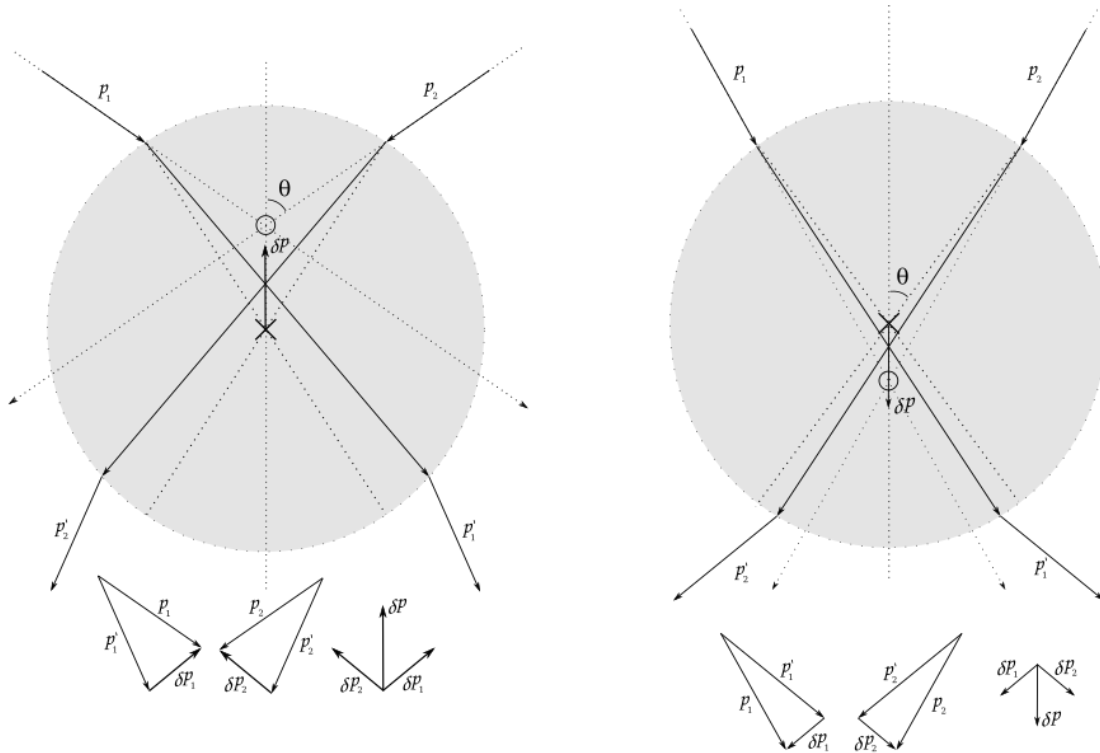


Figura 2.2: Centro da microesfera sobre o eixo de simetria do cone, abaixo (esquerda) e acima (direita) da posição do foco, para onde o vetor $\delta \mathbf{p}$ aponta. O momento que a esfera adquire $\delta \mathbf{P}$ é $-(\mathbf{P}' - \mathbf{P})$, que é menos a variação de momento do campo, por conservação.

De forma análoga ao caso anterior, ao deslocar verticalmente o foco em relação ao centro da esfera, o momento que a esfera recebe do feixe aponta para o centro deste.

A contribuição da reflexão é a transferência de momento na direção normal ao plano tangente à esfera onde o raio de luz é refletido, como mostra a figura 2.4(a). Os raios refletidos têm sua componente de momento perpendicular à superfície reflexora (tangente) invertidas. Por conservação de momento, a esfera ganha o dobro de momento nessa direção. Outro efeito importante é a absorção de luz pela esfera. Podemos entendê-la assumindo que uma fração \mathbf{p} do raio é absorvida, e por conservação, a esfera ganha o

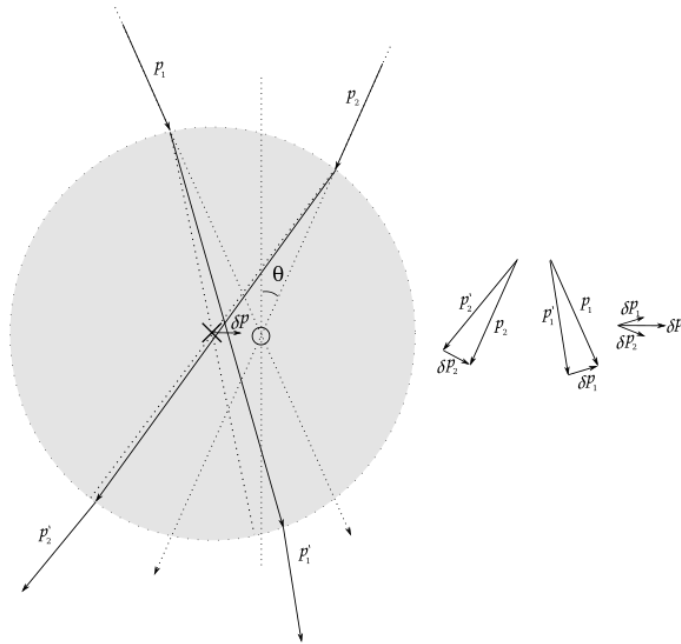


Figura 2.3: Centro de massa da microesfera ganha momento na direção do foco do feixe por causa da refração.

momento dessa fração do raio com mesma direção e sentido, como ilustrado na figura 2.4(b).

Um modelo proposto por Ashkin [16] usa a taxa de mudança do momento de um raio de luz no regime de ótica geométrica para obter a força ótica exercida por esse raio sobre a esfera. Nesse modelo, no entanto, múltiplas reflexões internas do raio são levadas em conta, o que não fizemos na explicação qualitativa acima. Somam-se então os vários raios que compõem o feixe gaussiano TEM_{00} , e também é feito o cálculo para o modo Laguerre-Gaussiano TEM_{01} . A condição seno de Abbe, à qual as objetivas de alta abertura numérica satisfazem, não é levada em conta em nenhum dos casos [9].

Recentemente, em 2015, a aproximação de ótica geométrica foi usada para se desenvolver um programa que calcula a força ótica em objetos elipsoidais numericamente [17].

No caso em que a microesfera é muito menor que o comprimento de onda, chamado limite Rayleigh, podemos aproximar o centro espalhador por um dipolo induzido pelo

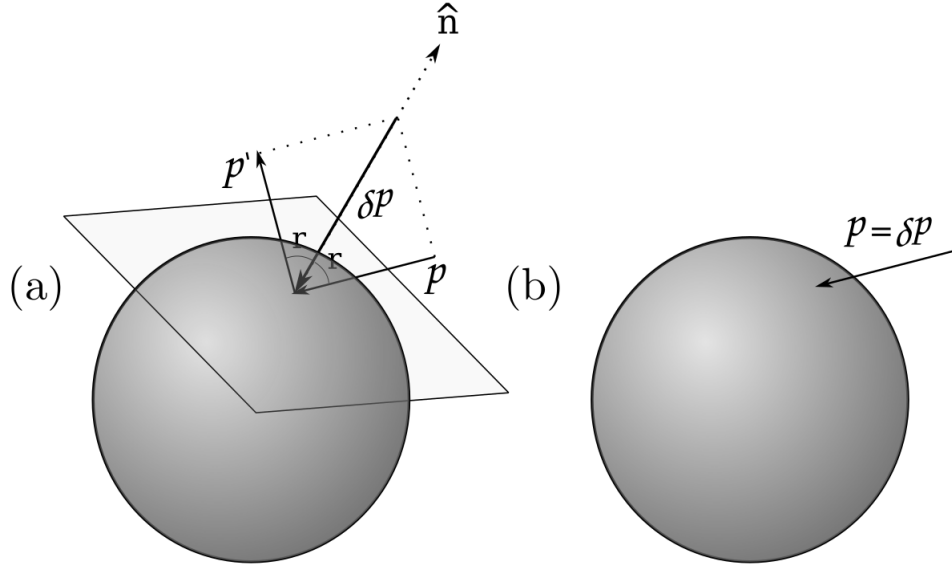


Figura 2.4: Ilustração dos efeitos de reflexão (esquerda) e absorção (direita). O momento que a esfera ganha é $\delta \mathbf{p}$, enquanto \mathbf{p} é a fração do raio incidente que é refletido ou absorvido, e \mathbf{p}' é o raio refletido.

campo. Dessa forma, a força no dipolo induzido \mathbf{p} será dada por:

$$\mathbf{F} = \frac{1}{2} \nabla (\mathbf{p} \cdot \mathbf{E}), \quad (2.1)$$

com \mathbf{p} sendo dado por [18]:

$$\mathbf{p} = \alpha \mathbf{E}, \quad (2.2)$$

onde α é a polarizabilidade da microesfera.

Podemos concluir que a força vai ser proporcional a \mathbf{E}^2 , que é proporcional por sua vez à intensidade do campo. Se \mathbf{E} e \mathbf{p} têm o mesmo sentido, a força apontará sempre para a região de maior intensidade. Isso ocorre desde que $\alpha > 0$. Essa é a força que chamamos de força de gradiente.

Essa abordagem foi usada para um feixe gaussiano não perturbado na região focal por [19], apresentando incompatibilidades com experimentos [9]. Abordagens seguintes [20] usam um modelo para o feixe focalizado devido a Richards e Wolf [21], o mesmo utilizado para a teoria MDSA que será discutida na seção 2.3, porém usando a aproximação de

dipolo para a força ótica, e restringindo a validade da força devido ao espalhamento para raios menores ou da ordem de $\lambda/2(n_1 - n_3)$ (n_1 e n_3 são respectivamente os índices de refração do meio e da microesfera), pela aproximação de Rayleigh-Gans.

Os modelos baseados em ótica geométrica e aproximação do centro espalhador por um dipolo tem uma concordância relativamente boa com dados experimentais de esferas com raios condizentes com cada limite. Por outro lado, não são válidos para os tamanhos intermediários de raios, que são mais fáceis de se visualizar e amplamente utilizados nos experimentos.

Para descrever esses casos, é necessário um modelo baseado em ótica ondulatória, que leve em conta o feixe produzido pelas objetivas de alta abertura numérica e o espalhamento Mie desses campos pela esfera. Antes de tratar do modelo MD, apresentaremos outros modelos e formas de cálculos de forças óticas.

2.2 Uma abordagem de ótica ondulatória

Na tentativa de obter um modelo baseado em ótica ondulatória, o modelo de Gouesbet e Gréhan [22] faz uma generalização do modelo de Mie para o espalhamento de uma onda plana (circularmente polarizada) por uma esfera [23, 24], onde o feixe incidente passa a ser definido por uma combinação linear de funções de onda que são soluções da equação de Helmholtz [25]. Os coeficientes da expansão, ou coeficientes de formato do feixe (*beam shape coefficients*, ou BSC), são obtidos através de expansões do campo nessas funções, que formam uma base discreta [26].

Na abordagem do artigo de 1985 [22], o campo incidente na esfera é um feixe de Davis [27], que consiste em um feixe paraxial com correções até quinta ordem no parâmetro $1/(k w_0)$, onde k é módulo do vetor de onda e w_0 é a cintura do feixe. Essa aproximação foi usada na tentativa de adequar o formalismo paraxial usual a situações fora do seu regime de validade, tendo em vista que os feixes usados em pinças óticas exigem altos valores de abertura numérica. O método proposto por Gouesbet e Gréhan é atualmente conhecido

na literatura como *generalized Lorenz-Mie theory* (LGMT), e programas computacionais para o cálculo da força ótica baseados em tal teoria estão disponíveis na internet [25].

Uma formulação de espalhamento chamada matriz-T (matriz de transferência) é utilizada em conjunto com a expansão em ondas esféricas para obter os campos espalhados para um objeto não esférico[28, 29]. A discussão desse caso, porém, não está no escopo do trabalho.

No caso em que os coeficientes de expansão são os correspondentes aos do feixe proposto por Richards e Wolf [21], e o objeto espalhador é uma esfera, recupera-se o resultado do modelo Mie-Debye [30], que será discutido a seguir.

2.3 Modelo Mie-Debye

Nessa seção será discutido o modelo Mie-Debye. O nome desse modelo faz alusão aos cientistas que propuseram os dois principais elementos desse modelo: o espalhamento de uma onda plana por uma esfera por Mie, como visto na seção anterior, e Debye, que propôs um modelo com campo escalar para o feixe produzido por uma objetiva de alta abertura numérica. A extensão do modelo para um campo vetorial foi feita por Richards e Wolf, citados no final da última seção.

Começaremos a explicação do modelo pelo caso de espalhamento mais simples: uma onda plana de polarização circular direita ou esquerda incidindo sobre uma esfera. Obteremos os coeficientes de espalhamento, chamados coeficientes de Mie. A seguir, faremos a descrição do feixe incidente como uma superposição de ondas planas com a forma [21]:

$$\mathbf{E}_{IN} = \int_0^{\theta_0} d\theta_k \sin \theta_k \int_0^{2\pi} d\phi_k \sqrt{\sin \theta_k} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \hat{\varepsilon}_k, \quad (2.3)$$

onde a região de integração é um cone sólido com ângulo de abertura $\theta_0 = \arcsin(NA/n)$, em que NA é a abertura numérica do feixe, n é o índice de refração no meio (mais tarde esse n será o índice de refração da lamínula de vidro, e esse fato será importante para definir aberração esférica), $\hat{\varepsilon}_k$ é o vetor de polarização rotacionado e o foco desse feixe

se encontra na origem do espaço de posição. Nesse modelo também é levado em conta efeitos da objetiva que serão discutidos mais à frente.

Os detalhes dos cálculos desta seção podem ser encontrados em [13], e não estarão no presente trabalho para evitar repetição.

Nossa finalidade é encontrar a força eletromagnética exercida em uma microesfera na pinça ótica. Obtemos ela com [18]:

$$\vec{F} = \oint_s \hat{n} \cdot \mathbf{T} ds - \mu\epsilon \frac{d}{dt} \int_\nu \mathbf{S} d\nu, \quad (2.4)$$

onde s é uma superfície que envolve o centro espalhador, ν é o interior dessa superfície, T é o tensor das tensões de Maxwell, \mathbf{S} é o vetor de Poynting e μ e ϵ são a permeabilidade magnética e a permissividade elétrica do meio envolvendo a amostra, respectivamente.

Assim, queremos obter os campos incidentes na esfera e espalhados por ela. Começamos tratando do caso de uma onda plana se propagando na direção z , com polarização circular. Essa é a polarização conveniente para expansão do campo em multipolos (ondas esféricas ou ondas parciais), que por sua vez é a base ideal para analisarmos o espalhamento de um objeto esférico. Outros casos de polarização serão tratados na seção 2.5.

A simetria esférica do centro espalhador impõe condições de contorno sobre as partes radiais e transversais do campo. Por isso, dividimos o campo eletromagnético nessas duas partes: o modo transversal elétrico Π^M (ou multipolo magnético), que possui as componentes do campo elétrico tangenciais à superfície esférica concêntrica à esfera, e o modo transversal magnético Π^E (ou multipolo elétrico), com o magnético tangencial à superfície. Para isso, fazemos o produto interno dos campos com \mathbf{r} , e obtemos os potenciais de Debye:

$$\Pi^E = \sum_J \Pi_J^E = \sum_J \frac{(\mathbf{r} \cdot \mathbf{E})_J}{J(J+1)} \quad e \quad \Pi^M = \sum_J \Pi_J^M = \sum_J \frac{(\mathbf{r} \cdot \mathbf{H})_J}{J(J+1)}. \quad (2.5)$$

com

$$\mathbf{E} = E_0(\hat{x} \pm i\hat{y})e^{ikz-i\omega t} \quad e \quad \mathbf{H} = \frac{n_1}{\mu c}(\mp i)\mathbf{E}. \quad (2.6)$$

onde n_1 é o índice de refração do meio ao redor da amostra, k e ω são o módulo do vetor de onda e a frequência angular do feixe, sendo $\omega/k = c$ a velocidade da luz no vácuo. Os somatórios em J nas equações acima indicam a expansão em multipolos.

A base de multipolos é composta pelos harmônicos esféricos na parte angular, que são autofunções dos operadores de momento angular L^2 e L_z . Esse fato será importante para obter os campos vetoriais a partir dos potenciais de Debye, pois podemos usar um conjunto de operadores vetoriais que comutam com ∇^2 e portanto geram soluções vetoriais da equação de Helmholtz. Esses operadores são: $-i\mathbf{r} \times \nabla = \mathbf{L}$, $\nabla \times \mathbf{L}$ e ∇ [31], onde o operador ∇ fornece campos com divergência não nula, ou seja, com componentes na direção de propagação \mathbf{k} e que assumimos serem nulas desde o começo.

A expansão em multipolos forma a base para se aplicar as condições de contorno e obter os coeficientes de Mie, que podemos entender como as amplitudes de espalhamento de cada onda parcial. Com elas podemos obter os campos espalhados a partir do campo incidente. Os coeficientes de Mie para o espalhamento são:

$$a_J = \frac{\psi_J(\beta)\psi'_J(\alpha) - N_{12}\psi'_J(\beta)\psi_J(\alpha)}{\zeta_J^{(1)}(\beta)\psi'_J(\alpha) - N_{12}\zeta_J'^{(1)}(\beta)\psi_J(\alpha)}, \quad b_J = \frac{\psi'_J(\beta)\psi_J(\alpha) - N_{12}\psi_J(\beta)\psi'_J(\alpha)}{\zeta_J'^{(1)}(\beta)\psi_J(\alpha) - N_{12}\zeta_J^{(1)}(\beta)\psi'_J(\alpha)}, \quad (2.7)$$

onde $\beta = ka$, $\alpha = N_{12}ka$, a é o raio da esfera e N_{12} é a razão entre o índice de refração do meio n_1 e do centro espalhador (esfera) n_2 ; $\psi_J = xj_J(x)$ e $\zeta_J^{(1)} = xh_J^{(1)}(x)$ são as funções de Bessel-Riccati e $j_J(x)$ e $h_J^{(1)}(x)$ são as funções esféricas de Bessel e Henkel, respectivamente. Os campos espalhados provenientes do multipolo elétrico Π^E terá o coeficiente de espalhamento a_J multiplicando as expressões dentro dos somatórios em J , enquanto o multipolo magnético Π^M terá o coeficiente de espalhamento b_J .

Obtemos, até então, os potenciais de ondas planas incidentes e espalhadas na direção z em coordenadas esféricas. Queremos usá-las para montar um feixe de alta abertura numérica, de acordo com a equação 2.3. Faremos isso rotacionando e superpondo diversas

ondas planas usando o operador momento angular total \mathbf{J} , que é o gerador de rotações no espaço.

Como a dependência angular dos potenciais de Debye estão contidas nos harmônicos esféricos, o procedimento se resume a fazer a rotação dos mesmos. Usando o operador $D(\alpha, \beta, \gamma) = e^{-i\alpha J_z} e^{-i\beta J_y} e^{-i\gamma J_z}$ [31] e o fato de que os harmônicos esféricos são autofunções de J_z , obtemos:

$$Y_{JM}(\theta', \phi') = \sum_{M'=-J}^J Y_{JM'}(\theta, \phi) e^{-i(\alpha M' + \gamma M)} d_{M'M}^J(\beta), \quad (2.8)$$

que representa um harmônico esférico em um eixo rodado com coordenadas θ' e ϕ' , onde $d_{M',M}^J(\beta) = e^{-i\beta J_y}$ é o elemento da matriz de rotação de Wigner e α , β , e γ são os ângulos de Euler. A rotação é feita de forma que o eixo z do sistema rodado coincida com o eixo $\hat{\mathbf{k}}$ de propagação. Para isso, $\alpha = \phi_k$ e $\beta = \theta_k$. Usamos o último ângulo de Euler para determinar corretamente a direção de polarização do feixe fazendo $\gamma = -\phi_k$. Como o fóton carrega momento angular de *spin*, o número M na equação 2.8 será igual a 1 no caso de polarização circular esquerda (e -1 no caso da direita). Substituindo em 2.5, os potenciais de Debye rotacionados ficam:

$$\Pi^E = \pm \frac{E_0 e^{-i\omega t}}{k} \sum_{J=1}^{\infty} (i)^{J+1} j_J(kr) \sqrt{\frac{4\pi(2J+1)}{J(J+1)}} \sum_{M'=-J}^J e^{i\phi_k(M' \mp 1)} d_{M', \pm 1}^J(\theta_k) Y_{JM'}(\theta, \phi), \quad (2.9)$$

e

$$\Pi^M = \frac{H_0 e^{-i\omega t}}{k} \sum_{J=1}^{\infty} (i)^J j_J(kr) \sqrt{\frac{4\pi(2J+1)}{J(J+1)}} \sum_{M'=-J}^J e^{i\phi_k(M' \mp 1)} d_{M', \pm 1}^J(\theta_k) Y_{JM'}(\theta, \phi). \quad (2.10)$$

O próximo passo é integrar no ângulo sólido do cone no espaço de Fourier. Começando pela variável ϕ_k (ou seja, componente ϕ da direção do vetor de onda \mathbf{k} ; notação que será usada para θ_k também), obtemos:

$$\begin{aligned} \Pi_{\theta_k}^E = & \pm \frac{E_0 e^{-i\omega t}}{k} \sqrt{\cos(\theta_k)} \sum_{J=1}^{\infty} (i)^{J+1} j_J(kr) \sqrt{\frac{4\pi(2J+1)}{J(J+1)}} \times \\ & \times \sum_{M'=-J}^J d_{M',\pm 1}^J(\theta_k) Y_{JM'}(\theta, \phi) \int_0^{2\pi} d\phi_k e^{-i\phi_k(M' \mp 1)}, \end{aligned} \quad (2.11)$$

onde o termo $\sqrt{\cos(\theta_k)}$ vem da condição do seno de Abbe [32]. O cone sólido se obtém integrando em θ_k :

$$\begin{aligned} \Pi^E &= \int_0^{\theta_0} d\theta_k \sin \theta_k \Pi_{\theta_k}^E, \\ \Pi^M &= \int_0^{\theta_0} d\theta_k \sin \theta_k \Pi_{\theta_k}^M, \end{aligned} \quad (2.12)$$

onde θ_0 é a abertura angular do feixe aprisionador.

Para derivar a força na microesfera em função da sua posição relativa ao foco do feixe, temos que calcular os campos deslocados em relação ao centro do objeto espalhador, ou seja, a origem. Fazemos isso usando o gerador de translações no espaço, com o operador $e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}$, onde $\mathbf{R} = q_x \hat{x} + q_y \hat{y} + q_z \hat{z}$ é o vetor de deslocamento. Multiplicamos esse operador em cada coeficiente de multipolo, e dessa forma, o operador fica dentro da integral em ϕ_k , que leva ao seguinte resultado:

$$\int_0^{2\pi} d\phi_k e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} e^{-i\phi_k(M' \mp 1)} = e^{-ikz \cos \theta_k} 2\pi (-i)^{M' \mp 1} J_{M' \mp 1} \left(k \sin \theta_k \sqrt{q_x^2 + q_y^2} \right) e^{-i(M' \mp 1)\phi}. \quad (2.13)$$

Uma vez determinados os potenciais de Debye incidentes e espalhados, podemos obter os campos aplicando os operadores $-i\nabla \times \mathbf{L}$ e $-i\mathbf{L}$:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_T &= \mathbf{E}_{IN} + \mathbf{E}_S = -i\nabla \times \mathbf{L}(\Pi_{IN}^E + \Pi_S^E) + i\omega\mu(-i)\mathbf{L}(\Pi_{IN}^M + \Pi_S^M), \\ \mathbf{H}_T &= \mathbf{H}_{IN} + \mathbf{H}_S = -i\nabla \times \mathbf{L}(\Pi_{IN}^M + \Pi_S^M) - i\omega\epsilon(-i)\mathbf{L}(\Pi_{IN}^E + \Pi_S^E). \end{aligned} \quad (2.14)$$

Finalmente, calculando a integral 2.4, obtemos a força na microesfera de um campo produzido pela passagem de uma onda plana sendo focalizada por uma objetiva. Essa integral pode ser resolvida tomando a superfície σ como uma esfera (com centro na origem) com raio tendendo a infinito. Isso faz com que as componentes radiais do campo sejam desprezadas no cálculo, pois caem com $\frac{1}{r^2}$, comparado às componentes tangenciais que caem com $\frac{1}{r}$. Temos, então:

$$\mathbf{F} = \frac{-1}{2}r \left(\int d\Omega(\epsilon E_{tan}^2 \mathbf{r}) + \int d\Omega(\mu H_{tan}^2 \mathbf{r}) \right), \quad (2.15)$$

onde as duas integrais dentro do parentesis são iguais. Sendo assim, a força vai depender do quadrado dos campos (E^2 e H^2), e de termos proporcionais a $\mathbf{E}_{IN} \cdot \mathbf{E}_{IN}^*$ (incidente-incidente), $\text{Re}(\mathbf{E}_{IN} \cdot \mathbf{E}_S^*)$ (espalhado-incidente) e $\mathbf{E}_S \cdot \mathbf{E}_S^*$ (espalhado-espalhado). O primeiro desses termos (campo incidente-incidente) não contribui para a força, pois trata-se do caso onde não há centro espalhador. O produto dos campos espalhado-incidente é chamado termo de extinção, e representa a taxa com que o momento linear é subtraído do campo incidente. Por fim, o termo de espalhamento (espalhado-espalhado) é menos a taxa de transferência de momento para o campo espalhado.

Finalmente, podemos definir o fator de eficiência vetorial \mathbf{Q} , ou força adimensional:

$$\mathbf{Q} = \frac{\langle \mathbf{F} \rangle}{n_1 P / c} = \mathbf{Q}_s + \mathbf{Q}_e, \quad (2.16)$$

onde $\langle \mathbf{F} \rangle$ é a média temporal da força, P é a potência do feixe incidente na amostra, \mathbf{Q}_s é a contribuição devida ao espalhamento ao fator de eficiência, e \mathbf{Q}_e é a contribuição devida à extinção. Para obtermos expressões para \mathbf{Q} que condizem com um feixe usado em um experimento, devemos levar em conta o modo transversal, a polarização e as aberrações óticas do feixe paraxial na entrada da objetiva. Esses serão os temas discutidos nas próximas seções.

2.4 Efeito do perfil gaussiano

O modo gaussiano TEM_{00} do feixe laser é o mais amplamente usado nos experimentos de pinça ótica. Para incorporar o efeito do perfil gaussiano no modelo, analisamos o campo paraxial na entrada da objetiva.

Para introduzir o efeito que o perfil do feixe produz, basta saber como é o feixe paraxial antes de ser focalizado. Primeiramente, assumimos que tal feixe incidente esteja com a altura da cintura mínima coincidente com a entrada da objetiva. Isso nos permite tratá-lo como um feixe cilíndrico (de raio de curvatura infinito) [33]. O campo fica:

$$\mathbf{E}_{IN}^{antes}(\vec{r}, t) = E_0 e^{ikz} e^{-\frac{f^2 \sin^2 \theta_k}{\omega_0^2}} (\hat{\mathbf{x}} \pm i\hat{\mathbf{y}}) e^{i\omega t}, \quad (2.17)$$

onde ω_0 é a cintura (waist) mínima, $f^2 \sin^2 \theta_k = \rho^2$ (pela condição do seno) é a distância ao eixo do feixe ao quadrado. Ao passar pela objetiva, o campo também ganha uma correção de efeitos de difração [21], o fator multiplicativo $-i\frac{f}{\lambda}$. O fator $e^{-\frac{f^2 \sin^2 \theta_k}{\omega_0^2}}$ deve ser inserido dentro da integral em θ_k . Assim, as expressões para os multipolos na equação 2.12 são alteradas.

2.5 Efeitos de polarização

Até então, discutimos o caso de polarização circular direita e esquerda do feixe na porta de entrada da objetiva. Essas polarizações fazem com que o momento angular de spin seja bem definido, o que facilita a rotação e a expansão multipolar dos campos que compõem o feixe focalizado. Nas simulações realizadas, que serão descritas no capítulo 3, calculamos forças sobre a microesfera realizadas por feixes focalizados com diferentes polarizações na entrada da objetiva. Por isso, determinar a dependência explícita das forças com a polarização é de extrema importância do ponto de vista computacional.

Modelamos esse caso assumindo o feixe na entrada da objetiva como uma superposição de feixes com polarização circular à direita e à esquerda. O único procedimento que

muda em relação ao caso de polarização circular é quando tomamos os quadrados dos campos \mathbf{E} e \mathbf{H} . Teremos campos espalhados e incidentes de ambas as polarizações, com as quais montamos os respectivos potenciais de Debye. Produtos de campos de mesma polarização serão chamados puros, e produtos de campos de polarização oposta serão chamados cruzados.

A força exercida por uma polarização elíptica pode ser obtida introduzindo a dependência com o ângulo ψ do eixo rápido da placa de quarto de onda (QWP) no feixe paraxial incidente na entrada da objetiva:

$$\mathbf{E}^{ent}(\rho, \phi, z) = E_{centro} e^{ik_0 z} e^{\frac{-\rho^2}{w_0^2}} \sum_{\sigma=+1, -1} \frac{1 - ie^{-2i\sigma\psi}}{2} \hat{\epsilon}_\sigma. \quad (2.18)$$

Dessa forma, o fator de eficiência pode ser dividido de acordo com a contribuição dos termos puros e cruzados:

$$\mathbf{Q} = \frac{\langle \mathbf{F} \rangle}{n_1 P/c} = |a_+|^2 \mathbf{Q}^{(\sigma+)} + |a_-|^2 \mathbf{Q}^{(\sigma-)} + \mathbf{Q}^{(cross,+-)} + \mathbf{Q}^{(cross,-+)} \quad (2.19)$$

Os termos $\mathbf{Q}^{(\sigma\pm)}$ são os termos que encontraríamos para a polarização circular direita ou esquerda (tanto de espalhamento quanto de extinção). Os coeficientes a_\pm são dados pelo fator $(1 - ie^{-2i\sigma\psi})/2$ da equação 2.18, onde a_+ (a_-) corresponde a $\sigma = +1$ ($\sigma = -1$). Dessa forma, $|a_\pm|^2 = (1 \mp \sin 2\psi)/2$.

Os termos $\mathbf{Q}^{(cross)}$ são os que chamamos de cruzados, pois contêm produtos de campos com polarizações opostas. Nesse caso, os produtos dos campos fornecem duas fases complexas (conjugadas entre si): $\cos 2\psi e^{i2\psi}$ e $\cos 2\psi e^{-i2\psi}$.

Dessa forma, os potenciais de Debye ganham um termo a mais devido ao ângulo da placa de quarto de onda. Podemos, então, identificar 4 tipos de termos nas forças de extinção e de espalhamento: diretos ou puros devidos as polarizações σ_\pm , e termos cruzados com os produtos $\sigma_\pm^* \cdot \sigma_\mp$.

2.6 Aberração esférica produzida por refração na interface com o porta-amostra

A aberração esférica é um efeito ótico onde os raios que compõem o feixe são focalizados em pontos distintos do eixo ótico. Uma lente esférica, por exemplo, fará com que os raios marginais de um feixe colimado sejam mais refratados que os raios mais próximos ao eixo ótico. Esse efeito faz com que o perfil de intensidade do feixe seja difundido ao longo do eixo ótico.

No aparato de pinças óticas esse efeito ocorre quando usamos uma lente objetiva de imersão em óleo, que não é corrigida para aberração esférica, e o feixe incide em um porta-amostra contendo algum fluido com índice de refração diferente do óleo e do vidro do porta-amostra, que são iguais. Esse efeito faz com que a posição de equilíbrio da microesfera se desloque para mais perto da interface.

Também pode haver aberração esférica no feixe paraxial antes da entrada da objetiva, mas trataremos esse caso somente na seção 2.7.

No caso do feixe focalizado atravessando uma interface de dois meios com índices de refração diferentes, é fácil de mostrar como o efeito funciona em uma abordagem de ótica de raios e a lei de Snell. Componentes do feixe no meio com índice n que incidem na interface com ângulo θ , por refração, são transmitidos com um ângulo θ_1 no meio com índice de refração n_1 , de forma a respeitar a lei de Snell:

$$n \sin \theta = n_1 \sin \theta_1. \quad (2.20)$$

Fica claro, então, que para um feixe focalizado incidindo com seu eixo perpendicular à interface, raios paraxiais, ao mudarem de meio, não mais incidem no foco paraxial. Portanto, a região de maior intensidade não se localiza mais no foco paraxial, e sim difundida e mais próxima à interface.

A distância entre a interface e plano focal paraxial (\mathbf{L} na figura 2.5) pode ser calculada usando a lei de Snell. Assumindo ângulos pequenos (paraxiais), tomamos $\sin \theta \approx \theta$ e a lei

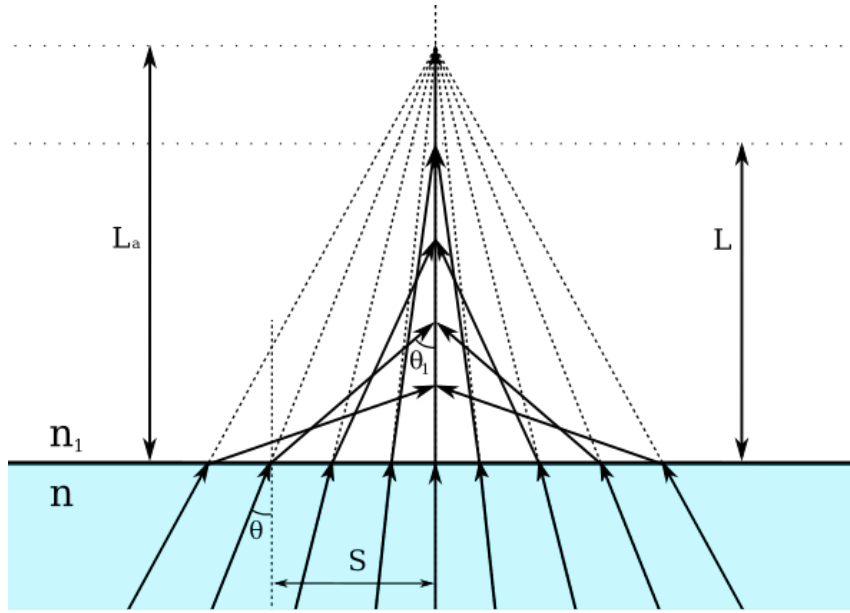


Figura 2.5: Ilustração do efeito de aberração esférica. Na figura, L_a e L são as distâncias entre a interface e o plano focal na ausência da interface e o plano focal efetivo paraxial, e S é a distância do eixo óptico ao ponto de incidência de um raio na interface.

de Snell fornece:

$$\frac{\theta_1}{\theta} \approx \frac{n}{n_1}, \quad (2.21)$$

onde θ_1 é o ângulo de refração no meio com índice de refração n_1 , como mostra a figura 2.5, que é o meio no qual a microesfera vai estar imersa.

Usando a distância do ponto de incidência do raio na interface até o eixo óptico e a distância entre a interface e o plano focal na ausência da interface (S e L_a na figura 2.5), temos $\tan \theta = s/L_a$ e $\tan \theta_1 = s/L$. Em ângulos pequenos, temos $\theta \approx s/L_a$ e $\theta_1 \approx s/L$, e usando a lei de Snell:

$$\frac{\theta_1}{\theta} \approx \frac{L_a}{L} \approx \frac{n}{n_1}, \quad (2.22)$$

de onde concluímos que $L = L_a n_1 / n = L_a N$, onde $N = n_1 / n$ é o índice de refração relativo.

Podemos entender esse efeito também como uma fase induzida no feixe pela diferença de caminho óptico. Somente a componente de \mathbf{k} na mesma direção do eixo óptico (eixo z)

vai sofrer uma mudança. Portanto, a fase que cada componente de onda-plana $\mathbf{k}(\theta)$ ganha por se propagar no meio de índice de refração n_1 será:

$$\Psi_+(z, \theta) = k_1 L \cos \theta_1, \quad (2.23)$$

onde $k_1 = Nk$ é o módulo do vetor de onda nesse meio.

Como essa onda se propagou nesse meio de índice de refração n_1 , ela deixou de se propagar no meio de índice de refração n , e portanto deve ser subtraída a fase que esta deixou de ganhar:

$$\Psi_-(z, \theta) = k L_a \cos \theta. \quad (2.24)$$

Portanto, ao serem refratadas, as componetes de onda-plana ganham a fase $e^{i\Psi(z, \theta)}$, onde

$$\Psi(z, \theta) = \Psi_+(z, \theta) - \Psi_-(z, \theta) = k \left(-\frac{L}{N} \cos \theta + NL \cos \theta_1 \right) \quad (2.25)$$

é a função de aberração esférica [34].

Para completar o modelo para a passagem de um meio para outro, levamos em conta a amplitude de transmissão de Fresnel de cada componente \mathbf{k} do campo, dada por:

$$T(\theta) = \frac{2 \cos \theta}{\cos \theta + N \cos \theta_1}, \quad (2.26)$$

onde, pela lei de Snell, $\theta_1 = \arcsin(\frac{\sin \theta}{N})$.

2.7 Outras aberrações do sistema ótico

As aberrações óticas monocromáticas são modificações nos feixes paraxiais induzidas por uma série de fatores, entre eles imperfeições nas lentes e desalinhamentos no sistema ótico. O estudo das aberrações é inspirado pelo fato de que a teoria MDSA subestima a força radial na pinça ótica quando o raio da microesfera aprisionada é menor ou da ordem do comprimento de onda λ do laser[10]. Raios maiores que λ recuperam tanto os resultados da teoria MDSA quanto os da ótica geométrica. Isso ocorre porque a esfera

passa a sondar uma média do perfil do feixe, em contraste com o caso anterior, em que ela sonda diferenças de fase e distribuição de intensidade do feixe focalizado.

O formalismo de Seidel é um dos possíveis métodos para se descrever as aberrações em um feixe paraxial. Entre as aberrações primárias, que aparecem como os primeiros termos de uma expansão nesse formalismo, são relevantes para o nosso modelo o astigmatismo, a coma e a aberração esférica [10]. Estamos tratando aqui de aberrações antes da objetiva, ou seja, a aberração esférica tratada aqui tem origem diferente da descrita na sessão anterior, apesar de serem o mesmo fenômeno físico.

Podemos introduzir essas aberrações no modelo colocando a fase adicional $e^{i\Phi_{adicional}(\theta, \phi)}$ nos campos na entrada da objetiva (modificando a equação 2.18), com [35]:

$$\Phi_{adicional}(\theta, \phi) = 2\pi \left[A'_{sa} \left(\frac{\sin \theta}{\sin \theta_0} \right)^4 + A'_c \left(\frac{\sin \theta}{\sin \theta_0} \right)^3 \cos(\phi - \varphi_c) + A'_a \left(\frac{\sin \theta}{\sin \theta_0} \right)^2 \cos^2(\phi - \varphi_a) \right], \quad (2.27)$$

onde o parâmetro $(\sin \theta / \sin \theta_0) = (\rho / R_p)$, ρ é a distância do ponto do feixe ao eixo e R_p é o raio da pupila da objetiva. Identificamos A'_{sa} , A'_c e A'_a como os parâmetros de aberração esférica (*sa* do inglês, *spherical aberration*), coma e astigmatismo. Para entender os parâmetros φ_c e φ_a , temos que entender o que são essas aberrações. A primeira característica delas é a quebra de simetria no plano perpendicular a propagação do feixe paraxial (eixo z), e os parâmetros φ_c e φ_a são os eixos da orientação dos efeitos de coma e astigmatismo respectivamente. Isso também explica o porquê de não haver um parâmetro angular para aberração esférica: trata-se de uma aberração simétrica em ϕ , o que fica muito claro pela seção anterior.

Considemos agora o problema prático: os experimentos que serviram de base comparatória para as simulações desenvolvidas não possuem coma e os efeitos de aberração esférica podem ser negligenciados. Portanto, somente o astigmatismo será levado em conta nas equações apresentadas. Como a fase referente ao astigmatismo possui uma

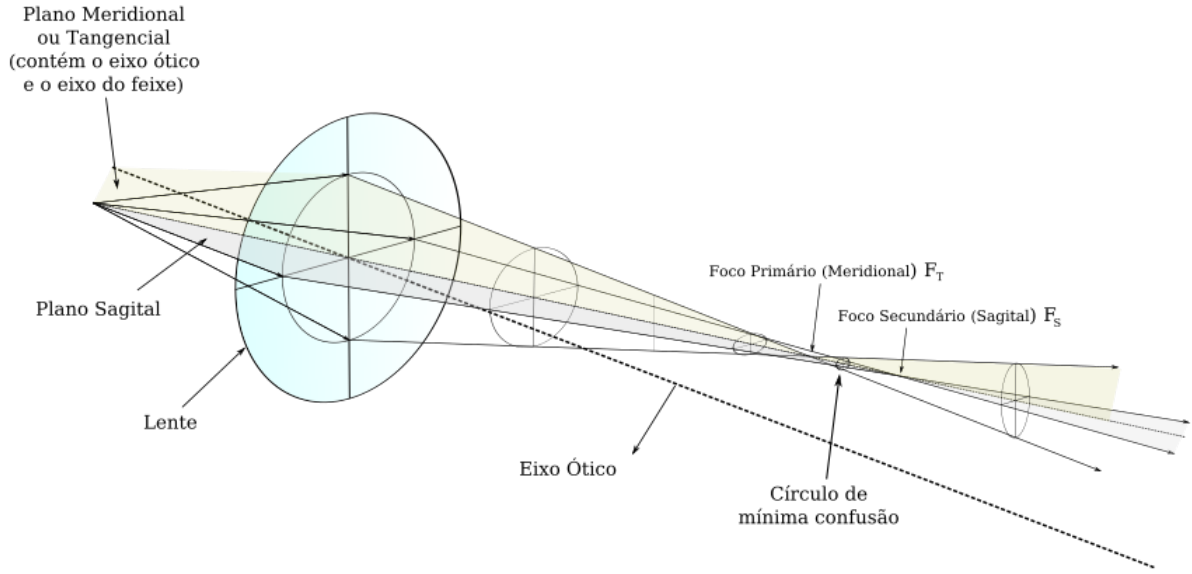


Figura 2.6: Feixe com astigmatismo.

dependência em ϕ , podemos concluir que a integral da equação 2.13 será modificada.

Uma breve explicação do efeito de astigmatismo será feita a seguir, baseada em trabalhos do grupo [14, 1, 10, 34], onde detalhes do seguinte desenvolvimento e das demais aberrações podem ser encontrados.

O astigmatismo surge ao deslocarmos o ponto de origem de um raio de luz do eixo óptico de uma lente. A reta que passa pelo ponto objeto e o centro da lente é chamado raio principal, e o plano que contém ele e o eixo óptico da lente é chamado plano meridional. O plano que contém o raio principal e é perpendicular ao plano meridional é chamado plano sagital.

Dessa forma, os raios de luz que emergem do ponto deslocado do eixo óptico formarão um cone assimétrico incidente na lente. Os raios que estão contidos no plano meridional se encontrarão no foco meridional F_T ao passar pela lente, enquanto os que estão contidos no plano sagital se encontrarão no foco sagital F_S . A figura 2.6 ilustra os planos meridional e sagital e os respectivos focos. Como podemos ver, a seção reta do feixe forma elipses, e seu eixo alongado gira 90 de direção quando passa pelo círculo de menor confusão, também chamado de foco difratado. Esse alongamento ocorre, portanto, no *spot* (a

imagem formada por um feixe) do laser, o que torna fácil a identificação dessa aberração em sistemas óticos.

Para o caso em que o ponto que emite os raios está localizado sobre o eixo ótico, os planos meridional e sagital são indistinguíveis e todos os raios se encontram no mesmo ponto, recuperando o caso em que não há astigmatismo.

Podemos expressar o astigmatismo de uma forma alternativa (porém análoga) ao formalismo de Seidel: o formalismo de Zernike. Os polinômios de Seidel, apesar de serem linearmente independentes, não formam uma base ortogonal, enquanto os polinômios de Zernike formam. O centro de coordenadas difere também entre os dois formalismos: o de Seidel usa o foco gaussiano, enquanto o de Zernike usa o foco difratado [14]. A fase de Zernike é [35, 34]:

$$\Phi_{astigmatismo}(\theta, \phi) = 2\pi A_{ast} \left(\frac{\sin \theta}{\sin \theta_0} \right)^2 \cos 2(\phi - \varphi_a), \quad (2.28)$$

onde A_{ast} é o parâmetro de astigmatismo no formalismo de Zernike, que será o usado para realizar os cálculos numéricos.

Podemos relacionar A_{ast} e A'_a observando que $\cos 2(\phi - \varphi_a) = 2 \cos^2(\phi - \varphi_a) - 1$. Podemos concluir que A'_a no formalismo de Seidel é igual a $2A_{ast}$ no formalismo de Zernike, e este último possui uma fase adicional, que pode ser interpretada como um desfocamento do feixe, ou seja, um deslocamento rígido do perfil de intensidade ao longo do eixo de propagação [35].

Uma vez apresentadas todas as correções feitas ao modelo MD, vamos apresentar as expressões para força em termos dos coeficientes de multipolo.

2.8 Força ótica em termos da expansão em multipolos

Como apresentado no começo do capítulo, o método para se obter a força na pinça ótica é resolver a integral 2.4. Como o momento se conserva nesse sistema, podemos

analisar a força sobre o centro espalhador escolhendo uma superfície s fechada que o englobe e calcular o fluxo de momento através dela. A forma mais fácil de fazê-lo é escolhendo uma superfície esférica com raio tendendo a infinito. Podemos argumentar também que a integral envolvendo o vetor de Poynting não contribui para a força, pois este é harmônico no tempo e a média temporal se anula [33]. No limite que tal superfície está no infinito, usamos as expressões assintóticas para as funções de Bessel (com dependência em kr) que aparecem nos potenciais de Debye.

Portanto, a expressão para as contribuições de espalhamento e extinção do fator de eficiência na direção z , para um ângulo ψ da placa de quarto de onda, corrigida para aberração esférica e astigmatismo, tem a forma [34]:

$$Q_{sz}(\rho, \phi, z) = -\frac{4\gamma^2}{AN} \operatorname{Re} \sum_{jm\sigma} \left[\frac{\sqrt{j(j+2)(j+m+1)(j-m+1)}}{j+1} \left((a_j a_{j+1}^* + b_j b_{j+1}^*) \times \right. \right. \\ \left. \mathcal{G}_{j,m}^{(\sigma)} \mathcal{G}_{j+1,m}^{(\sigma)*} (1 - \sigma \sin 2\psi) + (a_j a_{j+1}^* - b_j b_{j+1}^*) \mathcal{G}_{j,m}^{(\sigma)} \mathcal{G}_{j+1,m}^{(-\sigma)*} \cos 2\psi e^{i2\sigma(\phi-\psi)} \right) + \\ \left. \frac{2j+1}{j(j+1)} m \sigma a_j b_j^* (|\mathcal{G}_{j,m}^{(\sigma)}|^2 (1 - \sigma \sin 2\psi) - \mathcal{G}_{j,m}^{(\sigma)} \mathcal{G}_{j,m}^{(-\sigma)*} \cos 2\psi e^{i2\sigma(\phi-\psi)}) \right], \quad (2.29)$$

$$Q_{ez}(\rho, \phi, z) = \frac{2\gamma^2}{AN} \operatorname{Re} \sum_{jm\sigma} (2j+1) \mathcal{G}_{j,m}^{(\sigma)} \left[(a_j + b_j) \mathcal{G}_{j,m}^{C,(\sigma)*} (1 - \sigma \sin 2\psi) + (a_j - b_j) \mathcal{G}_{j,m}^{C,(-\sigma)*} \cos 2\psi e^{i2\sigma(\phi-\psi)} \right]. \quad (2.30)$$

Os somatórios nos fatores de eficiência variam da seguinte forma: $j = 1, 2, \dots, \infty$, $m = -j, -j+1, \dots, j-1, j$ como na equação 2.11, e o índice das polarizações $\sigma = +1, -1$, como na equação 2.18. O coeficiente de multipolo $\mathcal{G}_{j,m}^{(\sigma)}(\rho, \phi, z)$ tem a forma:

$$\mathcal{G}_{j,m}^{(\sigma)}(\rho, \phi, z) = \int_0^{\theta_0} d\theta_k \sin \theta_k \sqrt{\cos \theta_k} e^{\gamma^2 \sin^2 \theta_k} T(\theta_k) d_{m,\sigma}^j(\theta_w) f_m^{(\sigma)}(\rho, \phi, z) e^{\Phi_{g-w}(\theta_k) + k_w z \cos \theta_w}. \quad (2.31)$$

A função $f^{(\sigma)}(\rho, \phi, z)$ usada nos coeficientes de multipolo é:

$$f^{(\sigma)}(\rho, \phi, z) = \sum_{s=-\infty}^{\infty} (-i)^s J_s \left(2\pi A_{ast} \frac{\sin^2 \theta_k}{\sin^2 \theta_0} \right) J_{2s+m-\sigma}(k\rho \sin \theta_k) e^{i2s(\varphi_a - \phi)}, \quad (2.32)$$

onde J_m são as funções de Bessel cilíndricas do primeiro tipo. Repare que essa função carrega a dependência de \mathbf{Q} com os parâmetros de astigmatismo A_{ast} e φ_a , assim como com as coordenadas z e ρ .

O fator $\gamma = f/\omega_0$ é a razão entre a distância focal e a cintura do feixe na entrada da objetiva, enquanto o fator A , denominado *filling factor*, é a fração de potência que é transmitida pela objetiva. Deixamos para o apêndice A a expressão para o coeficiente de multipolo $\mathcal{G}_{j,m}^{C,(\sigma)}$, além das expressões para as componentes radiais e azimutais do fator de eficiência Q_ρ e Q_ϕ , e dos multipolos $\mathcal{G}_{j,m}^{\pm,(\sigma)}$ dos quais os dois últimos dependem.

No capítulo 3 serão descritas as medidas feitas com o aparato da pinça ótica. As forças não são medidas diretamente: como as microesferas estão em movimento Browniano na solução, quando pinçadas elas passam a flutuar ao redor da posição de equilíbrio na pinça. Seu movimento pode ser descrito por meio de um potencial harmônico, caracterizado por valores para as constantes elásticas da pinça. Temos, então, a constante transversa κ_ρ definida por[9]:

$$\kappa_\rho = -\frac{n_1 P}{c} \frac{\partial Q_\rho}{\partial \rho} \Big|_{\rho=0, z=z_{eq}}, \quad (2.33)$$

onde P é a potência do laser; e a constante de torção [34]:

$$\kappa_\phi = \frac{n_1 P}{c} \frac{\partial Q_\phi}{\partial \rho} \Big|_{\rho=0, z=z_{eq}}. \quad (2.34)$$

O importante de observarmos aqui é a dependência de Q_z com ψ , que será um parâmetro livre no experimento e portanto na simulação. Podemos identificar nas expressões 4 tipos de termos: com multipolos com mesmo índice de polarização $\mathcal{G}^{(+1)}\mathcal{G}^{(+1)*}$ e $\mathcal{G}^{(-1)}\mathcal{G}^{(-1)*}$, e com índices invertidos $\mathcal{G}^{(+1)}\mathcal{G}^{(-1)*}$ e $\mathcal{G}^{(-1)}\mathcal{G}^{(+1)*}$. Os dois primeiros termos são proporcionais, respectivamente, a $(1 - \sin 2\psi)$ e $(1 + \sin 2\psi)$, e os dois últimos, a $\cos 2\psi e^{i2\psi}$ e $\cos 2\psi e^{-i2\psi}$, como foi discutido na seção 2.5. Como podemos ver nas expressões para Q_{ez} , a dependência com ψ está na parte real de $(a_j - b_j)(\mathcal{G}_{j,m}^{(\sigma)}\mathcal{G}_{j,m}^{C,(-\sigma)*} \cos 2\psi e^{i2\sigma(\phi-\psi)})$. Outras vezes, a dependência será na parte imaginária de um produto como esse, como por exemplo em $Q_{e\rho}$ (equação A.1), onde o produto é $(a_j - b_j)(\mathcal{G}_{j,m}^{(\sigma)}(\mathcal{G}_{j,m+1}^{-,(-\sigma)*} - \mathcal{G}_{j,m-1}^{+,-(\sigma)*}) \cos 2\psi e^{i2\sigma(\phi-\psi)})$.

Explicitar a soma em σ é de grande importância para os cálculos numéricos, pois podemos calcular esses 4 termos de forma independente, e teremos o valor de Q_z para qualquer ângulo da placa de quarto de onda.

2.9 Interação Spin-Órbita

Uma das características da pinça ótica que faz com que a modelagem teórica seja tão difícil é o fato de que o feixe que emerge da objetiva é muito focalizado, e portanto não paraxial. Um dos efeitos resultantes da focalização do feixe é a conversão de momento angular de spin do feixe, associado à polarização (ou helicidade) do campo, em momento angular orbital [15]. O momento angular orbital insere uma fase com dependência na variável de posição angular cilíndrica ϕ .

Evidências experimentais apontam que o campo espalhado por uma microesfera no aparato de pinça ótica pode carregar mais momento angular do que o campo incidente. Usamos o efeito de conversão de momento angular de spin para orbital junto com a teoria MD para pinça ótica para trazer luz a esse fenômeno.

De uma forma simples, podemos entender essa transferência de momento angular considerando uma superposição de ondas planas circularmente polarizadas, onde os vetores \mathbf{k} fazem um ângulo θ com o eixo z , da mesma forma que fizemos no começo da seção 2.3.

No contexto de campos paraxiais, podemos separar as componentes do momento angular em duas partes, uma de spin associada à helicidade do feixe, e outra associada ao momento angular orbital, caracterizado pela fase $e^{il\phi}$, presente nos modos Laguerre-Gaussianos [33].

Podemos estender essa distinção de momentos angulares para o caso de ondas planas. O momento angular de spin permanece associado à polarização. O momento angular orbital surge com rotações da onda plana, onde o vetor \mathbf{k} rotacionado define a nova direção de propagação e os vetores do campo \mathbf{E} (perpendiculares a \mathbf{k}) sofrem um transporte paralelo ao longo da esfera centrada na origem do espaço de Fourier. A rotação do

campo vetorial \mathbf{E} dará origem a uma fase geométrica $\Phi_g = -\sigma\phi \cos \theta$, onde $\sigma = \pm 1$ indica a polarização. Ao considerar um cone de vetores de onda \mathbf{k} rotacionados, o campo resultante terá uma fase global de $\Phi_{g0} = 2\pi\sigma(1 - \cos \theta)$ [15]. Portanto, a variação de momento angular intrínseco devido às rotações e superposição das ondas planas é dado por $\Delta L_z = -\Delta S_z = \Phi_{g0}/2\pi$.

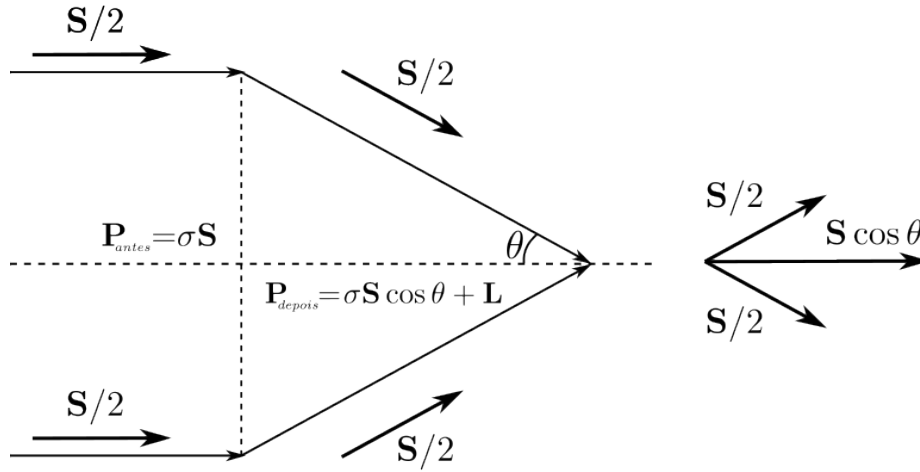


Figura 2.7: Ilustração da conservação do momento angular. $\mathbf{P}_{antes} = \sigma\mathbf{S}$ é o momento angular intrínseco de uma onda plana com polarização σ , onde só há componente de spin. Após ser rotacionada, a onda passa a apresentar uma componente de momento angular orbital \mathbf{L} .

Podemos visualizar esse efeito de uma forma mais simples. Assumindo que o momento angular intrínseco total se conserve, vemos que a soma dos vetores diametralmente opostos terão suas componentes radiais se anulando, enquanto as na direção axial se somam, como mostra a figura 2.7. Se \mathbf{P} é o momento angular total do feixe, e este se conserva ao passar pela objetiva ($\mathbf{P}_{antes} = \mathbf{P}_{depois}$), e \mathbf{S} e \mathbf{L} são os momentos angulares de spin e orbital, temos a seguinte relação [15]:

$$\mathbf{S} = \sigma \cos \theta \mathbf{P}, \quad \mathbf{L} = \sigma(1 - \cos \theta) \mathbf{P}. \quad (2.35)$$

Uma vez que haja momento angular orbital incidindo na microesfera, podemos fazer um paralelo com a transferência de momento linear para explicar o excesso de momento

angular no campo espalhado.

Como discutido na seção 2.3, os termos de extinção representam a quantidade de momento que é removida do campo incidente; enquanto o termo de espalhamento está relacionado à transferência de momento para o campo espalhado. Podemos entender que, no regime de pequenos raios, o termo que domina na expressão da força é o de extinção, pois se o raio da esfera é muito menor que o comprimento de onda do laser, pode-se concluir que o campo espalhado terá magnitude menor do que a do campo incidente. Assim, $\text{Re}(\mathbf{E}_{IN} \cdot \mathbf{E}_S^*)$ domina sobre $\mathbf{E}_S \cdot \mathbf{E}_S^*$ nesse caso.

Quanto maior for o centro espalhador, maior será o campo espalhado, e a partir de um certo raio, o termo de espalhamento da força domina. A imagem 2.8 mostra o comportamento da constante de torção κ_ϕ como função do raio da esfera aprisionada.

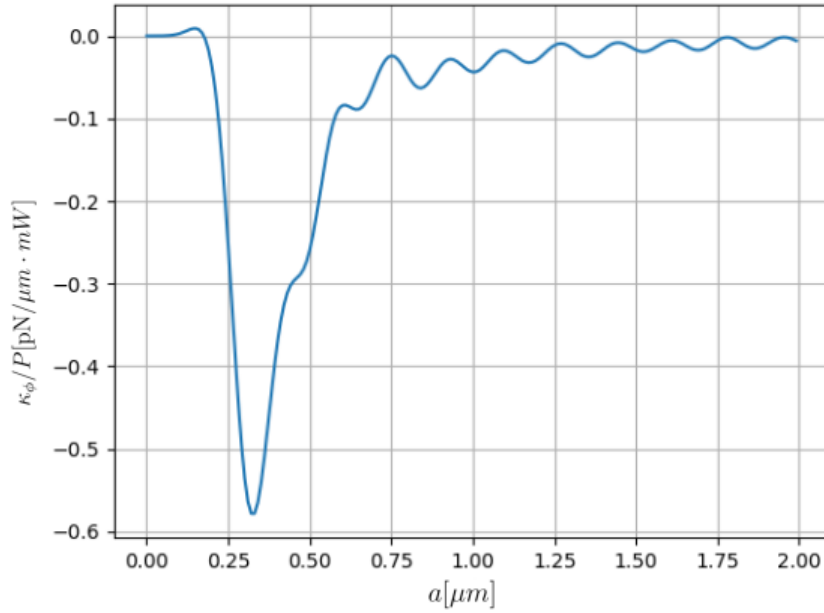


Figura 2.8: Constante de torção κ_ϕ em função do raio da microesfera. O comprimento de onda do laser é de 1064nm , a distância L entre o foco e a lamínula é de 4,5 unidades de raio e a polarização $\sigma+$. Astigmatismo não é levado em conta nessa simulação.

Podemos observar que na região em que o raio a é menor que $0,15\mu\text{m}$, a constante de torção é positiva, e o torque indica um ganho de momento angular na mesma direção

ao de spin do campo incidente. Sendo essa a região onde o termo de extinção domina, podemos inferir que o campo está cedendo momento angular para a microesfera, e esta não está espalhando momento angular o suficiente para sofrer torque negativo.

Quando o raio aumenta, a componente de espalhamento da força começa a dominar, e efeitos de torque negativos tendem a prevalecer. Podemos concluir que o campo espalhado carrega momento angular em excesso. Como o momento angular de spin do campo espalhado não pode ser maior que o do incidente, por este último já ser máximo, o excesso de momento angular tem que ser de origem orbital.

Capítulo 3

Caracterização de parâmetros físicos

Nesse capítulo apresentamos dois métodos para caracterizar parâmetros físicos com o aparato de pinças óticas. Apresentaremos primeiro o experimento de transferência de momento angular, que usamos para caracterizar o astigmatismo do sistema através da simulação do experimento. O segundo método trata da análise das condições de equilíbrio axial da microesfera, com a qual podemos caracterizar a absorção da microesfera.

3.1 Caracterização do astigmatismo por meio da análise do experimento de transferência de momento angular

Apresentaremos nessa seção o experimento para medir o torque ótico sobre a microesfera aprisionada, bem como a simulação computacional desse experimento. O experimento foi realizado em 2018 por Diniz *et al.* [34, 1]. Detalhes do procedimento experimental, do material e das ferramentas usadas nesse experimento podem ser encontradas nas referências citadas, e não serão abordados nesse trabalho.

A descrição do experimento deve ser dividida em partes. De forma geral, temos um feixe laser que incide sobre a traseira de uma lente objetiva de um microscópio invertido. O feixe focalizado incide dentro de um porta-amostra que contém um meio fluido com microesferas diluídas.

Este porta-amostra está acoplado a um suporte preso ao estágio do microscópio que

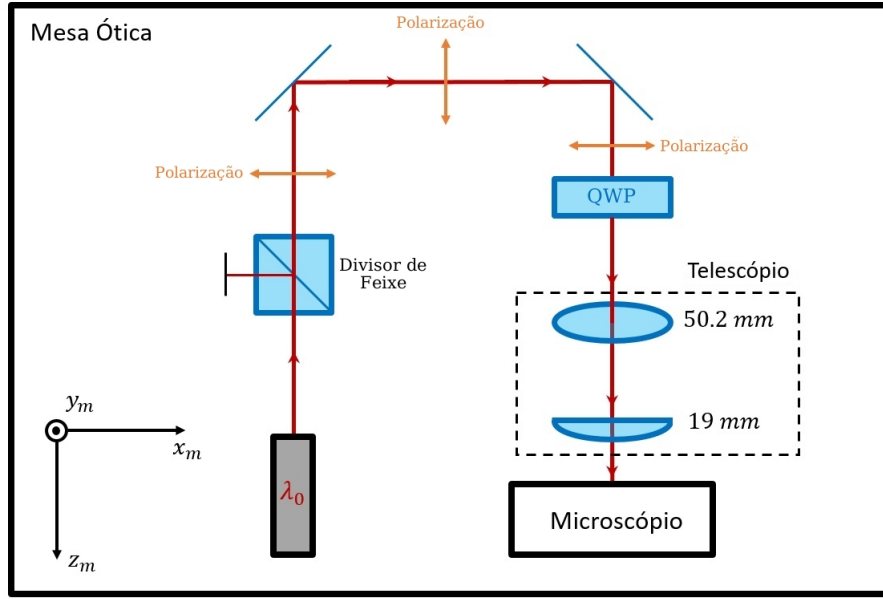


Figura 3.1: Propagação do feixe paraxial até entrar no microscópio e montagem da mesa ótica.

pode ser movido em qualquer direção por meio de um controle piezo-elétrico ou manualmente. Tudo isso forma o aparato da pinça ótica, e deixaremos para o final a descrição do experimento que foi simulado.

Primeiramente, trataremos do feixe paraxial: trata-se de um laser com perfil gaussiano (TEM_{00}) de comprimento de onda $\lambda_0 = 1064nm$ e cintura $\omega_0 = 5.82mm$. Suas características são importantes para definir o feixe focalizado pela objetiva, como vimos no capítulo anterior.

A largura da cintura ω_0 do feixe é essencial para garantir a condição de aprisionamento da microesfera, pois se esta for muito menor que a entrada da objetiva, teremos o que se chama de *underfilling*, favorecendo a pressão de radiação e impedindo o aprisionamento. Como, para alguns tamanhos de esfera aprisionada, a largura do feixe não é grande o suficiente, usa-se um expensor de feixes, que consiste em um par de lentes, sendo uma biconvexa e a outra convexa, para se ampliar o perfil deste.

O feixe laser, logo após ser gerado, incide sobre um divisor de feixe que o polariza linearmente. A direção de polarização é paralela à mesa ótica. No caso em que o feixe

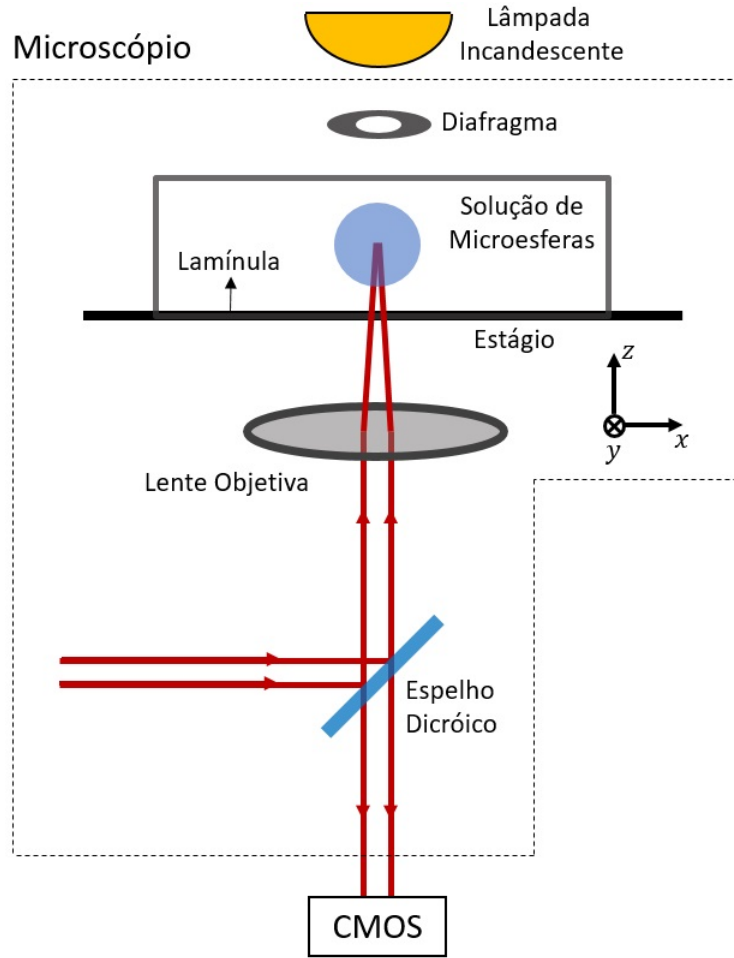


Figura 3.2: Propagação do feixe dentro do microscópio. O espelho dicróico reflete o feixe paraxial para a entrada da objetiva, e deixa a luz visível proveniente da amostra passar para a câmera CMOS, fornecendo as imagens de onde obtemos os dados.

entra no porta-amostra com polarização linear, a direção de polarização passa a definir o eixo x das nossas coordenadas. É em relação a esse eixo que vamos medir o ângulo ϕ das coordenadas cilíndricas da microesfera e o ângulo φ_a do eixo do astigmatismo. Como já foi explicado, o astigmatismo gera um alongamento no perfil do feixe, fazendo com que o *spot* tenha um formato elipsoidal ao invés de circular. O ângulo entre a direção do alongamento e o eixo de polarização linear (eixo x) é o ângulo φ_a . Dessa forma, a medida desse ângulo poder ser realizada uma forma muito fácil uma vez que se obtenha a imagem do perfil do feixe. O valor medido e usado na simulação foi $\varphi_a = (1 \pm 1)$.

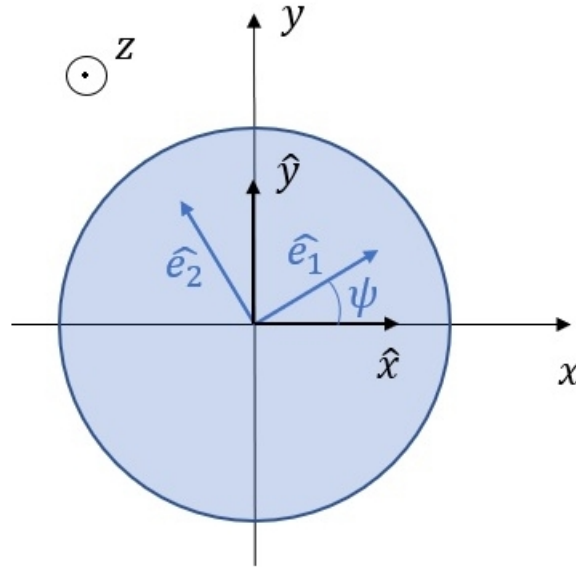


Figura 3.3: Ilustração da placa de quarto de onda (QWP). O material da placa é um material birrefringente, onde o índice de refração do eixo \hat{e}_1 , chamado eixo rápido, é maior que o índice de refração do eixo \hat{e}_2 , chamado eixo lento. O eixo rápido faz um ângulo ψ com a direção x , que é definida pela direção da polarização do feixe incidente. As componentes do feixe incidente na direção \hat{e}_1 e \hat{e}_2 ganham fases diferentes, e assim a polarização do feixe passa a ser elíptica.

Antes de entrar no microscópio, o feixe passa por uma placa de quarto de onda (QWP). O eixo rápido da placa faz um ângulo (controlável) ψ com a direção de polarização linear (eixo x), como discutido na seção 2.5 e mostrado na equação 2.18. Inicialmente o feixe tem polarização linear, ou seja, $\psi = 0$. A direção e sentido de propagação do feixe definem o eixo z do nosso sistema de coordenadas. Ao entrar no microscópio, o feixe entra na objetiva de imersão em óleo. A objetiva tem abertura numérica nominal de $NA = 1.4$. Como a abertura numérica é maior que o índice de refração da água ($n_1 = 1.332$), o ângulo de abertura do feixe incidente sobre a microesfera será $\theta_0 = \arcsin(n_1/n)$, onde $n = 1.51$ é o índice de refração do vidro. Isso acontece porque parte do feixe que emerge da objetiva incide sobre a interface vidro-água com ângulos maiores que o ângulo crítico, gerando reflexão interna total e ondas evanescentes dentro do porta-amostra. A contribuição para a força das ondas evanescentes não são levadas em conta no modelo teórico, pois

assumimos que o centro espalhador está a alguns comprimentos de onda de distância da interface.

Assim, o feixe com a polarização determinada pela QWP entra no microscópio, sendo refletida por um espelho dicróico e incidindo na objetiva. O espelho dicróico reflete a luz com comprimento de onda igual do laser, mas transmite comprimentos de onda de luz visível, que é um pouco menor que o do laser (ver figura 3.2). Isso permite que a luz oriunda do condensador do microscópio ilumine o porta-amostra e forme uma imagem da microesfera aprisionada. Usando uma câmera podemos fazer filmes e obter as imagens de onde serão tirados os dados.

A solução dentro do porta-amostra é composta por microesferas de poliestireno dispersas em água deionizada. A parte real do índice de refração do poliestireno é de $\text{Re}(n_2) = 1.576$, e a parte imaginária, responsável pela absorção de luz por esse material, é de $\text{Im}(n_2) = 0.0011$ [36].

Uma vez posicionado o porta-amostra no microscópio com a solução de microesferas, podemos usar o controle manual para mover a posição do plano focal e buscar esferas para serem aprisionadas.

Após o aprisionamento de uma microesfera, é feito um procedimento para determinar a posição de equilíbrio no eixo z . Para isso, vamos definir as coordenadas que estamos usando e que serão usadas na simulação. O eixo z tem como origem o foco paraxial (note a diferença em relação ao modelo teórico, em que a origem se encontra no centro da microesfera) e a coordenada z será a posição do centro da microesfera. A coordenada da interface será, para fins práticos, $-L\hat{z}$, com L sendo o módulo da distância entre o plano focal e o plano da interface (como definido na figura 2.5).

No procedimento, deslocamos a microesfera aprisionada até que ela toque a lamínula de vidro. Nesse momento temos o vínculo $z_{eq} = a - L_0$, ou seja, a posição de equilíbrio estável da microesfera define uma distância inicial entre o plano focal e a interface (L_0). Por causa do efeito de aberração esférica, discutido na seção 2.6, a posição de equilíbrio

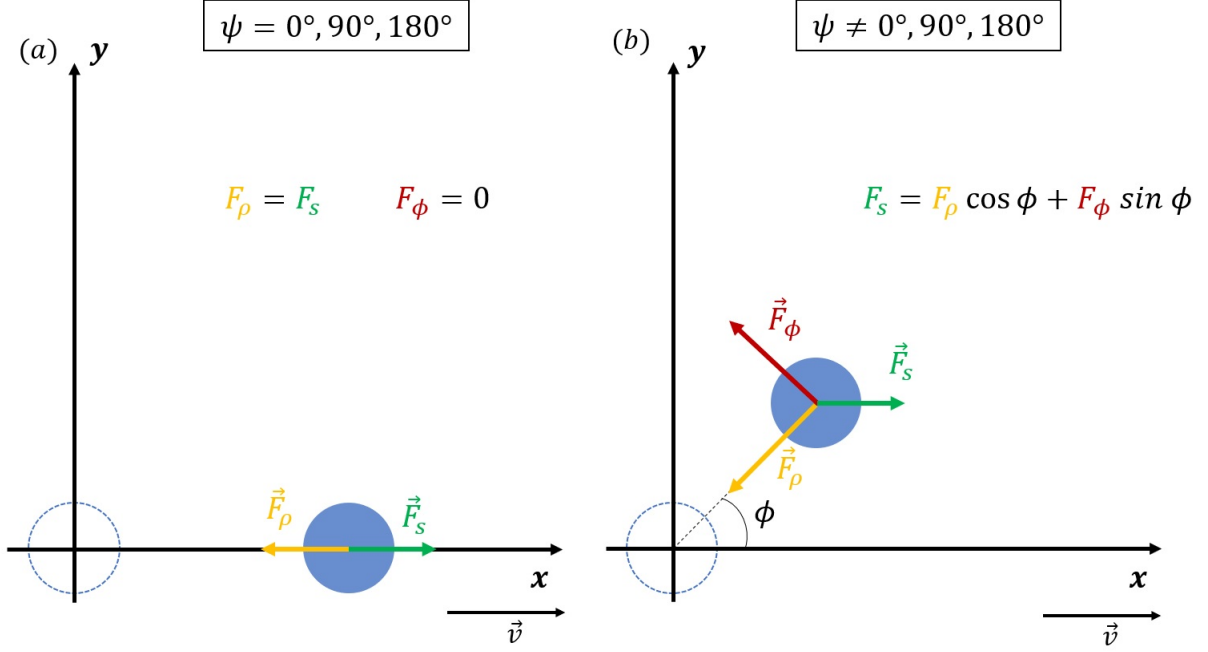


Figura 3.4: Equilíbrio de forças sobre a microesfera deslocada do eixo óptico.

tende a ser um pouco abaixo do plano focal, e por isso, usualmente temos $z_{eq} < 0$.

Esse detalhe é muito importante para a simulação, pois este vínculo torna possível determinar essa distância inicial L_0 . Depois de encostada a microesfera na lamínula, deslocamos o estágio do microscópio $3\mu m$ para baixo. O foco tem um deslocamento efetivo de $3\frac{n_1}{n}\mu m$, por causa do efeito de refração discutido na seção 2.6 [9].

Com a microesfera longe da lamínula, observamos seu movimento Browniano ao redor da posição do *spot* do laser. A seguir, o estágio do microscópio é movido na direção x com o controle piezo-elétrico. O deslocamento tem uma velocidade de $v_1 = 250\mu m/s$. Faz-se, em seguida, um movimento no sentido contrário com mesma velocidade, e repete-se todo esse procedimento mais duas vezes, na primeira com velocidade de $v_2 = 150\mu m/s$ e na segunda $v_3 = 62.5\mu m/s$.

Cada um desses movimentos arrasta o fluido dentro do porta-amostra, e portanto faz com que o fluido ao redor da esfera se desloque também. Dessa forma, a microesfera sofre uma força de arrasto (força de Stokes), dada pela lei de Stokes-Faxen:

$$\vec{F}_s = \beta \vec{v}, \quad (3.1)$$

onde \vec{v} é a velocidade do porta-amostra e β é uma constante que depende da viscosidade do meio e da razão entre o raio da microesfera e a distância entre seu centro de massa e a interface.

Essa força de arrasto desloca a microesfera da posição de equilíbrio da pinça ótica (do centro do *spot*). Uma nova posição de equilíbrio é obtida com $\vec{F}_\phi + \vec{F}_\rho = -\vec{F}_s$. Uma vez que $\vec{F}_s = F_s \hat{x}$, podemos projetar \vec{F}_ϕ e \vec{F}_ρ no eixo x e encontrar a condição de equilíbrio: $F_s = F_\rho \cos \phi + F_\phi \sin \phi$.

Como vimos anteriormente, as forças óticas \vec{F}_ϕ e \vec{F}_ρ são lineares em ρ quando próximas da posição de equilíbrio. Como a força de arrasto não desloca a microesfera da pinça o suficiente para que a força não seja mais linear, o que esperamos é que o ângulo ϕ seja constante para qualquer velocidade imposta pelo piezo-elétrico (como mostrado na figura 3.5).

Dessa forma, cada velocidade determina uma posição de equilíbrio, ao redor da qual a microesfera apresenta movimento Browniano. As posições médias da esfera para cada velocidade formam uma reta que determinam ϕ .

É importante observar que esse ângulo será muito pequeno. Podemos aproveitar esse fato e aproximar a projeção das forças no eixo y $F_\rho \sin \phi = F_\phi \cos \phi$ como:

$$\frac{F_\phi}{F_\rho} = \tan \phi \approx \phi. \quad (3.2)$$

Com a linearidade da força $F_\phi/F_\rho = \kappa_\phi \rho / \kappa_\rho \rho$, temos:

$$\frac{\kappa_\phi}{\kappa_\rho} \approx \phi. \quad (3.3)$$

Por fim, o experimento consiste em medir o ângulo ϕ para várias polarizações do feixe incidente. No caso de polarização linear ($\psi = 0$), espera-se que deslocamentos da microesfera ao longo da direção x não produzam rotação em torno do eixo do feixe, que

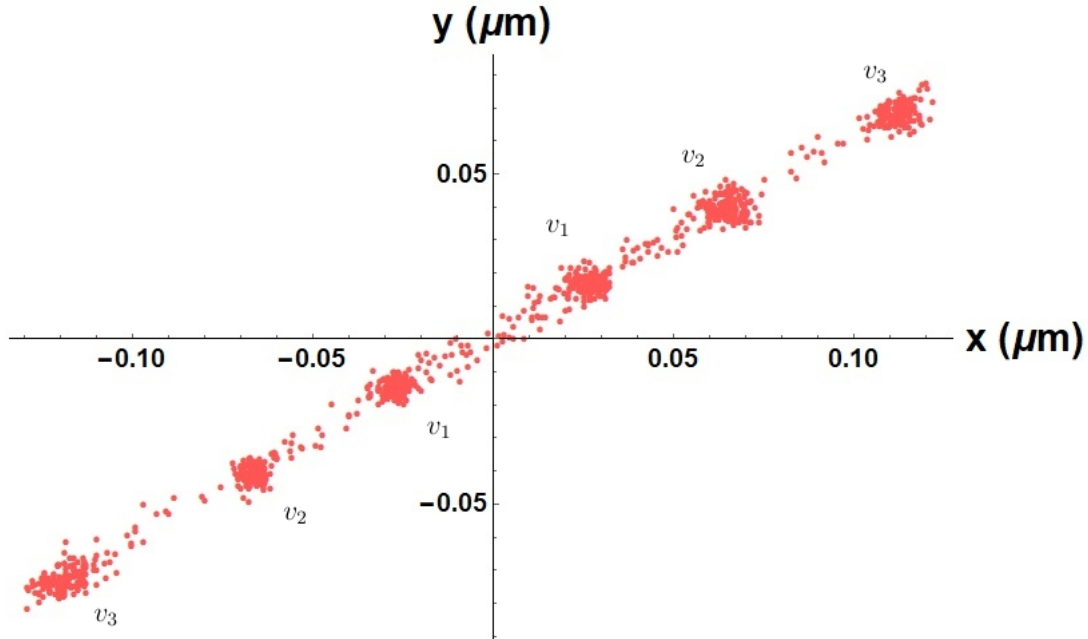


Figura 3.5: Pontos experimentais do experimento. São mostradas várias baterias de dados, cada uma representada por uma velocidade. Podemos ver o efeito do movimento Browniano ao redor das posições de equilíbrio. As figuras 3.4 e 3.5 são cortesia de Kainã Diniz [1].

é o caso de (a) na figura 3.4. Se o deslocamento fosse em outras direções, poderíamos esperar uma força na direção ϕ causada pela assimetria do feixe. Da mesma forma, o astigmatismo pode gerar essa força azimutal pela quebra da simetria de rotação que este gera no *spot*. Nos pontos experimentais podemos ver que o eixo do astigmatismo é de aproximadamente 1, e por isso não observamos rotação nenhuma quando $\psi = 0$. Esse resultado é intuitivo, porque o feixe incidente não possui momento angular, e portanto não deve haver torques nesse sistema.

Por outro lado, quando o feixe tem uma polarização elíptica ($\psi \neq 0$), o feixe incidente passa a ter momento angular, e esperamos que a posição de equilíbrio da microesfera não seja mais em cima do eixo x .

Faremos agora a descrição da simulação do experimento apresentado. O trabalho tem como objetivo realizar a simulação várias vezes, variando o parâmetro de astigmatismo A_{ast} e comparar o resultado com os dados experimentais.

A simulação do experimento leva em conta alguns processos que não foram explicados na seção anterior. Começamos por definir a posição inicial do foco em relação a lamínula. O fator de eficiência Q_z é calculado para várias posições onde o vínculo $z = a - L$ é válido, com $L - a$ como parâmetro de entrada para a posição z onde é calculada a força e L para a distância entre o plano focal e a interface. No experimento, esse primeiro passo é feito com $\psi = 0$.

A forma como são tratadas medidas de distância no programa é por unidades de raio. Dessa forma as distâncias ficam adimensionais, e portanto mais fáceis de se interpretar. A distância entre o foco e a interface fica definida a menos do deslocamento inicial (de $3\mu m$): $L = L_0 + 3\frac{n_1/n}{a}$ (com a em μm e L e L_0 em unidades de raio).

Após esse cálculo podemos procurar a posição de equilíbrio estável da microesfera em função da sua posição relativa ao plano focal. Fazemos $\rho = 0$ e calculamos Q_z para vários valores de z . Buscamos os pontos em que cruzam o eixo $Q_z = 0$, de forma que $Q_z(z_i) > 0$ e $Q_z(z_{i+1}) < 0$. Essa é a condição para posição de equilíbrio estável.

Com esses dois pontos podemos traçar uma reta, e como a força é linear ao redor da posição de equilíbrio, o valor de z em que $Q_z = 0$ pode ser calculado com:

$$z_{eq} = -\frac{B}{A}, \quad (3.4)$$

onde A e B são os coeficientes de ajuste da reta $Q_z(z) = Az + B$.

No experimento, a posição de equilíbrio não é diretamente medida, mas sabe-se que ela varia quando a polarização do feixe incidente muda. Levar isso em conta no código implica em calcular Q_z várias vezes até que o valor desse mude de sinal como descrito anteriormente.

Calcular tal posição de equilíbrio para cada polarização do feixe incidente seria computacionalmente muito custoso. Dessa forma, a dependência com o ângulo ψ da placa de quarto de onda é explicitada e o fator de eficiência Q_z para várias posições z da microesfera pode ser calculado para qualquer polarização uma vez só. Uma vez tendo os valores

de $Q_z(z)$ e z , podemos calcular a posição de equilíbrio em função do ângulo da placa de onda.

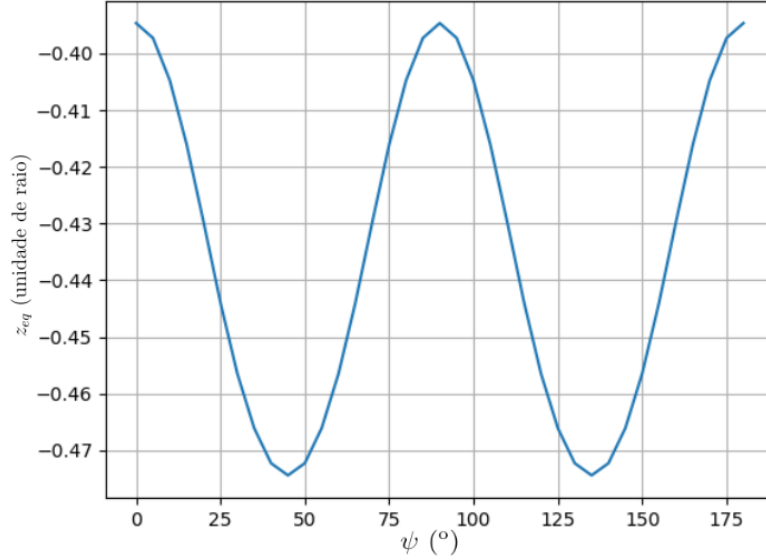


Figura 3.6: Comportamento da posição de equilíbrio em função do ângulo da placa de quarto de onda ψ . O valor do parâmetro de astigmatismo para essas posições é de $A_{ast} = 0.25$

É possível também que o intervalo em z em que se calcula o fator de eficiência Q_z não possua nenhuma posição de equilíbrio estável. Constatações experimentais nos levam a definir tal intervalo como a região próxima ao plano focal, pois vemos a microesfera focalizada na câmera. Portanto, ela só pode estar frações de unidades de raio ($a \approx 0.5\mu m$) de distância do plano focal. Assim, se o programa não encontrar tal posição de equilíbrio dentro desse intervalo, as condições de pinçamento para os parâmetros de entrada não são satisfeitos. Isso ocorre principalmente quando fazemos simulações com parâmetros de astigmatismo altos ($A_{ast} > 0.4$).

Com as posições de equilíbrio para cada ψ do experimento e a posição inicial L_0 podemos calcular κ_ϕ/κ_ρ numericamente. Assim, toda vez que a posição de equilíbrio mude, todo o cálculo tem que ser feito novamente. Por esse motivo, as posições de

equilíbrio são arredondadas até a 4^a casa decimal dos valores em unidades de raio, que corresponderia a considerar variações menores que $1nm$.

De fato, o movimento Browniano da microesfera tem amplitudes muito maiores que $1nm$, e portanto não haverá ganho em obter resultados para a posição de equilíbrio com uma precisão ainda maior. Valores para a posição de equilíbrio fornecidos pelo código que diferem por um valor menor ou igual a 10^{-5} serão arredondados para o mesmo valor. Já que a posição em que o cálculo de κ_ϕ/κ_ρ será a mesma, podemos usar a dependência explícita de suas expressões com a variável ψ , e fazer o calculo uma vez só, o que representa um bom ganho computacional.

Reproduzimos todo esse procedimento para vários valores do parâmetro de astigmatismo e comparamos o valor obtido de κ_ϕ/κ_ρ com o ângulo ϕ de rotação do experimento. Para determinar qual valor de A_{ast} melhor descreve o experimento, utilizamos o método de mínimos quadrados: subtraímos o valor de ϕ e de κ_ϕ/κ_ρ e tomamos o quadrado dessa diferença. Quanto menor for o valor desse quadrado, maior a verossimilhança com as medidas do experimento.

Resultados obtidos nas simulações indicam que o torque realizado na amostra é pouco sensível ao parâmetro de absorção de luz pela microesfera, caracterizada pela parte imaginária do índice de refração dela. A absorção de radiação é responsável por um torque positivo na amostra, por conservação de momento angular. Como esse desvio é muito pequeno no caso de microesferas pequenas, o ajuste desse parâmetro baseado nesse experimento não é possível.

Na próxima seção será discutido como efeitos de absorção exercem influências muito maiores para esferas maiores.

3.2 Caracterização do parâmetro de absorção da amostra

A parte imaginária do índice de refração vai ser responsável por um decaimento

exponencial da amplitude do campo. Por isso, quanto maior for o raio da microesfera, mais atenuado o campo eletromagnético será, e por isso esferas maiores são mais sensíveis a esse parâmetro. Por outro lado, essas microesferas apresentam constantes de torção muito pequenas (ver figura 2.8), por sondarem uma média do campo eletromagnético na região que ocupam, em contraste com as microesferas com raios entre aproximadamente $0.3\mu m$ e $0.6\mu m$, que funcionam como uma sonda local do campo. Por esse motivo as microesferas grandes não são ideais para o ajustar parâmetros com medidas de transferência de momento angular.

Microesferas com raio $a = 7.9\mu m$ foram aprisionadas no laboratório, porém simulações que incluem efeitos de absorção com $Im(n_2) = 0.002$ ([36]) não conseguem encontrar um ponto em que Q_z seja menor que zero ao longo do eixo z , ou seja, não é previsto aprisionamento no eixo axial.

A seguir será proposta uma forma de ajustar esse parâmetro utilizando análises da posição de equilíbrio da microesfera e do potencial efetivo do fator de eficiência Q_z ao longo do eixo z .

Experimentalmente, sabemos que a microesfera é aprisionada em cima do eixo z ($\rho = 0$) e próxima ao plano focal. Por isso, podemos usar o modelo para calcular o fator de eficiência Q_z nessa vizinhança e entender o comportamento da força quando a microesfera está próxima ao foco.

O simples fato de existir um ponto onde Q_z mude de sinal de positivo para negativo (equilíbrio estável) não é suficiente. Como foi dito anteriormente, a microesfera apresenta movimento Browniano perto da posição de equilíbrio. Flutuações térmicas podem ser suficientes para a microesfera fugir do aprisionamento, que ocorre quando esta possui energia suficiente para vencer a força ótica e chegar a um ponto de equilíbrio instável.

Apesar da força ótica não ser conservativa, no caso em que estamos confinados ao eixo do feixe podemos definir um potencial ótico efetivo a partir do trabalho realizado entre

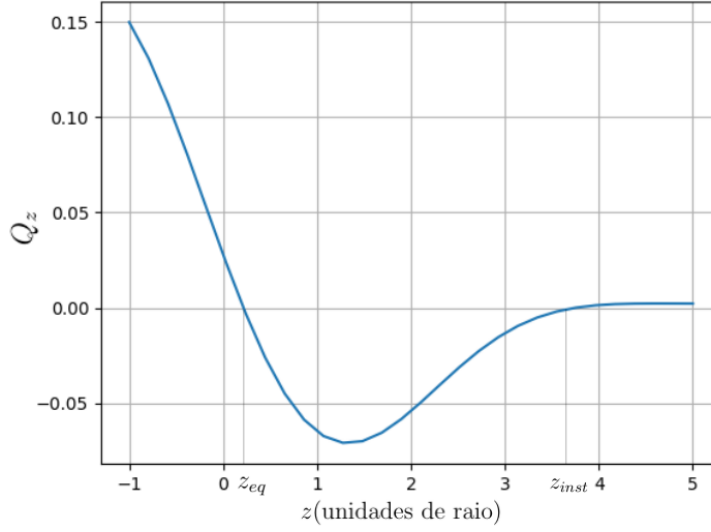


Figura 3.7: Comportamento do fator de eficiência axial em função de z . O ponto z_{eq} indicado no gráfico corresponde à posição de equilíbrio estável na direção z , enquanto o ponto z_{inst} corresponde a um ponto de equilíbrio instável. Esse último também será o ponto em que $V(z)$ será um máximo local.

dois pontos do eixo. Usando a equação 2.19, obtemos:

$$V(z) = - \int_{z_0}^z \frac{n_1 P}{c} Q_z dz + V(z_0). \quad (3.5)$$

Para uma primeira análise, o que nos importa é o tamanho da barreira potencial, que corresponde a energia necessária para a microesfera fugir do aprisionamento pelo eixo z . Por isso, podemos fazer $z_0 = z_{eq}$ e buscar o próximo ponto em que Q_z mude de sinal de negativo para positivo (equilíbrio instável), que será o máximo local do potencial. Esse valor de z será maior que z_{eq} , com sentido de z positivo na mesma direção de propagação do feixe, como podemos ver na figura 3.7.

Um critério aproximado para haver pinçamento é que a barreira potencial seja maior que o valor de flutuações típicas, que são da ordem de $10k_B T$ [2].

A região descrita na figura 3.8 representa os valores complexos do índice de refração em que haverá aprisionamento a pelo menos 3 raios de distância do plano focal. A simulação foi feita com uma esfera menor ($a = 0.5\mu m$), pois o custo computacional é

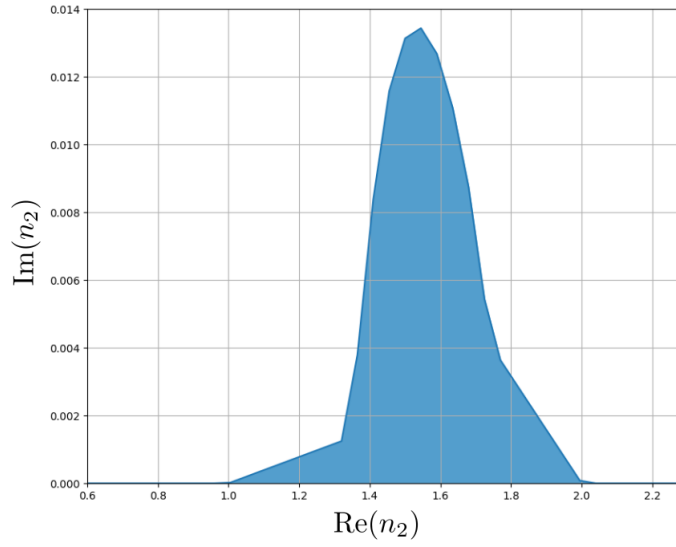


Figura 3.8: Região onde há uma posição de equilíbrio estável a pelo menos 3 unidades de raio de distância do foco. O aumento da absorção de luz pela microesfera faz com que a posição de equilíbrio se desloque no sentido positivo do eixo z (sentido de propagação).

menor e o resultado continua valendo para esferas maiores. Efeitos de aberração esférica e astigmatismo não são levados em conta nessa simulação. O interesse em estudar essa região de pinçamento é determinar um limite superior para a parte imaginária do índice de refração do material da microesfera, e então realizar as simulações nesse intervalo.

Capítulo 4

Resultados

Nesse capítulo discutiremos os resultados obtidos nas simulações descritas no capítulo anterior. Resultados obtidos por meio de métodos alternativos são usados para comparação e validação.

4.1 Transferência de momento angular e caracterização do astigmatismo

Primeiramente, devemos observar que o efeito de torque negativo é dependente de aberrações óticas. O astigmatismo desempenha um papel de atenuar esse efeito, podendo até trocar o sinal de κ_ϕ [34]. No nosso caso, os ângulos de rotação da microesfera ao redor da posição de equilíbrio são simplesmente diminuídos. Isso nos possibilita tentar ajustar uma curva simulada com o modelo MDSA+ com o parâmetro de astigmatismo A_{ast} como variável livre.

Usamos um método de mínimos quadrados para realizar esse ajuste. Dado o conjunto de pontos experimentais ϕ_i^{exp} , calculamos a função erro E do conjunto de pontos simulados ϕ_i^{sim} , onde cada índice i corresponde a um ângulo ψ_i da placa de quarto de onda. A função erro é definida como:

$$E(A_{ast}) = \sum_i [\phi_i^{exp} - \phi_i^{sim}(A_{ast})]^2. \quad (4.1)$$

A figura 4.1 mostra o conjunto de pontos experimentais em vermelho e os pontos para

a teoria MDSA+ com parâmetros de astigmatismo diferentes em azul. Podemos ver que a ausência de correções para o astigmatismo superestima o efeito de torque negativo (figura da esquerda), enquanto o valor de $A_{ast} = 0.36$, considerado alto, faz com que o torque quase desapareça. Isso é explicado pelo efeito de degradação da região focal causado pelo astigmatismo.

Ao considerar parâmetros de astigmatismo altos, começamos a ter problemas para achar uma posição de equilíbrio para a microesfera, e os ângulos de rotação simulados passam a ser muito menores que os valores obtidos experimentalmente.

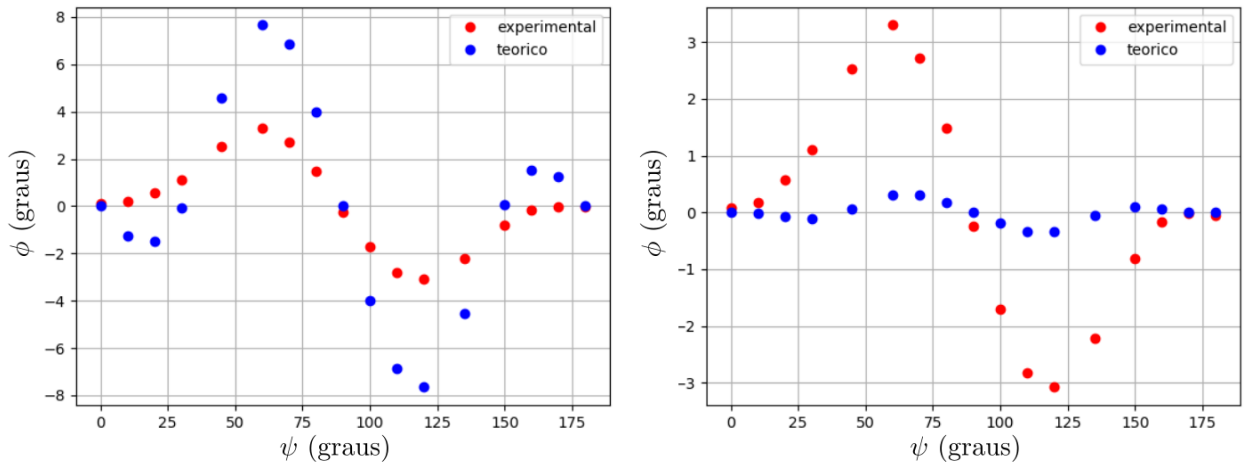


Figura 4.1: Simulação com $A_{ast} = 0$ (à esquerda) e $A_{ast} = 0.36$ (à direita).

A simulação dos vários parâmetros de astigmatismo mostraram que o valor que minimiza a função erro é $A_{ast} = 0.24 \pm 0.01$ (figura 4.2). A incerteza foi estimada tomando 20% do valor da função erro no mínimo $E(0.24) = 2.65$, e acrescentando a esse valor. Obtemos, então, a tolerância do erro $E_{tol} = 3.18$. Os valores da função erro para $A_{ast} = 0.23, 0.25$ são, respectivamente, 2.96 e 3.14. Como são menores que E_{tol} , assumimos que estão dentro da barra de erro. Por outro lado, valores do parâmetro de astigmatismo maiores que 0.26 e menores que 0.22 geram erros maiores que 4.0.

Podemos ver que as contribuições mais importantes para o ajuste são os pontos em

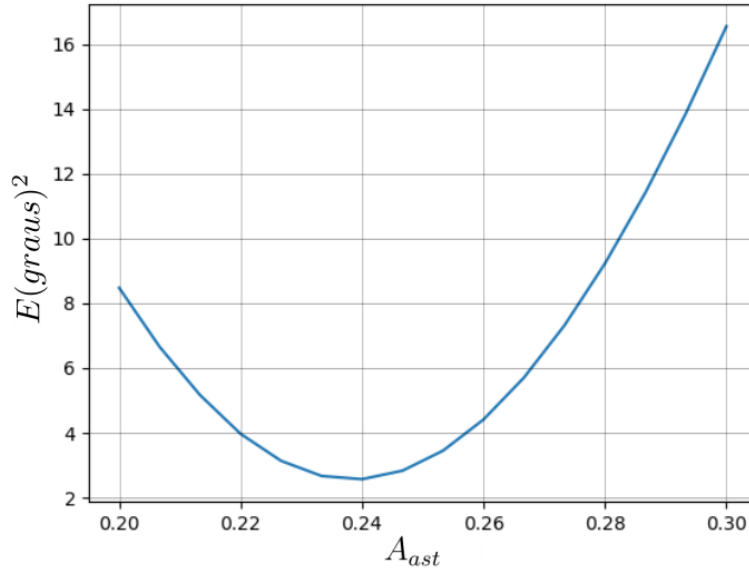


Figura 4.2: Valores da função erro (equação 4.1) em função do parâmetro de astigmatismo A_{ast} . O mínimo se encontra aproximadamente em $A_{ast} = 0.24$.

volta dos ângulos 60 e 120. As previsões do modelo para as regiões entre 0 e 30 e entre 150 e 180 são de torque positivo, enquanto o experimento apresenta torque negativo para qualquer polarização que não seja linear. De acordo com a teoria, os termos de polarização cruzada da força são os responsáveis pelo torque nessa região, o que pode indicar que essa contribuição está sendo superestimada.

Podemos notar que a região ao redor de 60 e 120 na figura 4.3 está com um bom acordo com a teoria. Comparando com o gráfico à esquerda da figura 4.1, correspondente ao caso sem astigmatismo, fica claro que a região que prediz torque positivo também é atenuada, e não interfere de forma negativa com o ajuste.

Podemos comparar o resultado obtido com o ajuste pela simulação com o resultado da caracterização por nível de cinza [10, 34]. Uma análise do *spot* do feixe refletido em diferentes planos é feita. A curva teórica é obtida por meio da propagação do feixe não paraxial [37], e o valor de A_{ast} é ajustado com medidas de intensidade do centro do *spot* do feixe em alturas diferentes do eixo de propagação. Foi obtido $A_{ast} = 0.25 \pm 0.04$ com

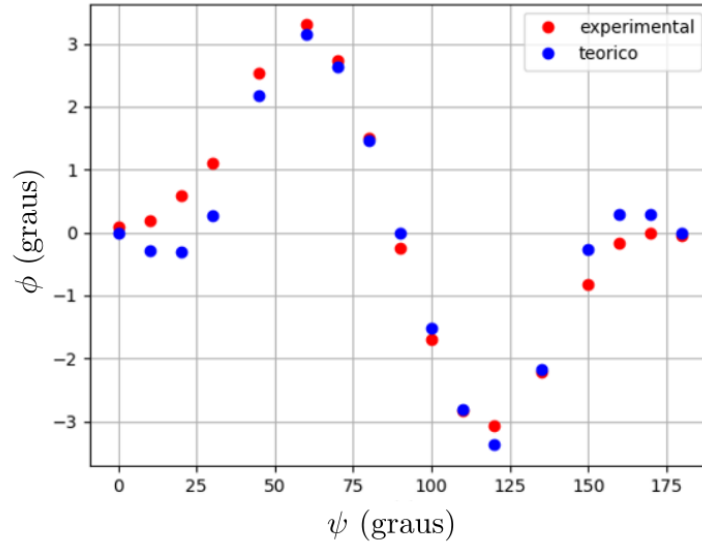


Figura 4.3: Pontos teóricos em azul, com o parâmetro $A_{ast} = 0.24$, ajustado como mínimo da função erro.

esse método, que não só está de acordo com o valor encontrado pelo ajuste dos dados de torque na microesfera, como tem a incerteza maior.

4.2 Caracterização do parâmetro de absorção da microesfera

Nessa seção, veremos os cálculos numéricos do fator de eficiência Q_z em função de z para alguns valores de $\text{Im}(n_2)$ e para alguns raios diferentes. Será apresentado também o cálculo da barreira potencial para alguns valores de $\text{Im}(n_2)$, para um valor fixo do raio da microesfera. Por fim, serão sugeridos duas formas de realizar a caracterização do parâmetro de absorção.

O valor nominal do raio das microesferas de poliestireno pinçadas é de $a = (7.9 \pm 0.1)\mu\text{m}$, e o valor encontrado na literatura para $\text{Im}(n_2)$ é 1.1×10^{-3} . Foram feitas simulações para raios entre 7.8 e $8\mu\text{m}$, e $\text{Im}(n_2)$ tão pequenos quanto 3×10^{-4} .

Fazendo simulações com os parâmetros experimentais conhecidos para o sistema, não

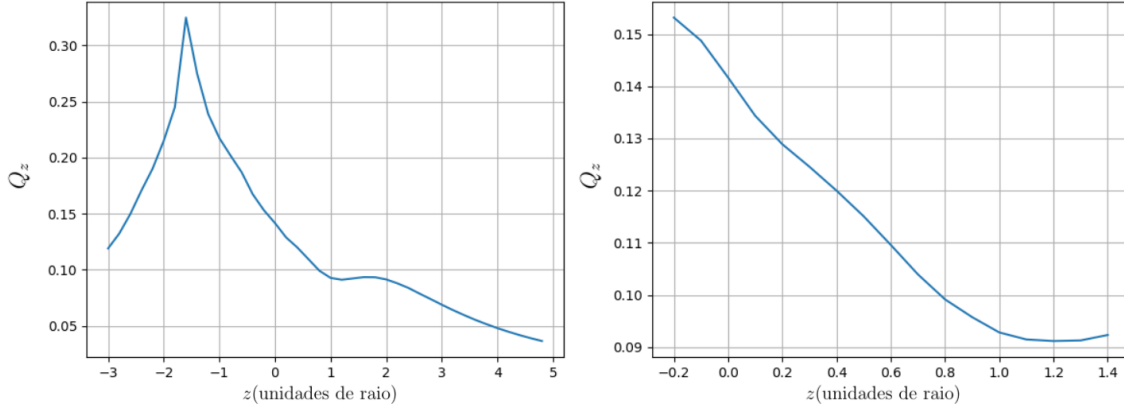


Figura 4.4: Componente Q_z do fator de eficiência em função de z . O raio da esfera é $a = 7.9\mu m$, o índice de refração $n_2 = 1.576 + 10^{-3}i$, o parâmetro de astigmatismo $A_{ast} = 0.1$ e a distância entre o plano focal e a interface com a lamínula $L = 2a$.

encontramos nenhuma posição de equilíbrio estável, como podemos ver na figura 4.4. Ao longo do eixo não há valor de Q_z menor que zero, ou seja, a microesfera é empurrada no sentido z positivo. À direita está o zoom da região do plano focal, onde o pinçamento deveria estar ocorrendo. Como explicado na seção 3.2, microesferas grandes são mais sensíveis à efeitos de absorção, que nesse caso favorece a pressão de radiação. Portanto, a absorção favorece a força na mesma direção e sentido de propagação do feixe, inviabilizando o pinçamento nesse caso.

Nas simulações para valores de $\text{Im}(n_2)$ menores, encontramos regiões suficientemente próximas do eixo $Q_z = 0$ para assumir aprisionamento, como podemos ver na figura 4.5. No caso, podemos assumir que efeitos gravitacionais desempenham um papel significativo para esferas maiores, possibilitando o equilíbrio de forças no eixo e a levitação da microesfera.

A representação esquemática inserida no gráfico à esquerda da figura 4.5 mostra a levitação da microesfera, onde a força ótica do feixe que se propaga no sentido z positivo se equilibra com a força peso da microesfera.

Por outro lado, se simularmos o caso de uma objetiva de imersão em água com abertura

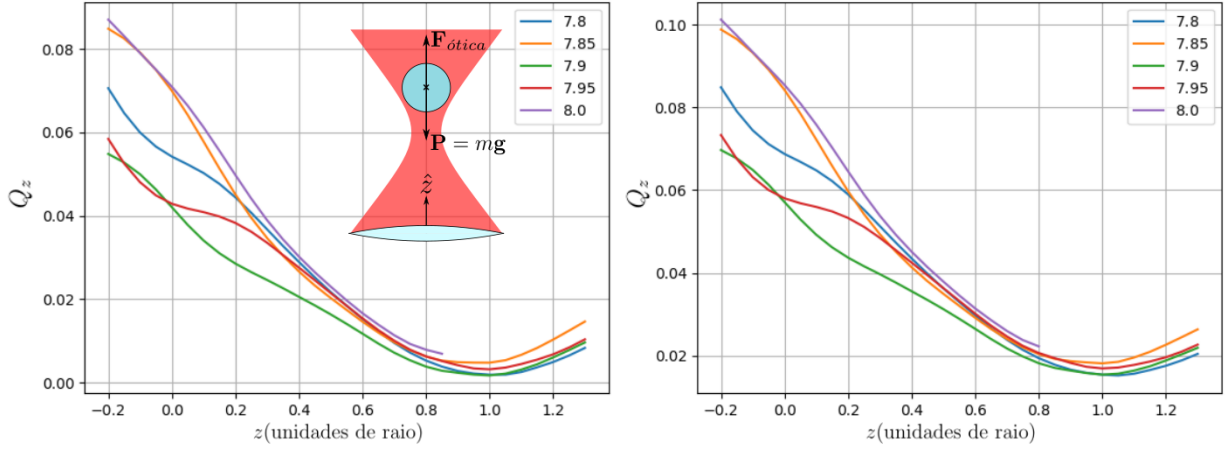


Figura 4.5: Fator de eficiência Q_z para vários raios a da microesfera (em cores). O parâmetro de astigmatismo e a distância entre o foco e interface são iguais ao caso anterior. À esquerda, $\text{Im}(n_2) = 3 \times 10^{-4}$, e à direita, $\text{Im}(n_2) = 4 \times 10^{-4}$.

numérica $NA = 1.2$, para que não haja efeito de aberração esférica, e assumirmos que não há astigmatismo nem outra aberração ótica no sistema, voltamos a ter posições de equilíbrio estável em Q_z

Tomando o valor da parte real do índice de refração do poliestireno como $\text{Re}(n_2) = 1.576$, de acordo com o gráfico referido acima, buscamos uma região da parte imaginária de n_2 que seja propícia ao aprisionamento da microesfera.

O potencial $V(z)$ na figura 4.6 é adimensional, sendo calculado com a equação 3.5 tomando $n_1 P/c = 1$ e dz sendo em unidades de raio. A altura da barreira de potencial é obtida tomando $z_0 = z_{eq}$ e calculando $V(z_{inst})$, ou seja:

$$\Delta = \int_{z_{eq}}^{z_{inst}} Q_z \frac{dz}{a}. \quad (4.2)$$

Multiplicando Δ por $(n_1 P a)/c$, obtemos o potencial no qual a microesfera está inserida. Dessa forma, podemos procurar uma potência mínima para a qual haja pinçamento no laboratório, usando o critério de que a barreira potencial tem que ter no mínimo $10k_B T$ para deduzir a parte imaginária do índice de refração.

Para um valor típico da potência do laser $P = 1mW$, teremos $(n_1 P a)/c = 3.5 \times 10^{-17} J$,

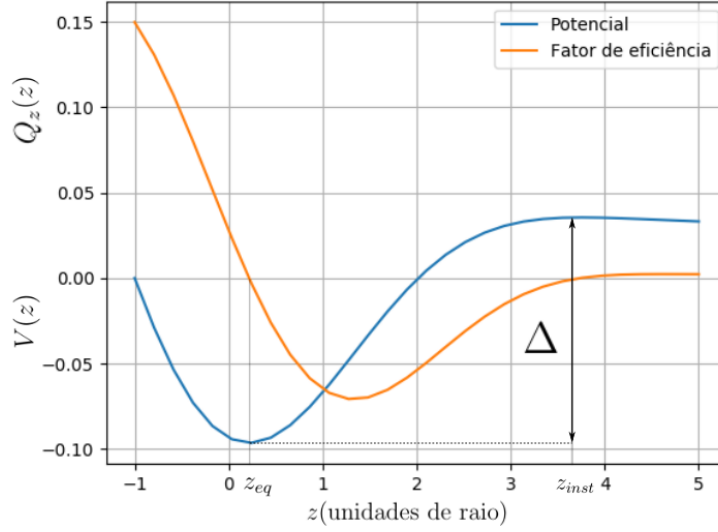


Figura 4.6: Componente Q_z do fator de eficiência (em laranja) e o potencial (em azul) em função de z . Representamos no gráfico a altura Δ da barreira de potencial.

e $k_B T = 414.2 \times 10^{-23} J$ para uma temperatura $T = 300 K$. A razão $(n_1 P a) / c k_B T = 8.45 \times 10^3$ é multiplicada pelo valor de Δ para saber o tamanho da barreira de potencial U_0 que a microesfera deve atravessar em unidades de $k_B T$. De acordo com a figura 4.7, se $\text{Im}(n_2) = 5 \times 10^{-4}$, teremos $\Delta = 0.01$, e $U_0 = 84.5 k_B T$; o que quer dizer que a microesfera continuará aprisionada. Por outro lado, se a potência do laser fosse 10 vezes menor, $U_0 = 8.5 k_B T$, o que significa que o critério para haver pinçamento de que $U_0 > 10 k_B T$ não é mais satisfeito, e a microesfera pode escapar.

Para uma análise mais aprofundada, podemos calcular o tempo médio que a microesfera demoraria para difundir para fora da armadilha. O caso de uma partícula em movimento browniano, confinada em um potencial como o da figura 4.6 (onde $V(z)$ cresce para valores negativos cada vez menores de z) é conhecido como problema de escape de Kramers, e tem solução [38]:

$$\frac{1}{\tau} = \sqrt{\frac{\kappa_z}{m}} \frac{e^{-U_0/k_B T}}{2\pi}, \quad (4.3)$$

onde τ é o tempo médio de escape da microesfera, m é a sua massa, $U_0 = \Delta(n_1 P a) / c$ é o tamanho da barreira de potencial e $\kappa_z = \partial^2 V / \partial z^2|_{z=z_{eq}} = (n_1 P / c) \partial Q_z / \partial z|_{z=z_{eq}}$ é a

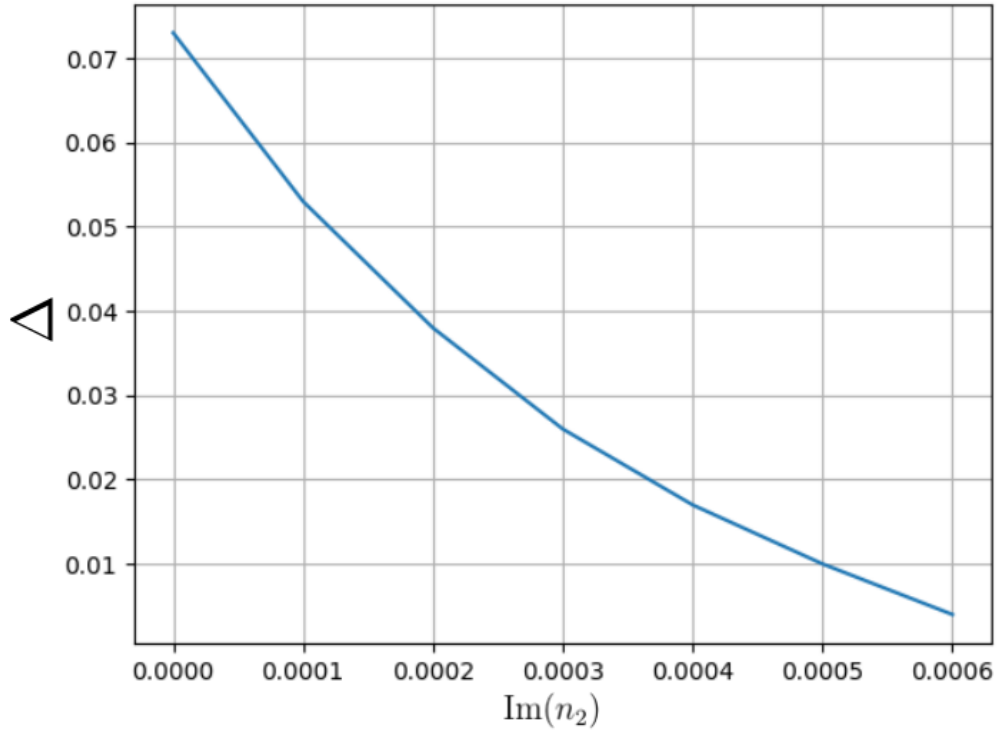


Figura 4.7: Altura da barreira potencial adimensional em função da parte imaginária do índice de refração.

constante elástica axial, uma vez que z_{eq} é também a posição do mínimo do potencial $V(z)$.

A massa de uma microesfera de poliestireno com raio $a = 7.9\mu m$ é $m = 2.2 \times 10^{-15} kg$, e o valor da constante elástica axial para uma potência $P = 0.1 mW$ é $\kappa_z = 5.6 \times 10^{-8} kg/s^2$. Sabendo que $U_0/k_B T = 8.5$ para essa potência, usamos a equação 4.3 para obter o valor para o tempo de passagem de $6s$. Se a potência for $P = 0.15 mW$, o tempo aumenta para $321s$, e se for $P = 0.2 mW$, o tempo é de aproximadamente $5 horas$.

Capítulo 5

Considerações Finais

Nesse capítulo comentamos sobre os resultados obtidos nessa dissertação e as perspectivas futuras de aplicabilidade dos métodos desenvolvidos.

No capítulo 1, fazemos uma introdução histórica sobre a pinça ótica e sobre o modelo teórico usado nesse trabalho. Apresentamos a forma como abordamos os diversos assuntos na dissertação também. No capítulo 2, introduzimos outros modelos e os comparamos ao modelo MDSA+, o qual nós discutimos de forma mais aprofundada. Realçamos aspectos fundamentais da teoria relacionados ao nosso trabalho, como a focalização da objetiva e o efeito de acoplamento spin-órbita que explica a transferência de momento angular para a esfera aprisionada; e o astigmatismo, cuja caracterização é um dos objetivos da dissertação.

No capítulo 3, discutimos o experimento de transferência de momento angular e a simulação computacional do mesmo, tendo como meta a caracterização do mesmo. Também discutimos dois critérios para haver aprisionamento da microesfera na direção axial: um deles referente à distância da posição de equilíbrio estável ao plano focal, e o outro referente ao tamanho da barreira de potencial ótico.

Finalmente, no capítulo 4 apresentamos os resultados do ajuste do parâmetro de astigmatismo, que foi a grande novidade trazida pelo trabalho. Mostramos também os resultados das simulações para o experimento de transferência de momento angular, e os comparamos com o resultado experimental. A validação do resultado desse método se deu

pela comparação com o método do nível de cinza. O valor obtido pelo método de ajuste do experimento encontrou um resultado muito próximo ao de nível de cinza, com um incerteza menor. Por último, propomos um experimento para caracterizar a parte imaginária do índice de refração, em que analisamos o potencial ótico efetivo e as condições de pinçamento de microesferas muito maiores que o comprimento de onda.

Ao realizar as simulações e cálculos numéricos, foi levado em conta os regimes em que os parâmetros que estávamos ajustando eram relevantes. Cálculos referentes ao parâmetro de astigmatismo foram feitos com microesferas pequenas, que funcionam como sondas locais do campo. As esferas grandes, por outro lado, sentem uma média espacial desse campo, e diferenças de fases no feixe não serão sentidas. Para os cálculos referentes ao parâmetro de absorção, microesferas pequenas não têm tamanho o suficiente para atenuar o feixe consideravelmente. Por isso não são muito afetadas pelo efeito de absorção, em contraste com as microesferas grandes. Estas atenuam mais o feixe e são mais sensíveis ao parâmetro de absorção.

O cálculo com microesferas grandes também é um resultado inédito no grupo. Um dos resultados desse trabalho foi a implementação de um código em Python que não só conseguisse realizar os cálculos para esferas em limites de raios muito grandes, como o fizesse de maneira otimizada e rápida.

Referências Bibliográficas

- [1] Kainã Gonçalves Diniz. Momento angular de spin em pinças Óticas. Master's thesis, Universidade Federal do Rio de Janeiro, 2018. xi, 22, 30, 37
- [2] A. Ashkin, J. M. Dziedzic, J. E. Bjorkholm, and Steven Chu. Observation of a single-beam gradient force optical trap for dielectric particles. *Optics Letters*, 11(5):288, may 1986. 1, 42
- [3] A. Ashkin and J. M. Dziedzic. Observation of Resonances in the Radiation Pressure on Dielectric Spheres. *Physical Review Letters*, 38(23):1351–1354, jun 1977. 1
- [4] A. Ashkin. Acceleration and trapping of particles by radiation pressure. *Physical Review Letters*, 24(4):156–159, jan 1970. 1
- [5] Arthur Ashkin. *Optical Trapping and Manipulation of Neutral Particles Using Lasers: A Reprint Volume with Commentaries*. WORLD SCIENTIFIC PUB CO INC, 2007. 1
- [6] P. A. Maia Neto and H. M Nussenzveig. Theory of optical tweezers. *Europhysics Letters (EPL)*, 50(5):702–708, jun 2000. 1
- [7] A. Mazolli, P. A. Maia Neto, and H. M. Nussenzveig. Theory of trapping forces in optical tweezers. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 459(2040):3021–3041, dec 2003. 1

- [8] R S Dutra, N B Viana, P A Maia Neto, and H M Nussenzveig. Polarization effects in optical tweezers. *Journal of Optics A: Pure and Applied Optics*, 9(8):S221–S227, jul 2007. 1
- [9] N. B. Viana, M. S. Rocha, O. N. Mesquita, A. Mazolli, P. A. Maia Neto, and H. M. Nussenzveig. Towards absolute calibration of optical tweezers. *Physical Review E*, 75(2), feb 2007. 2, 7, 8, 25, 35
- [10] R. S. Dutra, N. B. Viana, P. A. Maia Neto, and H. M. Nussenzveig. Absolute calibration of forces in optical tweezers. *Physical Review A*, 90(1), jul 2014. 2, 20, 21, 22, 46
- [11] D. S. Ether, L. B. Pires, S. Umrath, D. Martinez, Y. Ayala, B. Pontes, G. R. de S. Araújo, S. Frases, G.-L. Ingold, F. S. S. Rosa, N. B. Viana, H. M. Nussenzveig, and P. A. Maia Neto. Probing the casimir force with optical tweezers. *EPL (Europhysics Letters)*, 112(4):44001, nov 2015. 2
- [12] Rfaqat Ali, Felipe A. Pinheiro, Rafael S. Dutra, Felipe S. S. Rosa, and Paulo A. Maia Neto. Enantioselective manipulation of single chiral nanoparticles using optical tweezers. *Nanoscale*, 12(8):5031–5037, 2020. 2
- [13] A. Mazolli. *Teoria das Pinças Óticas*. PhD thesis, Universidade Federal do Rio de Janeiro, 2003. 2, 11
- [14] Rafael de Sousa Dutra. *Parametrizando uma Pinça Ótica: Efeitos de Aberrações e Absorção*. PhD thesis, Universidade Federal do Rio de Janeiro, 2011. 2, 22, 23
- [15] K. Y. Bliokh, F. J. Rodríguez-Fortuño, F. Nori, and A. V. Zayats. Spin–orbit interactions of light. *Nature Photonics*, 9(12):796–808, nov 2015. 4, 26, 27
- [16] A. Ashkin. Forces of a single-beam gradient laser trap on a dielectric sphere in the ray optics regime. *Biophysical Journal*, 61(2):569–582, feb 1992. 7

- [17] Agnese Callegari, Mite Mijalkov, A. Burak Gököz, and Giovanni Volpe. Computational toolbox for optical tweezers in geometrical optics. *Journal of the Optical Society of America B*, 32(5):B11, apr 2015. 7
- [18] John David Jackson. *Classical Electrodynamics*. John Wiley & Sons Inc, 1998. 8, 11
- [19] Tsvi Tlusty, Amit Meller, and Roy Bar-Ziv. Optical gradient forces of strongly localized fields. *Physical Review Letters*, 81(8):1738–1741, aug 1998. 8
- [20] Alexander Rohrbach and Ernst H. K. Stelzer. Optical trapping of dielectric particles in arbitrary fields. *Journal of the Optical Society of America A*, 18(4):839, apr 2001. 8
- [21] B. Richards and E. Wolf. Electromagnetic diffraction in optical systems, II. structure of the image field in an aplanatic system. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences*, 253(1274):358–379, dec 1959. 8, 10, 16
- [22] G Gouesbet, G Grehan, and B Maheu. Scattering of a gaussian beam by a mie scatter center using a bromwich formalism. *Journal of Optics*, 16(2):83–93, mar 1985. 9
- [23] Gustav Mie. Beiträge zur optik trüber medien, speziell kolloidaler metallösungen. *Annalen der Physik*, 330(3):377–445, 1908. 9
- [24] Louis Lorenz. *Lysbevægelsen i og uden for en af plane Lysbølger belyst Kugle*. na, 1890. 9
- [25] Timo A Nieminen, Vincent L Y Loke, Alexander B Stilgoe, Gregor Knöner, Agata M Brańczyk, Norman R Heckenberg, and Halina Rubinsztein-Dunlop. Optical tweezers computational toolbox. *Journal of Optics A: Pure and Applied Optics*, 9(8):S196–S203, jul 2007. 9, 10

- [26] Gérard Gouesbet and Gérard Gréhan. *Generalized Lorenz-Mie Theories*. Springer Berlin Heidelberg, 2011. 9
- [27] L. W. Davis. Theory of electromagnetic beams. *Physical Review A*, 19(3):1177–1179, mar 1979. 9
- [28] Michael I. Mishchenko, Larry D. Travis, and Daniel W. Mackowski. T-matrix computations of light scattering by nonspherical particles: A review. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 55(5):535–575, may 1996. 10
- [29] G. Gouesbet. T-matrix formulation and generalized lorenz–mie theories in spherical coordinates. *Optics Communications*, 283(4):517–521, feb 2010. 10
- [30] Antonio Alvaro Ranha Neves and Carlos Lenz Cesar. Analytical calculation of optical forces on spherical particles in optical tweezers: tutorial. *Journal of the Optical Society of America B*, 36(6):1525, may 2019. 10
- [31] L. C. Biedenharn, James D. Louck, and J. D. Louck. *Angular Momentum in Quantum Physics*. Cambridge University Press, 2008. 12, 13
- [32] H. C. van de Hulst. *Light Scattering by Small Particles*. Dover Publications Inc., 1981. 14
- [33] Andrew Zangwill. *Modern Electrodynamics*. Cambridge University Pr., 2013. 558–560. 16, 24, 26
- [34] K. Diniz, R. S. Dutra, L. B. Pires, N. B. Viana, H. M. Nussenzveig, and P. A. Maia Neto. Negative optical torque on a microsphere in optical tweezers. *Optics Express*, 27(5):5905, feb 2019. 20, 22, 23, 24, 25, 30, 44, 46
- [35] Max Born, Emil Wolf, and A. B. Bhatia. *Principles of Optics*. Cambridge University Pr., 2002. 21, 23

- [36] Xiaoyan Ma, Jun Q Lu, R Scott Brock, Kenneth M Jacobs, Ping Yang, and Xin-Hua Hu. Determination of complex refractive index of polystyrene microspheres from 370 to 1610 nm. *Physics in Medicine and Biology*, 48(24):4165–4172, dec 2003. 34, 41
- [37] Lukas Novotny, Robert D. Grober, and Khaled Karrai. Reflected image of a strongly focused spot. *Optics Letters*, 26(11):789, jun 2001. 46
- [38] N. G. van Kampen. *Stochastic Processes in Physics and Chemistry*. NORTH HOLLAND, 2007. pp. 347-349. 50

Apêndice A

Fator de eficiência e coeficientes de multipolo

Nesse apêndice são mostradas as expressões para as componentes cilíndricas azimutal e radial do fator de eficiência. Dividimos a força em componentes de extinção e espalhamento, como na seção 2.8. Também apresentamos expressões explícitas para os coeficientes de multipolo $\mathcal{G}_{j,m}^{C,(\sigma)}$ e $\mathcal{G}_{j,m}^{\pm,(\sigma)}$, e para as funções $f^{(\sigma)}(\rho, \phi, z)$.

As componentes de extinção da força nas direções ρ e ϕ são:

$$Q_{e\rho}(\rho, \phi, z) = \frac{\gamma^2}{AN} \text{Im} \sum_{jm\sigma} (2j+1) \mathcal{G}_{j,m}^{(\sigma)} \left[(a_j + b_j) \left(\mathcal{G}_{j,m+1}^{-(\sigma)*} - \mathcal{G}_{j,m-1}^{+(\sigma)*} \right) (1 - \sigma \sin 2\psi) + \right. \\ \left. + (a_j - b_j) \left(\mathcal{G}_{j,m+1}^{-(\sigma)*} - \mathcal{G}_{j,m-1}^{+(\sigma)*} \right) \cos 2\psi e^{i2\sigma(\phi-\psi)} \right], \quad (\text{A.1})$$

$$Q_{e\phi}(\rho, \phi, z) = -\frac{\gamma^2}{AN} \text{Re} \sum_{jm\sigma} (2j+1) \mathcal{G}_{j,m}^{(\sigma)} \left[(a_j + b_j) \left(\mathcal{G}_{j,m+1}^{-(\sigma)*} + \mathcal{G}_{j,m-1}^{+(\sigma)*} \right) (1 - \sigma \sin 2\psi) + \right. \\ \left. + (a_j - b_j) \left(\mathcal{G}_{j,m+1}^{-(\sigma)*} + \mathcal{G}_{j,m-1}^{+(\sigma)*} \right) \cos 2\psi e^{i2\sigma(\phi-\psi)} \right]. \quad (\text{A.2})$$

As componentes de espalhamento da força nas direções ρ e ϕ são:

$$\begin{aligned}
Q_{s\rho}(\rho, \phi, z) = & \frac{2\gamma^2}{AN} \text{Im} \sum_{jm\sigma} \left[\frac{\sqrt{j(j+2)(j+m+1)(j+m+2)}}{j+1} \left((a_j a_{j+1}^* + b_j b_{j+1}^*) \times \right. \right. \\
& (\mathcal{G}_{j,m}^{(\sigma)} \mathcal{G}_{j+1,m+1}^{(\sigma)*} + \mathcal{G}_{j,-m}^{(\sigma)} \mathcal{G}_{j+1,-(m+1)}^{(\sigma)*}) (1 - \sigma \sin 2\psi) + (a_j a_{j+1}^* - b_j b_{j+1}^*) \times \\
& \left. \left((\mathcal{G}_{j,m}^{(\sigma)} \mathcal{G}_{j+1,m+1}^{(-\sigma)*} + \mathcal{G}_{j,-m}^{(\sigma)} \mathcal{G}_{j+1,-(m+1)}^{(-\sigma)*}) \cos 2\psi e^{i2\sigma(\phi-\psi)} \right) \right] - \\
& - \frac{4\gamma^2}{AN} \sum_{jm\sigma} \frac{2j+1}{j(j+1)} \sigma \sqrt{(j-m)(j+m+1)} \left(\text{Re}(a_j b_j^*) \text{Im}(\mathcal{G}_{j,m}^{(\sigma)} \mathcal{G}_{j,m+1}^{(\sigma)*} (1 - \sigma \sin 2\psi)) + \right. \\
& \left. + \text{Im}(a_j b_j^*) \text{Re}(\mathcal{G}_{j,m+1}^{(\sigma)} \mathcal{G}_{j,m}^{(-\sigma)*} \cos 2\psi e^{i2\sigma(\phi-\psi)}) \right), \tag{A.3}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
Q_{s\phi}(\rho, \phi, z) = & -\frac{2\gamma^2}{AN} \text{Re} \sum_{jm\sigma} \left[\frac{\sqrt{j(j+2)(j+m+1)(j-m+1)}}{j+1} \left((a_j a_{j+1}^* + b_j b_{j+1}^*) \times \right. \right. \\
& (\mathcal{G}_{j,m}^{(\sigma)} \mathcal{G}_{j+1,m+1}^{(\sigma)*} - \mathcal{G}_{j,-m}^{(\sigma)} \mathcal{G}_{j+1,-(m+1)}^{(\sigma)*}) (1 - \sigma \sin 2\psi) + (a_j a_{j+1}^* - b_j b_{j+1}^*) \times \\
& \left. \left((\mathcal{G}_{j,m}^{(\sigma)} \mathcal{G}_{j+1,m+1}^{(-\sigma)*} - \mathcal{G}_{j,-m}^{(\sigma)} \mathcal{G}_{j+1,-(m+1)}^{(-\sigma)*}) \cos 2\psi e^{i2\sigma(\phi-\psi)} \right) \right] + \\
& + \frac{4\gamma^2}{AN} \sum_{jm\sigma} \frac{2j+1}{j(j+1)} \sigma \sqrt{(j-m)(j+m+1)} \left(\text{Re}(a_j b_j^*) \text{Re}(\mathcal{G}_{j,m}^{(\sigma)} \mathcal{G}_{j,m+1}^{(\sigma)*} (1 - \sigma \sin 2\psi)) + \right. \\
& \left. + \text{Im}(a_j b_j^*) \text{Im}(\mathcal{G}_{j,m+1}^{(\sigma)} \mathcal{G}_{j,m}^{(-\sigma)*} \cos 2\psi e^{i2\sigma(\phi-\psi)}) \right). \tag{A.4}
\end{aligned}$$

Os coeficientes de multipolo $\mathcal{G}_{j,m}^{C,(\sigma)}(\rho, \phi, z)$ e $\mathcal{G}_{j,m}^{\pm,(\sigma)}(\rho, \phi, z)$ são:

$$\mathcal{G}_{j,m}^{C,(\sigma)}(\rho, \phi, z) = \int_0^{\theta_0} d\theta_k \sin \theta_k \cos \theta_w \sqrt{\cos \theta_k} e^{\gamma^2 \sin^2 \theta_k} T(\theta_k) d_{m,\sigma}^j(\theta_w) f_m^{(\sigma)}(\rho, \phi, z) e^{\Phi_{g-w}(\theta_k) + k_w z \cos \theta_w}, \tag{A.5}$$

$$\mathcal{G}_{j,m}^{\pm,(\sigma)}(\rho, \phi, z) = \int_0^{\theta_0} d\theta_k \sin \theta_k \sin \theta_w \sqrt{\cos \theta_k} e^{\gamma^2 \sin^2 \theta_k} T(\theta_k) d_{m,\sigma}^j(\theta_w) f_m^{(\sigma)}(\rho, \phi, z) e^{\Phi_{g-w}(\theta_k) + k_w z \cos \theta_w}. \tag{A.6}$$

Como podemos ver, a equação 2.32 apresenta um somatório que pode ser desafiador numericamente. Evitamos esse problema restringindo nossos cálculos ao caso em que $\rho = 0$, o que faz com que somente um termo da soma não seja igual a 0. Como a única

função de Bessel que é diferente de 0 na origem é $J_0(x)$, o único índice s que corresponde a um termo não nulo é $s = \sigma - m$.

De fato isso não implica em problema algum para as simulações, pois para calcular as posições de equilíbrio, calculamos Q_z em cima do eixo, ou seja, com $\rho = 0$. O cálculo das constantes elásticas da pinça também não sofrem com essa condição, pois a derivada de $f^{(\sigma)}(\rho, \phi, z)$ em relação a ρ é calculada na posição de equilíbrio, também com $\rho = 0$.