UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
FACULDADE DE FILOSOFIA, CIÊNCIAS E LETRAS DE RIBEIRÃO PRETO

TIAGO JOSÉ ARRUDA

**Energia interna e espalhamento de ondas
eletromagnéticas por esferas ou cilindros:
ressonâncias de Fano e suas aplicações a
metamateriais**

Ribeirão Preto
2014

TIAGO JOSÉ ARRUDA

**Energia interna e espalhamento de ondas
eletromagnéticas por esferas ou cilindros:
ressonâncias de Fano e suas aplicações a
metamateriais**

Tese apresentada à Faculdade de Filosofia,
Ciências e Letras de Ribeirão Preto da
Universidade de São Paulo como parte das
exigências para a obtenção do título de
Doutor em Ciências.

Área de Concentração:

Física Aplicada à Medicina e Biologia.

Orientador:

Alexandre Souto Martinez.

Co-orientador:

Felipe Arruda de Araújo Pinheiro.

Ribeirão Preto

2014

Autorizo a reprodução e divulgação total ou parcial deste trabalho, por qualquer meio convencional ou eletrônico, para fins de estudo e pesquisa, desde que citada a fonte.

FICHA CATALOGRÁFICA

Arruda, Tiago José

Energia interna e espalhamento de ondas eletromagnéticas por esferas ou cilindros: ressonâncias de Fano e suas aplicações a metamateriais / Tiago José Arruda; orientador: Alexandre Souto Martinez; co-orientador: Felipe Arruda de Araújo Pinheiro. – Ribeirão Preto, 2014.

243 p.

Tese (Doutorado) – Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto, Universidade de São Paulo, 2014.

Inclui Bibliografia.

1. Teoria de Lorenz-Mie. 2. Densidade de energia. 3. Ressonância de Fano. 4. Meios efetivos. 5. Metamateriais dispersivos.

Nome: ARRUDA, Tiago José

Título: Energia interna e espalhamento de ondas eletromagnéticas por esferas ou cilindros: ressonâncias de Fano e suas aplicações a metamateriais

Tese apresentada à Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto da Universidade de São Paulo como parte das exigências para a obtenção do título de Doutor em Ciências.

Aprovado em: ____/____/____.

Banca Examinadora

Prof(a). Dr(a). : _____ Instituição: _____

Julgamento: _____ Assinatura: _____

Prof(a). Dr(a). : _____ Instituição: _____

Julgamento: _____ Assinatura: _____

Prof(a). Dr(a). : _____ Instituição: _____

Julgamento: _____ Assinatura: _____

Prof(a). Dr(a). : _____ Instituição: _____

Julgamento: _____ Assinatura: _____

Prof(a). Dr(a). : _____ Instituição: _____

Julgamento: _____ Assinatura: _____

Aos bons Professores que um dia tive

Agradecimentos

Ao meu orientador de Iniciação Científica, Mestrado e Doutorado, Prof. Alexandre Souto Martinez, por me ter oferecido não apenas uma sólida formação acadêmica, mas também por ser um grande amigo, exemplo de profissional e de pessoa.

Ao meu co-orientador de Doutorado, Prof. Felipe Arruda de Araújo Pinheiro, pela preciosa orientação, pelas críticas e muitas sugestões que foram fundamentais no desenvolvimento deste projeto.

À minha orientadora de Iniciação Científica, Profa. Katia Andreia Gonçalves de Azevedo, e à nossa antiga companheira de seminários, Profa. Marta Cilene Gadotti, pela amizade e incentivo aos estudos desde sempre.

Aos meus colegas de laboratório, amigos que fiz na Graduação e na Pós-Graduação, pelo apoio e companhia durante os *cappuccinos*, *happy hours* e eventos científicos.

Aos professores do Instituto de Física de São Carlos, Profa. Maria Cristina Terrile, Prof. Miled Hassan Youssef Moussa e Prof. Reginaldo de Jesus Napolitano, pela orientação nas disciplinas que cursei.

Aos professores do programa de Física Aplicada à Medicina e Biologia pela orientação nas disciplinas e avaliações de programa; em especial, Prof. Amando Siuiti Ito, Prof. Martin Eduardo Poletti e Prof. Ubiraci Pereira da Costa Neves.

Ao Prof. Marcelo Mulato, coordenador do programa de Física Aplicada à Medicina e Biologia durante meu ciclo na Pós-Graduação, pelos esclarecimentos, apoio e incentivo à pesquisa.

Ao atual coordenador do programa de Física Aplicada à Medicina e Biologia, Prof. Antonio José da Costa Filho, pelo apoio a mim oferecido na reta final.

Ao Departamento de Física da Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto pelo suporte ao trabalho.

À FAPESP (2010/10052-0) pelo apoio financeiro ao longo de todo o processo.

“Fez-se do amigo próximo o distante.
Fez-se da vida uma aventura errante.
De repente, não mais que de repente.”

Vinícius de Moraes

Resumo

ARRUDA, T. J. **Energia interna e espalhamento de ondas eletromagnéticas por esferas ou cilindros: ressonâncias de Fano e suas aplicações a metamateriais.** 2014. 243 p. Tese (Doutorado - Programa de Pós-Graduação em Física Aplicada à Medicina e Biologia) - Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto, Universidade de São Paulo, Ribeirão Preto, 2014.

O espalhamento de ondas eletromagnéticas por partículas isoladas, com propriedades ópticas e formatos arbitrários, encontra aplicações nas mais diversas áreas do conhecimento. Usualmente, o espalhamento eletromagnético é investigado via grandezas auferidas na região de campo distante. Para partículas inhomogêneas, no entanto, as ressonâncias nas seções de choque de espalhamento podem não corresponder a um aumento de intensidade do campo eletromagnético nas vizinhanças imediatas da partícula (região de campo próximo). Esse efeito pode ser induzido em nanopartículas dielétricas com revestimentos plasmônicos e foi recentemente explicado em termos da ressonância de Fano. Essa ressonância resulta da interferência entre um modo eletromagnético não ressonante (processo de fundo) e um modo discreto ressonante (ressonância de plásmon), produzindo um formato assimétrico de linha espectral. Para o entendimento de como os modos de superfície no campo próximo acoplam-se às ressonâncias nas seções de choque, é necessário o cálculo de funcionais dos campos eletromagnéticos internos às partículas ou em suas vizinhanças imediatas. Neste estudo, calculamos a energia eletromagnética no interior de centros espalhadores nas geometrias esférica e cilíndrica. Fazemos aqui o vínculo dos campos internos às grandezas de espalhamento no campo distante via seção de choque de absorção e conservação de energia. Aplicamos nossos resultados a metamateriais dispersivos, estudando as propriedades do espalhamento por esferas revestidas e por esferas quírais, no regime de refração negativa, e por cilindros revestidos sob incidência oblíqua de radiação. Mediante a energia interna às partículas, demonstramos novos efeitos de aumento de intensidade de campo interno fora da ressonância de espalhamento e fornecemos resultados analíticos para a análise dessas ressonâncias, tanto em espalhamento simples quanto múltiplo.

Palavras-chave: 1. Teoria de Lorenz-Mie. 2. Densidade de energia. 3. Ressonância de Fano. 4. Meios efetivos. 5. Metamateriais dispersivos.

Abstract

ARRUDA, T. J. **Internal energy and electromagnetic wave scattering by spheres or cylinders: Fano resonances and their applications to metamaterials.** 2014. 243 p. Thesis (Ph.D. - Postgraduate program in Physics Applied to Medicine and Biology) - Faculty of Philosophy, Sciences and Letters, University of São Paulo, Ribeirão Preto, 2014.

Electromagnetic wave scattering by single particles with both shapes and optical properties arbitrary finds applications in several areas of knowledge. Usually, the electromagnetic scattering is investigated via measured quantities in the far-field region. However, for inhomogeneous particles, resonances in scattering cross sections may not correspond to the electromagnetic field enhancement in the vicinity of a particle (near-field). This effect can be induced in dielectric nanoparticles with plasmonic coatings, and it has recently been explained in terms of the Fano resonance. The Fano resonance results from the interference between a non-resonant electromagnetic mode (background or continuous) and a resonant discrete mode (localized plasmon resonance), leading to an asymmetric lineshape. To understand how the surface modes in the near-field are connected to the cross section resonances, functionals of the electromagnetic fields within scatterers or in their vicinity are required. In this study, we calculate the electromagnetic energy inside scatterers in both cylindrical and spherical geometries. We obtain a connection between the internal energy and the scattering quantities in the far-field via absorption cross section and energy conservation. We apply our results to dispersive metamaterials, studying scattering properties of coated and chiral spheres in the negative refraction regime, and coated cylinders under oblique incidence of radiation. By the electromagnetic energy inside particles, we demonstrate new off-resonance field enhancement effects and provide analytical tools to analyze these resonances in both single and multiple scattering regimes.

Key-words: 1. Lorenz-Mie theory. 2. Energy density. 3. Fano resonance. 4. Effective media. 5. Dispersive metamaterials.

Lista de Figuras

- 2.1 Onda plana incidente $(\mathbf{E}_i, \mathbf{H}_i)$ na direção $\hat{\mathbf{z}}$ interagindo com uma partícula arbitrária e sendo espalhada na direção $\hat{\mathbf{r}}$, onde $(\mathbf{E}_s, \mathbf{H}_s)$ é o campo espalhado. O ângulo θ entre o eixo z e $\hat{\mathbf{r}}$ é chamado de *ângulo de espalhamento*. 21
- 3.1 Geometria do sistema: ondas planas na direção z interagindo com uma esfera (ε_1, μ_1) de raio a revestida por uma camada esférica (ε_2, μ_2) de espessura $(b - a)$ 29
- 3.2 Metamaterial compósito constituído de *split-ring resonators* (SRRs) e fios em lados opostos de uma placa dielétrica. (a) Uma unidade de SRR. (b) Arranjo periódico de SRRs e fios. Sendo r_0 o raio médio dos anéis externos, que é maior que o espaçamento entre os SRRs, a *teoria de meios efetivos* [Eqs. (3.26) e (3.27)] vale para $r_0 \ll \lambda$. Para $r_0 \approx \lambda$, temos um meio heterogêneo e anisotrópico. (Figura adaptada da Ref. [131].) 38
- 3.3 Permissividade elétrica $\varepsilon_q(\omega)$ [Eq. (3.26)] e permeabilidade magnética $\mu_q(\omega)$ [Eq. (3.27)] em função da frequência $f = \omega/2\pi$. (a) Partes real e imaginária de ε_q . (b) Partes real e imaginária de μ_q . A refração negativa acontece para $\text{Re}(\varepsilon_q) < 0$ e $\text{Re}(\mu_q) < 0$ *simultaneamente* – região $4 \text{ GHz} < f < 6 \text{ GHz}$ 43

- 3.4 Esfera de metamaterial dispersivo $[\varepsilon_1(\omega); \mu_1(\omega)]$, dado pelas Eqs. (3.26) e (3.27), revestida por uma camada dielétrica não absorviva ($\varepsilon_2/\varepsilon_0 = 1,6; \mu_2/\mu_0 = 1$). O raio da camada esférica é $b = 1$ cm, onde variamos o tamanho do “caroço” de metamaterial, cujo raio é $a = Sb$, de acordo com os parâmetros de espessura: $S = 0,1; 0,3; 0,5; 0,9$. (a) Energia eletromagnética $W_1(0, a)/W_0(0, a)$ dentro do caroço $[\varepsilon_1(\omega), \mu_1(\omega)]$. (b) Energia eletromagnética $W_2(a, b)/W_0(a, b)$ dentro da camada (ε_2, μ_2) 45
- 3.5 Energia eletromagnética $W_{1,2}(a, b)/W_0$ no interior de um centro espalhador consistindo de uma esfera $[\varepsilon_1(\omega), \mu_1(\omega)]$, cuja dispersão é dada nas Eqs. (3.26) e (3.27), de raio a , revestida por uma camada dielétrica ($\varepsilon_2/\varepsilon_0 = 1,6; \mu_2/\mu_0 = 1$) de raio $b = 1$ cm. (a) $W_{1,2}(a, b)/W_0$ em função da frequência $f = \omega/2\pi$ para alguns valores de parâmetro de espessura $S = a/b$. (b) $W_{1,2}(a, b)/W_0$ em função do parâmetro de espessura S para algumas frequências na banda de *refração negativa* (4 a 6 GHz). 47
- 3.6 Eficiência de extinção Q_{ext} para um centro espalhador consistindo de uma esfera de metamaterial $[\varepsilon_1(\omega), \mu_1(\omega)]$, dada pelas Eqs. (3.26) e (3.27), de raio a , revestida por uma camada dielétrica ($\varepsilon_2/\varepsilon_0 = 1,6; \mu_2/\mu_0 = 1$) de raio $b = 1$ cm, com razões de aspecto $S = 0,1; 0,3; 0,5; 0,9$ 48
- 3.7 Esfera dielétrica ($\varepsilon_1/\varepsilon_0 = 1,6; \mu_1/\mu_0 = 1$) de raio a revestida por uma camada de metamaterial $[\varepsilon_2(\omega), \mu_2(\omega)]$, dado pelas Eqs. (3.26) e (3.27), de raio $b = 1$ cm, com razões de aspecto $S = 0,1; 0,5; 0,7; 0,9$. (a) Energia $W_1(0, a)/W_0(0, a)$ no interior do caroço (ε_1, μ_1) . (b) Energia $W_2(a, b)/W_0(a, b)$ no interior da camada $[\varepsilon_2(\omega), \mu_2(\omega)]$ 49

- 3.8 Energia eletromagnética $W_{1,2}(a, b)/W_0$ armazenada em um centro espalhador consistindo de uma esfera dielétrica ($\varepsilon_1/\varepsilon_0 = 1, 6; \mu_1/\mu_0 = 1$) revestida por uma camada de metamaterial $[\varepsilon_1(\omega), \mu_1(\omega)]$, dada pelas Eqs. (3.26) e (3.27). (a) $W_{1,2}(a, b)/W_0$ em função da frequência para alguns parâmetros de espessura $S = a/b$. (b) $W_{1,2}(a, b)/W_0$ em função do parâmetro de espessura S para algumas frequências na região de *refração negativa* (4 a 6 GHz). 50
- 3.9 Eficiência de extinção Q_{ext} para esferas revestidas consistindo de um caroço dielétrico ($\varepsilon_1/\varepsilon_0 = 1, 6; \mu_1/\mu_0 = 1$) e uma camada de metamaterial $[\varepsilon_2(\omega), \mu_2(\omega)]$, dada pelas Eqs. (3.26) e (3.27), com parâmetros de espessura $S = 0, 1; 0, 5; 0, 7; 0, 9$ 51
- 3.10 Eficiência de absorção Q_{abs} para esferas revestidas consistindo de um caroço dielétrico ($\varepsilon_1/\varepsilon_0 = 1, 6; \mu_1/\mu_0 = 1$) e uma camada de metamaterial $[\varepsilon_2(\omega), \mu_2(\omega)]$, dada pelas Eqs. (3.26) e (3.27), com parâmetros de espessura $S = 0, 1; 0, 5; 0, 7; 0, 9$ 53
- 4.1 Esfera dispersiva de raio a e propriedades ópticas $[\varepsilon_1(\omega), \mu_1(\omega)]$ revestida por uma camada de espessura $(b - a)$ e propriedades ópticas não dispersivas (ε_2, μ_2); o meio externo tem propriedades não dispersivas (ε_0, μ_0). 58
- 4.2 Modelo mecânico usado para explicar o efeito Fano. Dois osciladores com massas e constantes de mola dadas pelos pares ordenados (M_1, K_1) e (M_2, K_2) , respectivamente, acoplados por uma mola de constante K . O oscilador 1 é submetido a uma força harmônica $F(t)$. 63
- 4.3 Dependência ressonante das amplitudes (por unidade de comprimento) dos osciladores acoplados para $\omega_2 = 1, 2\omega_1$, $\gamma_1 = 0, 025\omega_1$, $\gamma_2 = 0$ e $\Omega^2 = 0, 1\omega_1^2$ – parâmetros usados na Ref. [153]. (a) Amplitude do oscilador 1 (forçado) mostrando um perfil de ressonância Lorentziano na região de ω_1 e um perfil de Fano na região de ω_2 , onde a antirressonância (Fano *dip*) ocorre exatamente em $\omega = \omega_2$. (b) Amplitude do oscilador 2 mostrando dois perfis de ressonância simétricos (Lorentzianos). 64

- 4.4 Intensidades elétrica e magnética [Eq. (4.2)] na superfície de uma esfera homogênea ($r = a = b$) de metamaterial SRR $[\varepsilon_1(\omega), \mu_1(\omega)]$ [Eqs. (3.26) e (3.27)] e a correspondente eficiência de retroespalhamento Q_{back} [Eq. (3.4)] para $a = 1,0$ mm (limite de Rayleigh). Os parâmetros do metamaterial SRR são os mesmos fornecidos na Seção 3.3.2, com refração negativa de 4 a 6 GHz. O *inset* mostra a correspondente eficiência de espalhamento Q_{sca} , que é proporcional a $(|a_1|^2 + |b_1|^2)$. Apenas Q_{back} exibe interferência entre as amplitudes de dipolo elétrico (a_1) e magnético (b_1) – interferência essa que se manifesta no *campo próximo* no perfil de intensidade magnética. 71
- 4.5 Eficiência de espalhamento Q_{sca} nas vizinhanças da ressonância de dipolo elétrico para uma esfera plasmônica ($\varepsilon_1; \mu_1 = \mu_0$) revestida com uma camada dielétrica com perdas ($\varepsilon_2/\varepsilon_0 = 3,4 + 0,001i; \mu_2 = \mu_0$) em função de ε_1 no limite de pequenas partículas (parâmetros de tamanho $ka = 10^{-4}$, $kb = 10^{-2}$). (a) A ressonância de dipolo para um caroço sem perdas ($\varepsilon_1 = \varepsilon'_1$) é bem descrita por um perfil do tipo Fano, Eq. (4.44) (linha pontilhada). O *inset* mostra a eficiência de absorção em função de ε_1 . (b) Q_{sca} em função da parte real da permissividade elétrica do caroço (ε'_1) para diferentes valores de sua parte imaginária (ε''_1) nas vizinhanças das ressonâncias de dipolo. A escala vertical está dividida em incrementos de 2×10^{-12} 76
- 4.6 Eficiência de espalhamento Q_{sca} em função da permissividade elétrica do caroço ε_1 . O caroço metálico é não absorutivo (com $\mu_1 = \mu_0$) e é revestido por uma camada dielétrica absorativa ($\varepsilon_2/\varepsilon_0 = 3,4 + 0,004i; \mu_2 = \mu_0$), com parâmetros de tamanho $ka = 0,2$ e $kb = 1$, respectivamente, nas vizinhanças da ressonância de dipolo. A linha sólida representa Q_{sca} calculado a partir da teoria de Lorenz-Mie, mostrando que a ressonância de dipolo exibe um perfil do tipo Fano. A linha pontilhada representa Q_{sca} calculada usando os coeficientes a_n e b_n sem os termos de interferência associados a $g_n^* w_n A_n^{-1}$, $g_n^* w_n$, $\psi_n(y) w_n A_n^{-1}$, $\psi_n(y) w_n$, e seus complexos conjugados na Eq. (4.45); neste caso a ressonância de dipolo tem um perfil Lorentziano. 78

- 4.7 Esquema de hibridização de modos plasmônicos em esferas revestidas por camadas metálicas e geração de ressonâncias de Fano devido à sobreposição espectral de modos ligantes (ω_b) e antiligantes (ω_a). Em partículas dielétricas com revestimentos metálicos, há interferência entre duas excitações localizadas de plásmons-polártons de superfície (SPPs) associadas às interfaces *metal*-dielétrico, a saber, *camada*-caroço e *camada*-meio externo. Essa interferência pode ser interpretada como a sobreposição dos “estados de energia” de uma esfera dielétrica em um meio plasmônico (ω_c) com uma esfera plasmônica em um meio dielétrico (ω_s), ambos sistemas que suportam SPPs. As diferenças de fase entre as excitações nas duas interfaces da partícula levam a interferências destrutivas e construtivas, responsáveis pelo efeito Fano. O gráfico de Q_{sca} é apenas qualitativo e mostra a sobreposição espectral das excitações ω_b e ω_a . Figura adaptada da Ref. [40]. 79
- 4.8 Ressonâncias de Fano e aumento de campo fora da ressonância (“estado escuro”) para uma esfera metálica não absorviva ($\varepsilon_1/\varepsilon_0 < 0; \mu_1 = \mu_0$) revestida por uma camada dielétrica ($\varepsilon_2/\varepsilon_0 = 3,4 + 0,004i; \mu_2 = \mu_0$) com parâmetros de tamanho $ka = 0,2$ e $kb = 1$. (a) Q_{sca} e Q_{abs} em função de ε_1 . A linha vertical pontilhada indica a posição da ressonância de Fano não convencional (UFR). O *inset* mostra a eficiência de retroespalhamento Q_{back} em função de ε_1 nas vizinhanças da ressonância de quadrupolo – ressonância de Fano convencional (FR). (b) Média angular da intensidade do campo elétrico em função da distância radial ao centro da esfera revestida para $\varepsilon_1/\varepsilon_0 = -7,91$ (ressonância de dipolo), $\varepsilon_1/\varepsilon_0 = -7,85$ (UFR), $\varepsilon_1/\varepsilon_0 = -7,32$ (Fano *dip*) e $\varepsilon_1/\varepsilon_0 = -5,27$ (FR). 81

- 4.9 Ressonâncias de Fano não convencionais (UFRs) e convencionais (FRs) e sua relação com o aumento de campo próximo (intensidade) fora da ressonância de espalhamento para uma esfera não absorviva com índice de refração negativo ($\varepsilon_1/\varepsilon_0 < 0$; $\mu_1/\mu_0 = -21$) revestida por uma camada dielétrica ($\varepsilon_2/\varepsilon_0 = 3,4 + 0,004i$; $\mu_2 = \mu_0$) com parâmetros de tamanho $ka = 0,2$ e $kb = 1$, respectivamente. (a) Q_{sca} e Q_{abs} em função de ε_1 . A linha vertical tracejada indica a posição da UFR. (b) Média angular da intensidade elétrica em função da distância radial para $\varepsilon_1/\varepsilon_0 = -4,44$ (ressonância de dipolo), $\varepsilon_1/\varepsilon_0 = -4,42$ (UFR) e $\varepsilon_1/\varepsilon_0 = -4,27$ (Fano *dip*). 85
- 5.1 Esfera não dispersiva de raio a e propriedades ópticas (ε_1, μ_1) revestida por uma camada dispersiva de espessura $(b - a)$ e propriedades ópticas $[\varepsilon_2(\omega), \mu_2(\omega)]$; o meio externo tem parâmetros não dispersivos (ε_0, μ_0) 91
- 5.2 Eficiência de espalhamento Q_{sca} para uma esfera dielétrica ($\varepsilon_1/\varepsilon_0 = 10, \mu_1/\mu_0 = 1$) revestida por uma camada magnética dispersiva [$\varepsilon_2(\omega) = \varepsilon_{\text{Drude}}$; $\mu_2 \gg \mu_0$]. A esfera interior tem raio $a = 100$ nm e razão de aspecto $S = a/b = 0,9$, onde b é o raio da camada. A linha pontilhada representa a esfera sem revestimento. O cancelamento de espalhamento (*cloaking*) ocorre nos valores de ε_2 dados pela Eq. (5.21) para $\eta = \pi$. (a) $\mu_2/\mu_0 = 1 \times 10^3$. (b) $\mu_2/\mu_0 = 2 \times 10^3$ 98
- 5.3 Eficiência de espalhamento Q_{sca} para uma esfera dielétrica ($\varepsilon_1/\varepsilon_0 = 10, \mu_1/\mu_0 = 1$) revestida por uma camada magnética dispersiva [$\varepsilon_2(\omega) = \varepsilon_{\text{Drude}}$, $\mu_2 \gg \mu_0$]. A esfera interior tem raio $a = 100$ nm e razão de aspecto $S = a/b = 0,9$, onde b é o raio da camada. A linha pontilhada representa a esfera sem revestimento. Os valores de *cloaking* são dados pela Eq. (5.21). (a) $\mu_2/\mu_0 = 5 \times 10^3$. (b) Valores de ε_2 para o modelo de Drude e para a Eq. (5.21) com $N = 1, 2, 3$ e $\eta = \pi$. As intersecções indicadas pelas linhas verticais correspondem às localizações, em frequência, dos *comblikes*. 99

- 6.1 Metamaterial quiral constituído de estruturas metálicas em formatos de hélice [73]. (a) Duas hélices em planos diferentes, ligeiramente deslocadas, formando uma estrutura helicoidal. (b) Arranjo periódico de hélices metálicas em uma camada dupla imersa em um substrato parcialmente transparente. Para comprimentos de onda muito maiores que as estruturas helicoidais desacopladas ($\lambda \gg L > d$), vale a *teoria de meios efetivos* expressa nas Eqs. (6.3)–(6.5) [173]. (Figuras adaptadas das Refs. [168] e [174], respectivamente.) 104
- 6.2 Espalhamento eletromagnético por uma esfera de metamaterial quiral (CMM) de raio $a = 5 \times 10^{-5}$ m, $\omega_0 = \omega_p = 2$ THz e $\Gamma = 0,05\omega_0$, em função da frequência ω . (a) A parte real do índice de refração LCP (m_L) para três parâmetros de quiralidade $\kappa(\omega)$ com $F = 0,1; 0,5; 0,9$. (b) A eficiência de extinção LCP ($Q_{\text{ext,L}}$) correspondente. Não há índices de refração negativos para esses parâmetros. 115
- 6.3 Esfera de metamaterial quiral (CMM) de raio $a = 5 \times 10^{-5}$ m, $\omega_0 = \omega_p = 2$ THz e $\Gamma = 0,05\omega_0$. (a) A parte real do índice de refração RCP (m_R) para três parâmetros de quiralidade $\kappa(\omega)$ com $F = 0,1; 0,5; 0,9$. (b) A eficiência de extinção RCP ($Q_{\text{ext,R}}$) correspondente. Índices de refração negativos para ondas RCP ocorrem nas frequências $\omega > \omega_0$. . 116
- 6.4 Esfera de metamaterial quiral (CMM) de raio $a = 5 \times 10^{-5}$ m, $\omega_0 = \omega_p = 2$ THz, e $\Gamma = 0,05\omega_0$. (a) Média temporal da energia W dentro da esfera de CMM para $F = 0,1; 0,5; 0,9$. (b) Eficiência média de extinção Q_{ext} correspondente. O decréscimo em W para $\omega > \omega_0$ coincide com o aumento de Q_{ext} 118
- 6.5 Esfera de metamaterial quiral (CMM) de raio $a = 5 \times 10^{-5}$ m, fator de preenchimento $F = 0,9$ e $\omega_0 = \omega_p = 2$ THz para alguns valores de parâmetros de absorção $\Gamma = G\omega_0$: $G = 0,01; 0,05; 0,09$. (a) A eficiência média de absorção Q_{abs} . (b) A eficiência média de extinção Q_{ext} . O *inset* mostra a eficiência de espalhamento Q_{sca} para $G = 0,01$. (c) A energia total W . Para $\omega \approx \omega_0$, um decréscimo em Q_{abs} e Q_{ext} não necessariamente coincide com um decréscimo em W 119

- 7.1 Geometria do centro espalhador: um cilindro (ε_1, μ_1) de raio a revestido por uma camada cilíndrica (ε_2, μ_2) de espessura $d = b - a$ imerso no meio (ε_0, μ_0) . (a) Uma onda plana propagando-se no plano xz é incidente ao cilindro e faz um ângulo ζ com o eixo z . (b) Uma seção transversal do cilindro revestido no plano xy 125
- 7.2 Permissividade elétrica $\varepsilon_2 = \varepsilon_{\text{gra}}(\omega)$ para o meio efetivo composto de uma folha de grafeno crescida epitaxialmente em SiC [Eq. (7.45)] em função da frequência $f = \omega/2\pi$. Note que $\varepsilon'_2 < 0$ para $1,6 \text{ THz} < f < 9,4 \text{ THz}$ e $0 < \varepsilon'_2/\varepsilon_0 < 1$ para $9,4 \text{ THz} < f < 15 \text{ THz}$ 136
- 7.3 Cilindro dielétrico infinito $(\varepsilon_1/\varepsilon_0 = 11,7 + 0,01i; \mu_1 = \mu_0)$, de raio $a = 5 \mu\text{m}$, revestido por uma camada de grafeno-SiC [$\varepsilon_2 = \varepsilon_{\text{gra}}(\omega); \mu_2 = \mu_0$] [Eq. (7.45)], de espessura $d = 1 \mu\text{m}$, interagindo com uma onda plana no modo TM ($H_z = 0$). (a) Eficiência de extinção $Q_{\text{sca}}^{(\text{I})}$, (b) eficiência de absorção $Q_{\text{ext}}^{(\text{I})}$ e (c) energia interna $W_{1,2}^{(\text{I})}/W_0$ em função da frequência $f = \omega/2\pi$ para alguns ângulos ζ entre a onda incidente e o eixo do cilindro. A ressonância de plásmom ($f \approx 1,2 \text{ THz}$) nas grandezas de espalhamento não coincide com a ressonância na energia interna ($f \approx 1,0 \text{ THz}$). 138
- 7.4 Cilindro dielétrico infinito $(\varepsilon_1/\varepsilon_0 = 11,7 + 0,01i; \mu_1 = \mu_0)$, de raio $a = 5 \mu\text{m}$, revestido por uma camada de grafeno-SiC [$\varepsilon_2 = \varepsilon_{\text{gra}}(\omega); \mu_2 = \mu_0$] [Eq. (7.45)], de espessura $d = 1 \mu\text{m}$, interagindo com uma onda plana no modo TE ($E_z = 0$). (a) Eficiência de extinção $Q_{\text{sca}}^{(\text{II})}$, (b) eficiência de absorção $Q_{\text{ext}}^{(\text{II})}$ e (c) energia interna $W_{1,2}^{(\text{II})}/W_0$ em função da frequência $f = \omega/2\pi$ para alguns ângulos ζ entre a onda incidente e o eixo do cilindro. A ressonância de plásmom do grafeno-SiC ($f_0 \approx 1,6 \text{ THz}$) não é excitada nesta configuração, uma vez que $\mathbf{E}_i \perp \hat{\mathbf{z}}$ para todo ζ . O aumento de intensidade do campo fora da ressonância encontra-se em $f \approx 4,3 \text{ THz}$ 139

- 7.5 Cilindro dielétrico infinito ($\varepsilon_1/\varepsilon_0 = 3,4 + 0,01i$; $\mu_1 = \mu_0$), de raio $a = 5 \mu\text{m}$, com (linha sólida) e sem (linha tracejada) uma camada de grafeno-SiC [$\varepsilon_2 = \varepsilon_{\text{gra}}(\omega)$; $\mu_2 = \mu_0$] [Eq. (7.45)], de espessura $d = 1 \mu\text{m}$, em polarização TM ($H_z = 0$). (a) Eficiência de absorção e espalhamento para incidência normal ($\zeta = 90^\circ$), mostrando uma grande absorção na ressonância de plásmon do grafeno-SiC. Os picos para o cilindro homogêneo Si correspondem a ressonâncias de Lorenz-Mie de monopolo ($n = 0$), dipolo ($n = 1$), quadrupolo ($n = 2$) e octopolo ($n = 3$). (b) Energia interna para incidência normal. Há um aumento de campo (intensidade) fora da ressonância de espalhamento devido ao revestimento por grafeno-SiC em $f \approx 1,0 \text{ THz}$ 141
- 7.6 Espalhamento eletromagnético por um cilindro dielétrico ($\varepsilon_1/\varepsilon_0 = 3,4 + 0,01i$; $\mu_1 = \mu_0$), de raio $a = 5 \mu\text{m}$, com (linha sólida) e sem (linha tracejada) uma camada de grafeno-SiC ($\varepsilon_2 = \varepsilon_{\text{gra}}(\omega)$; $\mu_2 = \mu_0$) [Eq. (7.45)], de espessura $d = 1 \mu\text{m}$, em polarização TM. (a) Eficiência de retroespalhamento $Q_{\text{back}}^{(\text{I})}$. (b) As energias elétrica $W_{E1}^{(\text{I})}$ e magnética $W_{H1}^{(\text{I})}$ no interior do cilindro dielétrico. (c) As energias elétrica $W_{E2}^{(\text{I})}$ e magnética $W_{H2}^{(\text{I})}$ no interior da camada de grafeno-SiC. As ressonâncias de Fano são devidas às interferências de dipolo-quadrupolo ($f \approx 10,2 \text{ THz}$) e quadrupolo-octopolo ($f \approx 14,0 \text{ THz}$) e correspondem a grandes quantidades de energia no interior do cilindro dielétrico. . . 143
- 7.7 Velocidade de transporte de energia para os modos TM ($v_E^{(\text{I})}$) e TE ($v_E^{(\text{II})}$) para um meio desordenado bidimensional composto por cilindros de silício (Si) ($\varepsilon_1/\varepsilon_0 = 3,4 + 0,01i$; $\mu_1 = \mu_0$), de raio $a = 5 \mu\text{m}$, revestidos por uma camada de grafeno-SiC ($\varepsilon_2 = \varepsilon_{\text{gra}}(\omega)$; $\mu_2 = \mu_0$) [Eq. (7.45)], de espessura $d = 1 \mu\text{m}$, com $\zeta = 90^\circ$ (incidência normal). A fração de espalhadores no meio é $f_{\text{pack}} = 1/3$ (regime de percolação) e a velocidade de transporte é calculada em relação à velocidade da radiação no meio externo: $c = 1/\sqrt{\varepsilon_0\mu_0}$ 145

- 8.1 Eficiência de absorção média $Q_{\text{abs}} = [Q_{\text{abs}}^{(\text{I})} + Q_{\text{abs}}^{(\text{II})}]/2$ (onda despolarizada) para um cilindro de silício (Si) ($\varepsilon_1/\varepsilon_0 = 11,7 + 0,01i$), de raio $a = 0,5 \mu\text{m}$, revestido por um meio efetivo composto de uma folha de grafeno epitaxialmente crescida em carbetto de silício (SiC) [$\varepsilon_2 = \varepsilon_{\text{gra}}(\omega)$], dado pela Eq. (7.45), de espessura $d = 1 \mu\text{m}$ no limite de Rayleigh. (a) Q_{abs} em função da frequência $f = \omega/2\pi$ e do ângulo ζ entre o cilindro e a onda incidente. A absorção omnidirecional ocorre para $f \approx 5,2 \text{ THz}$. (b) Razão $Q_{\text{abs}}/Q_{\text{ext}}$, onde $Q_{\text{ext}} = [Q_{\text{ext}}^{(\text{I})} + Q_{\text{ext}}^{(\text{II})}]/2$ é a eficiência de extinção média, para o mesmo conjunto de parâmetros, mostrando que $Q_{\text{abs}}/Q_{\text{ext}} \geq 0,85$ neste intervalo de frequência para todos os ângulos ζ 153
- 8.2 Eficiência de absorção média $Q_{\text{abs}} = [Q_{\text{abs}}^{(\text{I})} + Q_{\text{abs}}^{(\text{II})}]/2$ (onda não polarizada) para um cilindro de silício (Si) ($\varepsilon_1/\varepsilon_0 = 11,7 + 0,01i$), de raio $a = 0,5 \mu\text{m}$, revestido por um meio efetivo composto de uma folha de grafeno epitaxialmente crescida em carbetto de silício (SiC), $\varepsilon_2 = \varepsilon_{\text{gra}}(\omega)$, de espessura $d = 1 \mu\text{m}$. O ângulo $\zeta = 1^\circ$ impõe que o campo elétrico da onda incidente seja aproximadamente ortogonal ao eixo do cilindro mesmo no modo TM, excitando apenas plásmons de superfície. Para $\sigma_b = 3,5\sigma_0$, temos uma curva assimétrica (do tipo Fano); para $\sigma_b = 0$, temos uma Lorentziana. 155
- 8.3 Média angular da intensidade de campo elétrico $\langle |\mathbf{E}^{(\text{I})}/E_0|^2 \rangle_\Omega$ no interior de um cilindro de silício (Si) ($\varepsilon_1/\varepsilon_0 = 11,7 + 0,01i$), de raio $a = 0,5 \mu\text{m}$, revestido por uma camada de meio efetivo grafeno-SiC $\varepsilon_2 = \varepsilon_{\text{gra}}(\omega)$, de espessura $d = 1 \mu\text{m}$, em função da distância radial para $\zeta = 60^\circ$. A onda incidente encontra-se na polarização TM ($\mathbf{H}_i \perp \hat{\mathbf{z}}$ para todo ζ). As frequências analisadas são: $f = 1,5 \text{ THz}$ (plásmon volumétrico, $\alpha_{||}$), $f = 5,2 \text{ THz}$ (absorção omnidirecional) e $f = 7,1 \text{ THz}$ (plásmon de superfície, $\alpha_{\perp}$). 156

- 9.1 Geometria de espalhamento: um cilindro magneto-óptico infinito, com propriedades ópticas $(\overleftrightarrow{\epsilon}_1, \overleftrightarrow{\mu}_1)$ e raio a , é submetido a um campo magnético uniforme $\mathbf{B}$ ao longo de seu eixo. Uma onda plana $(\mathbf{E}_i^{(II)}, \mathbf{H}_i^{(II)})$ – no modo TE $(\mathbf{E}_i^{(II)} \perp \hat{\mathbf{z}})$ –, propagando-se no meio (ϵ_0, μ_0) , interage com este cilindro em incidência normal. A amplitude do campo magnético incidente é muito menor que a do campo $\mathbf{B}$. . . 162
- 9.2 Permissividade elétrica efetiva $\epsilon_B = \epsilon_1(1 - \beta^2)$ de um cilindro magneto-óptico homogêneo, de raio $a = 1 \mu\text{m}$, consistindo de uma folha de grafeno crescida epitaxialmente em SiC, cuja condutividade bidimensional é dada na Eq. (9.28), em função da frequência $f = \omega/2\pi$ para alguns valores de amplitude de campo B ao longo do eixo do cilindro. (a) Parte real de ϵ_B/ϵ_0 . Há mudança de sinal para $f_0 \approx 1,6 \text{ THz}$. O *inset* mostra os valores de frequência em que $\text{Re}(\epsilon_B) = -\epsilon_0$ (ressonância “dipolar”). (b) Parte imaginária de ϵ_B/ϵ_0 . 167
- 9.3 Eficiências para um cilindro magneto-óptico constituído de uma folha de grafeno crescida epitaxialmente em carbetto de silício (SiC) [Eq. (9.28)] em função da frequência $f = \omega/2\pi$ e do campo $\mathbf{B} = B\hat{\mathbf{z}}$ aplicado. A variação de parâmetro de tamanho no intervalo de frequência é $5 \times 10^{-3} < ka < 0,4$ (limite de Rayleigh para baixas frequências). (a) Eficiência de espalhamento Q_{sca} . (b) Eficiência de extinção Q_{ext} . O pico para $B = 0$, cortado pela linha vertical, divide o espectro em duas regiões: ressonâncias dos coeficientes a_1 à esquerda e a_{-1} à direita. 170
- 9.4 Espalhamento eletromagnético em um meio bidimensional, composto por cilindros de grafeno-SiC [Eq. (9.28)] de raios $a = 1 \mu\text{m}$, em função da frequência $f = \omega/2\pi$ e do campo magnético aplicado $\mathbf{B} = B\hat{\mathbf{z}}$. (a) Energia W/W_0 no interior de um único centro espalhador. (b) Velocidade de transporte de energia no meio desordenado com fração volumétrica de centros espalhadores $f_{\text{pack}} = 1/3$ 172

- 10.1 Centro espalhador com formato arbitrário e $(N - 1)$ inclusões arbitrárias irradiado por uma onda plana. O meio externo é (ε_0, μ_0) e cada inclusão tem volume V_q e propriedades ópticas (ε_q, μ_q) , com $q = \{1, \dots, N-1\}$, sendo V_N o volume da partícula hospedeira (ε_N, μ_N) .177

Lista de Abreviaturas

CMM	Metamateriais quirais (<i>Chiral metamaterials</i>).
DBF	Drude-Born-Fedorov.
EIT	Transparência eletromagneticamente induzida (<i>Electromagnetically induced transparency</i>).
EC	Circuito equivalente (<i>Equivalent circuit</i>).
ED	Eletrodinâmica (<i>Electrodynamic</i>).
FR	Ressonância de Fano (<i>Fano resonance</i>).
GHz	Gigahertz (10^9 Hz).
HMM	Metamateriais hiperbólicos (<i>Hyperbolic metamaterials</i>).
LCP	Polarizada circularmente à esquerda (<i>Left-circularly polarized</i>).
LSP	Plásmon-poláriton de superfície localizado (<i>Localized surface plasmon-polariton</i>).
MDR	Ressonância dependente da morfologia (<i>Morphology-dependent resonance</i>).
RCP	Polarizada circularmente à direita (<i>Right-circularly polarized</i>).
SAR	Taxa de absorção específica (<i>Specific absorption rate</i>).
Si	Silício (<i>Silicon</i>).
SiC	Carbeto de silício (<i>Silicon carbide</i>).

SPP	Plásmon-poláriton de superfície (<i>Surface plasmon-polariton</i>).
SRR	Ressonadores em anéis fendidos (<i>Split-ring resonantors</i>).
TE	Campo elétrico transversal (<i>Transverse electric field</i>).
THz	Terahertz (10^{12} Hz).
TM	Campo magnético transversal (<i>Transverse magnetic field</i>).
UFR	Ressonância de Fano não convencional (<i>Unconventional Fano resonance</i>).

Lista de Símbolos

ε	Permissividade elétrica.
μ	Permeabilidade magnética.
σ	Condutividade elétrica.
λ	Comprimento de onda incidente.
k	Número de onda incidente.
ω	Frequência angular da onda eletromagnética.
i	Unidade imaginária.
E	Campo elétrico.
D	Deslocamento elétrico.
H	Campo magnético.
B	Campo de indução magnética.
J	Densidade de corrente elétrica.
E_i	Campo elétrico incidente.
H_i	Campo magnético incidente.
E_s	Campo elétrico espalhado.
H_s	Campo magnético espalhado.
E₀	Amplitude do campo elétrico incidente.

$\mathbf{f}(\theta, \phi)$	Função amplitude de espalhamento.
$I(\theta, \phi)$	Intensidade espalhada.
I_0	Intensidade incidente.
σ_{sca}	Seção de choque total de espalhamento.
σ_{back}	Seção de choque diferencial de retroespalhamento (radar).
σ_{forward}	Seção de choque diferencial de espalhamento para frente.
σ_{ext}	Seção de choque de extinção.
σ_{abs}	Seção de choque de absorção.
$\tilde{a}$	Albedo.
$\langle \cos \theta \rangle$	Parâmetro de assimetria.
σ_{pr}	Seção de choque de pressão de radiação.
ℓ	Livre caminho médio de colisão elástica.
ℓ^*	Livre caminho médio de transporte.
v_{E}	Velocidade de transporte de energia.
τ_{d}	Tempo de residência da onda eletromagnética.
c	Velocidade da luz no vácuo.
$\mathcal{D}$	Coeficiente de difusão.
f_{pack}	Fração volumétrica de partículas.
W	Média temporal da energia eletromagnética no interior da partícula.
m	Índice de refração complexo.
ε_0	Permissividade elétrica do espaço livre.
μ_0	Permeabilidade magnética espaço livre.

ε_1	Permissividade elétrica da região 1.
μ_1	Permeabilidade magnética da região 1.
ε_2	Permissividade elétrica da camada concêntrica.
μ_2	Permeabilidade magnética da camada concêntrica.
$\varepsilon_1^{(\text{eff})}$	Coefficiente efetivo de energia elétrica da região 1.
$\mu_1^{(\text{eff})}$	Coefficiente efetivo de energia magnética da região 1.
$\varepsilon_2^{(\text{eff})}$	Coefficiente efetivo de energia elétrica da camada.
$\mu_2^{(\text{eff})}$	Coefficiente efetivo de energia magnética da camada.
a	Raio interno do centro espalhador.
b	Raio externo do centro espalhador.
Q_{ext}	Eficiência de extinção.
Q_{sca}	Eficiência de espalhamento.
Q_{abs}	Eficiência de absorção.
a_n	Coefficiente de espalhamento dos multipolos elétricos.
b_n	Coefficiente de espalhamento dos multipolos elétricos.
x	Parâmetro de tamanho interior do centro espalhador.
y	Parâmetro de tamanho exterior do centro espalhador.
σ_g	Seção de choque geométrica.
Q_{back}	Eficiência de retroespalhamento (radar).
Q_{forward}	Eficiência de espalhamento para a frente.
j_n	Função esférica de Bessel.
y_n	Função esférica de Neumann.

$h_n^{(1)}$	Função esférica de Hankel de primeiro tipo.
ψ_n	Função de Riccati-Bessel.
χ_n	Função de Riccati-Neumann.
ξ_n	Função de Riccati-Hankel de primeiro tipo.
$\mathbf{E}_q$	Campo elétrico no interior da região q .
$\mathbf{H}_q$	Campo magnético no interior da região q .
$\langle u_q \rangle_t$	Média temporal da densidade de energia eletromagnética na região q .
$\varepsilon_q^{(\text{eff})}$	Coefficiente efetivo de energia elétrica da região q .
$\mu_q^{(\text{eff})}$	Coefficiente efetivo de energia magnética da região q .
ε_q	Permissividade elétrica do região q .
μ_q	Permeabilidade magnética do região q .
W_q	Energia eletromagnética armazenada na região q .
W_0	Energia eletromagnética armazenada em uma região com as mesmas propriedades do meio externo.
$\mathcal{I}_n$	Integral radial normalizada do produto de funções especiais.
m_q	Índice de refração relativo entre a região q e o meio circundante.
$\tilde{m}_q$	Índice de impedância relativo entre a região q e o meio circundante.
$W_{1,2}$	Soma das energias dos meios 1 e 2.
S	Parâmetro de espessura ou razão de aspecto.
f	Frequência do campo elétrico incidente.
H_0	Amplitude do campo magnético incidente.
$\mathbf{P}$	Polarização elétrica.

$\mathbf{M}$	Magnetização.
W_E	Energia elétrica.
W_H	Energia magnética.
W_{EH}	Energia magneto-elétrica.
m_R	Índice de refração relativo às ondas RCP.
m_L	Índice de refração relativo às ondas LCP.
$a_n^{(I)}$	Coeficiente de espalhamento dos multipolos elétricos no modo TM.
$b_n^{(I)}$	Coeficiente de espalhamento dos multipolos magnéticos no modo TM.
$a_n^{(II)}$	Coeficiente de espalhamento dos multipolos elétricos no modo TE.
$b_n^{(II)}$	Coeficiente de espalhamento dos multipolos magnéticos no modo TE.
d	Espessura da camada homogênea.
J_n	Função cilíndrica de Bessel.
Y_n	Função cilíndrica de Neumann.
$H_n^{(1)}$	Função cilíndrica de Hankel de primeiro tipo.
ζ	Ângulo entre a onda incidente e o eixo do cilindro.
$\alpha_{ }$	Polarizabilidade na polarização paralela.
$\alpha_{\perp}$	Polarizabilidade na polarização perpendicular.
$\overleftrightarrow{\epsilon}$	Tensor de permissividade elétrica.
$\overleftrightarrow{\mu}$	Tensor de permeabilidade magnética.
$\overleftrightarrow{I}$	Tensor unitário.
$\mathcal{V}$	Constante de Verdet.
τ_{abs}	Tempo de absorção.

ℓ_{ext}	Livre caminho médio de extinção.
v_{p}	Velocidade de fase.
S	Vetor de Poynting.

Sumário

Lista de Figuras	xv
Lista de Abreviaturas	xxvii
Lista de Símbolos	xxix
1 Introdução	1
2 Física do espalhamento eletromagnético	11
2.1 Ondas planas harmônicas	13
2.2 Meios materiais	15
2.3 Solução das equações de Maxwell	16
2.3.1 Equação de Helmholtz escalar	17
2.3.2 Condições de contorno	18
2.4 Seções de choque	20
2.4.1 Conservação de energia	20
2.4.2 Conservação de <i>momentum</i>	23
2.4.3 Coeficiente de difusão	24
3 Esferas com uma camada de revestimento	27
3.1 Eficiências de Aden-Kerker para esferas concêntricas	28
3.2 Energia eletromagnética interna	31
3.2.1 Esfera interior	34
3.2.2 Camada esférica	35
3.2.3 Energia total	35
3.3 Esferas revestidas contendo metamateriais	36

3.3.1	Metamateriais isotrópicos e ressonâncias plasmônicas	37
3.3.2	Cálculo numérico das eficiências e energia interna	42
3.3.2.1	Esfera de metamaterial revestida por um dielétrico	44
3.3.2.2	Esfera dielétrica revestida por um metamaterial	48
3.4	Conclusões	54
4	Ressonâncias de Fano em esferas revestidas	55
4.1	Intensidades dos campos internos	58
4.2	Ressonância de Fano convencional	61
4.2.1	Osciladores harmônicos acoplados	62
4.2.2	Ressonâncias de plásmons-polártons localizadas	66
4.3	Ressonância de Fano não convencional	72
4.3.1	Aumento de intensidade do campo fora da ressonância	80
4.3.2	Estados escuros e refração negativa	84
4.4	Conclusões	86
5	Ressonâncias de Fano em <i>comblikes</i>	89
5.1	Camada no limite ferromagnético	90
5.1.1	Condições para o cancelamento de espalhamento	94
5.1.2	Ressonâncias em estrutura de pente	96
5.2	Cálculo numérico do espalhamento	97
5.3	Conclusões	100
6	Esferas opticamente ativas	101
6.1	Metamateriais quirais	102
6.1.1	Relações constitutivas e parâmetros efetivos	103
6.1.2	Densidade de energia eletromagnética	105
6.2	Eficiências de Bohren para esferas quirais	105
6.2.1	Relações de Drude-Born-Fedorov	106
6.2.2	Campos de Beltrami	108
6.2.3	Seções de choque e coeficientes de Lorenz-Mie	109
6.3	Energia eletromagnética interna	110
6.4	Cálculo numérico das eficiências e energia interna	114

6.5	Conclusões	120
7	Cilindros revestidos sob incidência oblíqua de radiação	123
7.1	Eficiências para cilindros concêntricos	124
7.2	Energia eletromagnética interna	128
7.2.1	Cilindro interior	130
7.2.2	Camada cilíndrica	131
7.2.3	Energia total	132
7.3	Cálculo numérico das eficiências e energia interna	134
7.3.1	Grafeno crescido em carbetto de silício	135
7.3.2	Cilindros revestidos por grafeno	137
7.4	Conclusões	146
8	Absorção omnidirecional em cilindros finos revestidos	147
8.1	Limite de Rayleigh para cilindros revestidos	148
8.1.1	Eficiências em termos de polarizabilidades	149
8.1.2	Absorção omnidirecional	150
8.2	Resultados numéricos para o grafeno	152
8.3	Conclusões	158
9	Cilindros magneto-ópticos	159
9.1	Densidade de energia em meios girotrópicos	160
9.2	Espalhamento por cilindros magneto-ópticos	161
9.2.1	Eficiências	163
9.2.2	Energia interna	164
9.3	Cálculo numérico das eficiências e energia interna	166
9.3.1	Grafeno crescido em carbetto de silício	166
9.3.2	Influência do campo magnético externo	169
9.4	Conclusões	174
10	Centros espalhadores de formatos arbitrários contendo inclusões	175
10.1	Energia interna	175
10.2	Velocidade de transporte de energia	177
10.3	Seção de choque de absorção	178

10.4 Tempo de absorção	179
10.5 Conclusões	180
11 Conclusão geral e perspectivas	183
Referências	187
Apêndice A - Equações de Maxwell na matéria	211
A.1 Equações de Maxwell macroscópicas	211
A.2 Condições de contorno	215
Apêndice B - Campos eletromagnéticos harmônicos	217
B.1 Representação complexa dos campos	217
B.2 Ondas eletromagnéticas planas	220
Apêndice C - Conservação da energia eletromagnética	225
C.1 Teorema de Poynting	225
C.2 Densidade de energia e absorção	226
Apêndice D - Componentes dos campos eletromagnéticos	229
D.1 Geometria esférica	229
D.1.1 Esferas concêntricas	231
D.1.1.1 Campos internos e espalhados	231
D.1.1.2 Condições de contorno	232
D.1.2 Esferas opticamente ativas	233
D.1.2.1 Campos internos e espalhados	233
D.1.2.2 Condições de contorno	234
D.2 Geometria cilíndrica	235
D.2.1 Cilindros concêntricos	237
D.2.1.1 Campos internos e espalhados	237
D.2.1.2 Condições de contorno e funções auxiliares	239
D.2.2 Cilindro magneto-óptico	242
D.2.2.1 Campos internos e espalhados	242
D.2.2.2 Condições de contorno	243

Introdução

O espalhamento de ondas eletromagnéticas por pequenas partículas é um tópico fundamental em *eletrodinâmica* [1–3]. Ele abrange um grande espectro de aplicações, incluindo áreas da meteorologia, astronomia, biologia e medicina [1, 4, 5]. Historicamente, considera-se que o estudo científico do espalhamento eletromagnético, com leis físicas bem definidas, tenha começado em 1869, nos experimentos de Tyndall com aerossóis [6], seguidos pelo extenso e prolífico trabalho teórico de Lord Rayleigh [1] a partir de 1871 [7, 8]. Aliados à teoria eletromagnética de Maxwell, esses estudos foram precursores de duas abordagens distintas que se destacaram ao longo do século XX: uma abordagem *fenomenológica*, chamada de *teoria de transferência radiativa*, e uma abordagem *analítica*, que recebeu o nome de *teoria de espalhamento múltiplo* [3, 9].

A teoria de transferência radiativa, ou simplesmente *teoria de transporte*, lida com a propagação de intensidades dos campos eletromagnéticos através de um substrato desordenado. Essa teoria, iniciada por Schuster em 1903 [10], é baseada em observações heurísticas das características de transporte das intensidades, não incluindo, por exemplo, efeitos de difração [5]. A equação diferencial básica dessa teoria é chamada de *equação de transferência radiativa*, a qual é formalmente equivalente à *equação de Boltzmann* em teoria cinética dos gases e em teoria de transporte de nêutrons [5, 9]. Em contrapartida, a teoria de espalhamento múltiplo, ou *teoria analítica*, baseia-se na resolução da *equação de onda vetorial* proveniente, no caso eletromagnético, das equações de Maxwell macroscópicas [11]. A partir das soluções para uma partícula isolada (*condições de contorno*) [1, 2, 6], os efeitos

de interação entre muitas partículas são introduzidos no sistema, de forma a se obter, ao final, médias configuracionais (ou estatísticas) do espalhamento. Uma das mais úteis teorias de espalhamento múltiplo foi desenvolvida por Twersky em 1964; dentre outras teorias analíticas importantes, tem-se o *método do diagrama*, as equações de *Dyson* (campo médio) e de *Bethe-Salpeter* [11–13]. Apesar de suas diferenças com relação ao ponto de partida, as teorias de espalhamento múltiplo e de transporte possuem algumas relações fundamentais entre si – com grandezas, por exemplo, que podem ser mapeadas de uma teoria na outra através de transformadas de Fourier [9, 11]. De fato, a equação de transporte de Boltzmann pode ser obtida *analiticamente* da equação escalar de Bethe-Salpeter na chamada “aproximação de escada” (*ladder approximation*) [14]. Essa aproximação preserva, *grosso modo*, os efeitos de interferência entre as ondas e suas respectivas complexas conjugadas (gerando as *intensidades*) e despreza as interferências não triviais [15]. Dessa maneira, o espalhamento múltiplo fornece uma derivação microscópica da equação de transferência radiativa.

Aqui, tratamos especificamente da *teoria analítica* do espalhamento eletromagnético, tendo como foco principal o espalhamento por *partículas isoladas*, também chamado de *espalhamento simples* [1, 2]. Embora nossa abordagem analítica esteja restrita a um único centro espalhador, ela pode ser estendida a situações em que haja uma coleção de partículas no meio material, distribuídas aleatória e uniformemente. A condição que se impõe ao sistema, nesse caso, é a de que as partículas sejam *independentes*, isto é, interajam única e exclusivamente com a onda incidente, de modo que os campos “coletados” por um observador são espalhados uma *única* vez no meio. Essa condição é alcançada em meios com baixa densidade de centros espalhadores. Desse modo, o espalhamento simples é o processo elementar (“*building block*”) do espalhamento múltiplo, cuja dependência entre as partículas manifesta-se no fato de que uma mesma onda pode ser espalhada *múltiplas* vezes no meio desordenado, engendrando-se, assim, uma caminhada aleatória no espaço transformado de Fourier [11, 16]. Além disso, a hipótese de que a distribuição de partículas no espaço seja aleatória nos permite considerar que não haja uma relação sistemática entre as fases das ondas espalhadas. Essa consideração de *espalhamento incoerente*, entretanto, não é inteiramente válida para determinados

ângulos, uma vez que há interferência da radiação espalhada pela partícula na mesma direção do feixe de incidência (*teorema óptico*) [2]. De fato, no caso de partículas magneto-dielétricas com dimensões da ordem do comprimento de onda ou muito menores (*aproximação dipolar*), podem ocorrer efeitos de *quase-cancelamento* do espalhamento para frente (refletor de “Huygens”) ou de retroespalhamento *nulo* (fonte de “Huygens”) [17]. A partícula isolada, neste caso, deve satisfazer as condições de Kerker dipolares [18] para o *espalhamento direcional*. Por outro lado, se o comprimento de onda for da ordem do livre caminho médio de colisão dos fótons com as partículas no meio desordenado (critério de Ioffe-Regel [16]), podem ser verificadas interferências no retroespalhamento (*localização fraca da luz*) [19] e, dependendo da densidade de centros espalhadores, também no espalhamento para frente [20].

Na prática, em experimentos de laboratório, as condições favoráveis para o espalhamento simples são obtidas a partir de sistemas diluídos ou, de modo geral, que possuam uma pequena fração volumétrica de centros espalhadores distribuídos uniformemente no volume total. Sistemas desse tipo são ditos de *baixa densidade* ou de *fraca desordem*. Para citarmos um exemplo prático, em um meio desordenado composto por partículas esféricas idênticas imersas em uma matriz homogênea, a aproximação de espalhamento simples é aplicável se as distâncias típicas entre partículas vizinhas forem muito maiores que o raio dessas partículas [2].

Historicamente, uma solução completa do espalhamento simples por uma partícula esférica de tamanho arbitrário foi derivada, de maneira independente, por Lorenz [21], que usou sua própria versão do eletromagnetismo, e Mie [22], via equações de Maxwell, há mais de um século [23, 24]. Por essa razão, esta solução é frequentemente referida como espalhamento ou *teoria de Lorenz-Mie*¹. Outras geometrias de centros espalhadores – como cilindros e esferas revestidos, por exemplo –, calculadas dentro do mesmo formalismo, entram no que podemos chamar de

¹ Em realidade, antes mesmo de Lorenz ou Mie, Clebsch [25], em 1863, resolveu o problema de uma esfera rígida no contexto de ondas elásticas – um ano antes da teoria eletromagnética da luz ser proposta por Maxwell. Em 1909, um ano após o artigo de Mie, Debye [26], trabalhando de forma independente, abordou o problema de pressão de radiação sobre partículas esféricas utilizando duas funções potenciais escalares (provenientes dos vetores de Hertz). Portanto, levando em conta apenas a teoria eletromagnética, o espalhamento de ondas planas por esferas isotrópicas e homogêneas deveria ser chamado de *teoria de Lorenz-Mie-Debye*.

teorias de Lorenz-Mie generalizadas [27, 28].

Em nosso estudo, abordamos quatro generalizações ou extensões do espalhamento de Lorenz-Mie: esferas e cilindros revestidos, esfera opticamente ativa e cilindro magneto-óptico. A rigor, o trabalho teórico-*analítico* que aqui nos propusemos não se baseia, portanto, em nenhuma teoria nova e, sem incorrer em exageros, podemos dizer que a teoria clássica é muito bem estabelecida², com boa concordância entre teoria analítica, simulação numérica e experimentos [1, 2, 27, 31–33]. No entanto, apesar de sua longa história e do advento da *eletrodinâmica quântica* na segunda metade do século passado, a pesquisa em espalhamento eletromagnético clássico, no qual a teoria de Lorenz-Mie se inclui como um importante caso particular, tem revelado, ainda hoje, algumas surpresas. As chamadas “ressonâncias ópticas gigantes”, que aumentam de maneira anômala com as ordens de ressonância (dipolo, quadrupolo, etc.) [34]; a formação de estruturas complexas de campos em vórtices dentro dos centros espalhadores [35]; a absorção anômala de energia por nanopartículas metálicas [36]; dependências não usuais do fluxo de energia na superfície de partículas esféricas [37]; e o “super-espalhamento” em estruturas de dimensões menores que o comprimento de onda [38] são alguns exemplos de fenômenos básicos, de grande relevância, que foram desvelados apenas recentemente na teoria de espalhamento eletromagnético. Em outras palavras, embora bem estabelecida, a pesquisa em teoria de espalhamento clássico é fundamental para modernas aplicações em fotônica, plasmônica e metamateriais, como pode ser comprovado em trabalhos bastante recentes [39, 40].

Atualmente, dentre os muitos tópicos de interesse tecnológico, o entendimento e o controle das interações que ocorrem entre a radiação eletromagnética e a matéria em uma escala abaixo do comprimento de onda são dois dos objetivos centrais na área de *nanofotônica*, a qual engloba a *fotônica* e a *plasmônica* [41]. Um sistema típico

² Alguns dos mais belos fenômenos ópticos naturais podem ser explicados, em uma roupagem moderna e sofisticada, pela teoria de Lorenz-Mie. Usando o formalismo de Debye [26] na aproximação de esferas transparentes, o físico brasileiro *H. M. Nussenzveig*, por exemplo, formulou uma *teoria quantitativa* do arco-íris (primário e secundário) e da auréola em 1969 [29, 30]. Seus resultados, obtidos a partir de estudos dos polos nas expansões das amplitudes de espalhamento em termos de múltiplas reflexões (séries de Lorenz-Mie) e analogias das ondas parciais escalares com o espalhamento por potenciais em Mecânica Quântica e momentos angulares complexos (transformação de Watson), renderam-lhe o prêmio *Max Born* em 1986, conferido pela *Optical Society of America*.

utilizado para se investigar tais interações é composto por nanopartículas metálicas (esféricas ou de formatos arbitrários) que suportam *modos elétricos de superfície*, também chamados de ressonâncias de *plásmons-polárítos localizados* [1, 42]. Essas ressonâncias de espalhamento ocorrem quando elétrons de uma superfície metálica são coerentemente excitados pelo campo eletromagnético aplicado³.

Em uma ressonância plasmônica *localizada* (isto é, com *ondas estacionárias* de cargas), o forte aumento do *campo eletromagnético próximo* faculta o uso de nanopartículas metálicas em muitas aplicações modernas, tais como em terapias, imagens biomédicas, espectroscopia Raman “aumentada” (*surface-enhanced*), sensores bioquímicos e no desenvolvimento de metamateriais ópticos [42, 45]. Como essas ressonâncias de plásmons-polárítos dependem crucialmente da geometria e composição das nanopartículas [46, 47], uma intensa atividade de pesquisa tem se focado no *design* ótimo de propriedades físicas que permitam o máximo aumento do campo eletromagnético para aplicações tecnológicas. A possibilidade de se obter uma melhor modulação dessas ressonâncias tem conduzido, por exemplo, a pesquisas em agregados de nanopartículas, tais como os trímeros [48, 49], tetrâmeros [50] e arranjos desordenados de nanopartículas [51].

Por sua simplicidade entre todas as geometrias possíveis, tanto do ponto de vista teórico quanto de manufatura, um centro espalhador esférico revestido por uma camada homogênea (que pode ser um *meio efetivo* de uma *heteroestrutura* [52]) é comumente o mais empregado em aplicações, o que lhe confere o *status* de *sistema de referência* para estudos em plasmônica. Esse sistema consiste de uma esfera interior dielétrica revestida por uma camada metálica (ou vice-versa), de modo que os *plásmons-polárítos* de superfície dependem da *espessura da camada*, uma propriedade que é explorada no desenvolvimento de muitas aplicações, tanto na frequência do visível quanto do infravermelho próximo.

³ As ressonâncias de plásmons correspondem a oscilações coletivas dos elétrons de condução (*coerentemente* excitados pela radiação incidente) que se propagam na superfície de um material condutor. Essa onda superficial de cargas é o que se denomina *plásmon de superfície*, onde o termo “plásmon” se refere a um *quantum* de excitação. As cargas oscilantes de um plásmon, por sua vez, criam um campo elétrico que se estende dentro do material dielétrico na interface com a superfície metálica (o ar, por exemplo). Esse campo elétrico polariza o dielétrico circundante, gerando assim uma polarização que também tem características de onda, e cujo *quantum* de excitação é conhecido como *poláriton*. Uma vez que o poláriton se acopla à onda superficial de cargas, o plásmon de superfície é frequentemente chamado de *plásmon-poláriton de superfície* (SPP) [43, 44].

Em especial, dentro da teoria eletromagnética, a teoria de *hibridização de plásmons* foi desenvolvida recentemente a fim de descrever a resposta plasmônica de uma nanopartícula metálica dotada de estratificações [53]. Tal teoria de hibridização, um análogo eletromagnético da teoria de orbitais moleculares, descreve com sucesso como os plásmons de superfícies adjacentes, presentes na constituição da nanopartícula e com separações da ordem do comprimento de penetração (*skin depth*), interagem entre si e *hibridizam-se* – em analogia aos orbitais atômicos, os quais se hibridizam para formar os orbitais moleculares *ligantes* e *antiligantes* em teoria de estrutura eletrônica [53].

Uma propriedade importante de sistemas plasmônicos contendo estratificações é a chamada *ressonância de Fano*, originalmente descoberta no contexto de sistemas atômicos [54]. Ela pode ser explorada, por exemplo, para controlar as interações entre os modos eletromagnéticos em nanopartículas que exibem ressonâncias de plásmons [55, 56]. Em sistemas plasmônicos, a ressonância de Fano (convencional) resulta da interferência entre um modo contínuo (“super-radiante”) e um modo discreto (“sub-radiante”), produzindo um formato *assimétrico* de linha espectral bastante característico [55–57]. A modulação do formato de linha de Fano pode favorecer a *transparência induzida por plásmons* [58, 59], fenômeno clássico bastante similar à *transparência eletromagneticamente induzida* (EIT, do inglês *electromagnetically induced transparency*) [60, 61] em sistemas atômicos⁴. De fato, quando ocorre o acoplamento coerente entre duas ressonâncias com origens distintas (por exemplo, dipolo e quadrupolo) ou fora de fase, uma interferência destrutiva pode suprimir a absorção de uma banda de ressonância, levando a uma janela de frequência de transparência induzida. Essas *ressonâncias assimétricas* – assim chamadas devido ao contraste em relação aos formatos de linha *Lorentziano*, *Gaussiano* ou de *Voigt* – foram observadas em metamateriais dispersivos [63] e possuem muitas aplicações em potencial, tais como o desenvolvimento de materiais plasmônicos de baixas perdas eletromagnéticas e de dispositivos de “luz lenta” (*slow light*) [55, 64].

⁴ É curioso notar que as ressonâncias de Fano em espalhamento eletromagnético só foram recentemente descobertas [55] e precisamente um século após a publicação do artigo de Mie [22]. Se os efeitos de interferência nas seções de choque diferenciais tivessem sido estudados naquela época, Lorenz ou Mie provavelmente teriam descoberto a ressonância que hoje leva o nome de Fano [62].

No espalhamento eletromagnético, as condições para a observação das ressonâncias de Fano foram apenas recentemente reportadas [65,66]. Ao contrário do que é geralmente esperado, as ressonâncias nas seções de choque de espalhamento não correspondem necessariamente a um aumento da intensidade do campo eletromagnético próximo [67]. Por analogia com a *física atômica* – onde é possível, em um sistema de três níveis, tornar “invisível” ao campo aplicado uma superposição coerente de dois estados acoplados a um terceiro [55], de forma que o sistema não absorve e nem emite fótons (EIT) –, as ressonâncias no campo próximo que aparecem como “pontos de escuridão” nas seções de choque *totais* são chamadas de “estados escuros” (*dark states*) [67,68]. Classicamente, tudo se passa como se, para frequências específicas de excitação, as partículas espalhadoras se comportassem como cavidades de Fabry-Pérot com alto fator de qualidade (isto é, alta capacidade de armazenar energia com baixas perdas eletromagnéticas). Essa característica é importante, por exemplo, para aplicações de nanopartículas no tratamento de câncer [69,70].

Para explicar o aumento de intensidade do campo interno fora da ressonância, Miroshnichenko [67] mostrou que as ressonâncias “escuras” em nanopartículas acontecem devido às ressonâncias de Fano nas seções de choque *diferenciais*. Ademais, é demonstrado que os *metamateriais* que apresentam refração negativa possuem “predisposição” a exibir ressonâncias de Fano [55]. Uma vez que os “estados escuros” são explicados em termos das ressonâncias de Fano, uma pergunta natural a que nos propomos responder nesta tese, dentre outras, seria verificar qual é o efeito da refração negativa nesses “estados escuros” no espalhamento simples.

Na última década, o desenvolvimento dos *metamateriais* abriu novas fronteiras nas áreas de fotônica e plasmônica [71], inaugurando uma área de pesquisa que vem sendo chamada de *ótica de transformação* [72]. Os metamateriais, *grosso modo*, são materiais *compósitos*⁵ que exibem propriedades ópticas não usuais, isto é, sem uma contraparte nos meios naturais, que podem ser exploradas, por exemplo, para induzir refração negativa [74], resolver imagens além do limite de difração [75],

⁵ Um material *compósito* deve ter pelo menos dois materiais constituintes, sendo cada um deles quimicamente inerte com relação aos outros materiais em suas vinhanças imediatas – restrição essa que exclui os materiais moleculares puros, contendo apenas dois ou mais tipos de átomos. Um metamaterial compósito, em geral, exibe características de resposta que não são observadas na natureza ou são aumentadas em relação às respostas individuais dos materiais constituintes [73].

apresentar magnetismo na região óptica do espectro eletromagnético [76, 77] e atuar como uma “capa de invisibilidade” eletromagnética [78, 79]. Assim como muitos aspectos fundamentais da *eletrodinâmica clássica*, a teoria do espalhamento eletromagnético tem sido revisada devido ao advento dos metamateriais [80–82]. Embora já existam estudos de como alguns materiais metálicos, presentes na composição de nanopartículas revestidas com polímeros, afetam os tais “estados escuros” [67], os efeitos das propriedades ópticas não usuais exibidas pelos metamateriais, no comportamento desses estados, permanecem pouco explorados até o momento [83].

Para o entendimento de como as ressonâncias internas (*região de campo próximo*) acoplam-se às ressonâncias nas seções de choque ópticas (*região de campo distante*), é de grande importância o cálculo de funcionais dos campos eletromagnéticos internos aos centros espalhadores, cujo exemplo trivial é a *densidade de energia eletromagnética*. De fato, a densidade de energia eletromagnética em meios dispersivos e absorptivos é uma grandeza física fundamental que encontra muitas aplicações em fotônica. Essa grandeza está diretamente relacionada, por exemplo, ao tempo de residência das ondas eletromagnéticas em um centro espalhador e ao seu correspondente fator de qualidade [84, 85], ambas grandezas mensuráveis relevantes para aplicações em *lasers* [85]. Em meios absorptivos, a densidade de energia eletromagnética foi primeiramente derivada para materiais dielétricos por Loudon [86], e então generalizada para meios compostos magnéticos por Ruppin [87].

Dentro desse contexto, o *objetivo geral* deste estudo é investigar o impacto dos metamateriais dispersivos [88], e da refração negativa em particular, no espalhamento eletromagnético por partículas esféricas e cilíndricas. Assim, mediante parâmetros de dispersão provenientes de *teorias de meios efetivos*, calculamos expressões analíticas para a energia eletromagnética armazenada em esferas e cilindros revestidos, esferas quírais e cilindros magneto-ópticos. Além de fornecer as ressonâncias dos campos internos associadas a um único centro espalhador, é possível obter, a partir da energia interna e das seções de choque, informações acerca do efeito de *retroespalhamento coerente* (ou localização fraca), que é o precursor da *localização de Anderson* no regime de espalhamento múltiplo em meios desordenados [16, 89, 90].

Esta tese está organizada da seguinte forma:

1. *Introdução e revisão da literatura.*

No Capítulo 2, apresentamos o básico da teoria clássica de espalhamento eletromagnético (simples) que ancora os resultados analíticos deste trabalho. Descrevemos de maneira resumida os sistemas que abordamos nos Capítulos seguintes e definimos as principais grandezas em teoria de espalhamento, quais sejam, as seções de choque. Em particular, o Capítulo 2 pode ser lido em conjunto com os Apêndices A.1 (equações de Maxwell), A.2 (condições de contorno), B.1 (ondas complexas), B.2 (ondas planas), C.1 (teorema de Poynting) e C.2 (densidade de energia), compondo, assim, uma pequena revisão de eletrodinâmica e teoria de espalhamento. Esses Apêndices, portanto, não oferecem nenhum resultado novo e são aqui incluídos a fim tornarem o texto o mais completo possível, fornecendo uma visão geral e coerente sobre eletrodinâmica clássica embasada em vários livros-textos de eletromagnetismo e teoria de espalhamento.

2. *Resultados analíticos e numéricos.*

Os Capítulos 3, 4 e 5 são reservados aos nossos resultados analíticos em espalhamento por esferas revestidas. No Capítulo 3, descrevemos a geometria de espalhamento de esferas concêntricas isoladas e apresentamos as seções de choque e coeficientes de Lorenz-Mie no caso magneto-dielétrico. O principal resultado desse Capítulo é o cálculo da energia eletromagnética no interior de esferas revestidas contendo metamateriais dispersivos (com índice de refração negativo), nas configurações de esfera de metamaterial revestida por um dielétrico e vice-versa. Os Capítulos em sequência abordam, na mesma geometria, as ressonâncias de Fano e *estados escuros* em esferas plasmônicas revestidas por um dielétrico (Capítulo 4), e esferas dielétricas revestidas por um metamaterial dispersivo no limite ferromagnético (Capítulo 5). Finalizamos nossos estudos em geometria esférica no Capítulo 6, onde calculamos a energia eletromagnética no interior de uma esfera de *metamaterial quiral* dispersiva, fazendo o vínculo das intensidades dos campos internos à seção de choque de absorção. Todos esses Capítulos em geometria esférica devem ser lidos, quando

necessário, em conjunto com o Apêndice D.1, onde calculamos explicitamente as componentes dos campos eletromagnéticos internos e espalhados.

A geometria cilíndrica é abordada nos Capítulos 7, 8 e 9. Os Capítulos 7 e 8 são reservados aos cilindros concêntricos contendo metamateriais dispersivos. Nessa geometria, usamos uma folha de *grafeno* crescida epitaxialmente em carbeto de silício (SiC). No Capítulo 7, calculamos analiticamente a energia eletromagnética armazenada em cilindros concêntricos sob incidência oblíqua de radiação, fazendo em seguida o vínculo dela com a eficiência de absorção para ângulos arbitrários de incidência. A velocidade de transporte de energia em um meio desordenado composto por cilindros paralelos é calculada na aproximação de baixa densidade e cilindros idênticos. Efeitos de absorção independente do ângulo de incidência e da polarização (*omnidirecionalidade*) em cilindros concêntricos são investigados no Capítulo 8. No Capítulo 9, finalizamos o estudo da geometria cilíndrica abordando o cálculo da energia armazenada em um cilindro magneto-óptico e seu vínculo com a *constante de Verdet* e eficiência de absorção. Todos esses Capítulos em geometria cilíndrica devem ser lidos em conjunto com o Apêndice D.2, onde calculamos as componentes dos campos eletromagnéticos internos e espalhados, bem como as condições de contorno dos coeficientes de Lorenz-Mie.

Para concluirmos os Capítulos de resultados da tese, apresentamos no Capítulo 10 o cálculo da energia armazenada em centros espalhadores de formatos arbitrários contendo inclusões. Esse Capítulo é uma síntese das geometrias esférica e cilíndrica de meios isotrópicos no que concerne ao cálculo da energia interna e seção de choque de absorção. Em especial, a partir de considerações simples, mostramos que é possível estimar-se a velocidade de transporte de energia, em um meio desordenado de baixa densidade de centros espalhadores, sem a necessidade de se recorrer à equação de Bethe-Salpeter.

3. Considerações finais.

Por fim, no Capítulo 11, fazemos um balanço de nossos principais resultados e das perspectivas de estudos que eles proporcionam em teoria de espalhamento simples e múltiplo.

Física do espalhamento eletromagnético

O espalhamento de ondas eletromagnéticas é um fenômeno ubíquo na natureza, manifestando-se em diferentes escalas, desde a sub-atômica até a macroscópica. Na abordagem ondulatória, o fenômeno de espalhamento está associado ao *grau de heterogeneidade* que um meio material possui em relação às *escalas naturais* de uma onda que se propaga nesse meio, a saber, o *comprimento de onda* (periodicidade espacial) e a *frequência de oscilação* (periodicidade temporal). Aqui, entendemos por “grau de heterogeneidade” ou “imperfeições” do meio material as variações abruptas, por exemplo, nas funções *dielétrica* (ε), *permeabilidade magnética* (μ) e/ou *condutividade* (σ), as quais são características macroscópicas da matéria. A teoria de espalhamento eletromagnético lida, *grosso modo*, com o problema de relacionar as propriedades geométricas e materiais dessas imperfeições (que podem ser o formato, tamanho e índice de refração de um centro espalhador) à distribuição angular de radiação espalhada⁶. Nesse sentido, não há espalhamento se o meio material é *homogêneo* e *isotrópico*, ou seja, livre de imperfeições. Embora haja distinções acerca das heterogeneidades presentes no meio material, a física subjacente ao fenômeno de espalhamento é a mesma para todos os sistemas físicos [1].

⁶ Há duas classes de problemas em teoria de espalhamento: o *problema direto*, assunto desta tese de doutorado, e o *problema inverso* [1,3]. O problema direto, em geral, é *bem-posto* (no sentido de Hadamard [91]) e pode ser enunciado da seguinte forma: conhecidas as propriedades ópticas de um centro espalhador e da onda incidente, determinam-se as características da onda espalhada. O problema inverso, ao contrário, é *mal-posto* e pode ser enunciado de forma complementar ou inversa: conhecidas a distribuição angular da onda espalhada e a onda incidente, estimam-se os parâmetros materiais do centro espalhador.

Neste estudo, adotamos o ponto de vista clássico sobre o espalhamento eletromagnético em *meios lineares*. Consideramos que os comprimentos de onda são muito maiores que as dimensões atômicas, e que as frequências típicas impingidas ao meio não são grandes o suficiente para provocarem transições eletrônicas *reais*. Dessa forma, tudo se passa como se os meios materiais fossem *contínuos*, caracterizados por parâmetros materiais bem definidos, e pudessem ser descritos a partir do comportamento de funções vetoriais macroscópicas. As relações de vínculo entre essas funções e os parâmetros materiais são dadas pelas *equações de Maxwell macroscópicas* em conjunto com as *relações constitutivas* (Apêndice A.1). Nessa abordagem clássica, de acordo com o modelo de *Drude-Lorentz* [1, 92], a onda espalhada é oriunda do comportamento coletivo dos elétrons da matéria, os quais, excitados pela radiação incidente, são levados a oscilar na mesma frequência de excitação, emitindo radiação em todas as direções. De fato, devido à interferência com o campo de dipolo induzido na matéria, a onda eletromagnética incidente (primária) é *extinta* em todos os pontos no interior do centro espalhador, sendo então substituída por uma *outra* onda eletromagnética (secundária) com uma velocidade (e, geralmente, com uma direção) diferente de propagação. Esse resultado é conhecido como *teorema da extinção*⁷ e foi estabelecido em meados do século XX por Ewald (para meios cristalinos) e por Oseen (para meios isotrópicos) [31].

Implícito no teorema da extinção está o fato de que parte da energia incidente, responsável pela excitação dos elétrons na matéria, pode ser convertida em outras formas de energia (calor, por exemplo) em um processo que denominamos *absorção*. Na *representação complexa* dos campos eletromagnéticos (Apêndice B.1), a absorção está associada à parte imaginária dos parâmetros materiais ε , μ e σ , também chamados de *grandezas constitutivas*. Um meio material com ε complexo, por exemplo, possuindo parte imaginária não nula, fornece um ganho de fase à onda eletromagnética quando comparado a um meio não absorvivo, isto é, com ε real. Essa adição de fase aos campos eletromagnéticos está relacionada, do ponto de vista termodinâmico, a um aumento de entropia no sistema [93]. De fato, embora façamos referência apenas ao fenômeno de espalhamento, o processo de absorção

⁷ O teorema da extinção de Ewald-Oseen pode ser aplicado para demonstrar as leis da óptica geométrica: as leis da refração e reflexão, as relações de Fresnel e, por conseguinte, a lei de Brewster (polarização por reflexão) [31].

eletromagnética, em geral, também está presente, sendo o vínculo entre as grandezas de propagação do campo (partes reais) e as de atenuação (partes imaginárias⁸) expresso pelas relações de *Kramers-Kronig* [1, 31, 93].

A seguir, fornecemos as características básicas dos campos eletromagnéticos que consideramos neste estudo, bem como os tipos de heterogeneidades do ponto de vista da geometria e dos parâmetros materiais. Convém enfatizarmos que a teoria não está restrita a uma faixa específica do espectro eletromagnético ou a um único tamanho de partícula; ela se aplica com igual validade a todos os comprimentos de onda (*não ionizantes*) e tamanhos de centros espalhadores (*macroscópicos*, isto é, acima da escala atômica). De fato, em vez de depender tão somente do tamanho do centro espalhador ou do comprimento de onda, o espalhamento depende da razão de uma dimensão característica da partícula espalhadora em relação ao comprimento de onda incidente. Esse fator natural de escala é chamado de *parâmetro de tamanho* e é expresso por $2\pi a/\lambda$, onde λ é o comprimento de onda incidente e a é um comprimento característico do centro espalhador (no caso de partículas esféricas, a é simplesmente o raio). Consequentemente, o espalhamento de ondas de radiofrequência por satélites artificiais na órbita terrestre, o espalhamento de micro-ondas por gotas de chuva e o espalhamento de luz por aerossóis na alta atmosfera são fenômenos bastante similares do ponto de vista teórico, uma vez que, em cada caso, λ é da mesma magnitude do tamanho do centro espalhador [1, 2]. Assim, em boa aproximação, a teoria que desenvolvemos aqui se aplica basicamente a três regimes de espalhamento: Rayleigh ($ka \ll 1$), Mie ($ka \approx 1$) e óptica geométrica ($ka \gg 1$), onde $k = 2\pi/\lambda$ é o número de onda.

2.1 Ondas planas harmônicas

A onda eletromagnética incidente ao centro espalhador, em todas as geometrias aqui tratadas, é dada pelo *ansatz* $[\mathbf{E}_i(\mathbf{r}, t), \mathbf{H}_i(\mathbf{r}, t)] = (\mathbf{E}_0, \mathbf{H}_0)e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega t)}$, onde $\mathbf{E}_0$ e $\mathbf{H}_0$ são, respectivamente, as amplitudes dos campos elétrico e magnético, e $i^2 = -1$. Essa onda propaga-se em um meio *não dispersivo* e *não absoritivo* (ε_0, μ_0),

⁸ A rigor, dependendo do sinal da parte imaginária, ela pode fornecer características de *emissão* em meios materiais com *ganho óptico* [94]. Tais materiais não serão aqui abordados.

que é geralmente assumido como sendo o espaço livre⁹. (No Apêndice B.2, discutimos em detalhes as características das ondas planas na representação complexa.) Em resumo, podemos enumerar as seguintes propriedades e considerações a respeito do campo incidente:

1. A onda eletromagnética é *plana* (ou seja, a fonte de radiação está muito distante da partícula espalhadora), onde $\mathbf{k}$ é um vetor de onda *real*, de forma que o lugar geométrico de $\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} = \text{constante}$ é a equação de um plano. A componente complexa de $\mathbf{k}$ surge da interação da onda incidente com um substrato dispersivo.
2. Consideramos uma onda *monocromática*, sendo ω sua frequência angular de oscilação. Como as equações de Maxwell são lineares, pode-se mostrar, via teoria de Fourier, que não há perda de generalidade na consideração de um campo harmônico. De fato, esse campo pode servir de “elemento de base” para a expansão de um campo com dependência temporal arbitrária (Apêndice B.1).
3. A polarização é *linear* ou *elíptica*, dependendo se a amplitude elétrica $\mathbf{E}_0$ é real ou complexa, respectivamente (Apêndice B.2). Em particular, na geometria esférica, um único estado linear de polarização é suficiente para que o espalhamento esteja resolvido para uma polarização elíptica arbitrária. Contudo, na geometria cilíndrica, necessitamos de uma “base” de polarização com dois elementos linearmente independentes: a polarização elétrica transversa (modo TE) e a magnética transversa (modo TM) em relação, por exemplo, ao eixo do cilindro [1, 2, 33].
4. As ondas são espalhadas *elasticamente*, o que significa que não há alteração da frequência angular ω (e, por conseguinte, do comprimento de onda λ) no processo. Essa é a categoria em que se encaixam os espalhamentos clássicos de Rayleigh e Lorenz-Mie. São excluídos deste trabalho, portanto: o espalhamento de Brillouin (que surge do deslocamento Doppler associado

⁹ Há uma distinção entre *vácuo* e *espaço livre*. Enquanto vácuo não contém massa, o espaço livre não contém massa e nem energia (exceto aquela associada aos campos eletromagnéticos sob análise). Contudo, em concordância com a teoria de campos eletromagnéticos clássicos, consideramos aqui que vácuo e espaço livre são sinônimos.

ao movimento das partículas do meio), o espalhamento Raman, fluorescência, espalhamento inelástico de raios X, efeito Compton e outras transições de natureza quântica [6].

2.2 Meios materiais

Exploramos aqui, tanto analítica quanto numericamente, sistemas de partículas em que os meios materiais envolvidos são *lineares*. Isso significa que os parâmetros materiais, expressos pelas grandezas constitutivas ε , μ e σ , não são funções dos campos vetoriais $\mathbf{E}$ (campo elétrico), $\mathbf{D}$ (deslocamento elétrico), $\mathbf{H}$ (campo magnético) e $\mathbf{B}$ (indução magnética). No entanto, esses parâmetros podem ser funções da posição (*meios heterogêneos*), da frequência incidente (*temporalmente dispersivos*) e da polarização dos campos incidentes (os parâmetros são necessariamente *tensores*, não podendo ser reescritos como um escalar multiplicando um tensor identidade) [95].

Basicamente, do ponto de vista da relação dos parâmetros materiais com os campos vetoriais (*relações constitutivas*), podemos dividir os materiais lineares em quatro categoriais distintas¹⁰, levando em conta os conceitos de *isotropia* e *anisotropia* do meio [96]:

1. Os *materiais isotrópicos* são aqueles em que $\mathbf{D}$ está relacionado a $\mathbf{E}$, $\mathbf{B}$ está relacionado a $\mathbf{H}$, e $\mathbf{J}$ está relacionada a $\mathbf{E}$, com a direção de campo alinhada em cada par.
2. Nos *materiais bi-isotrópicos* (tais como os *meios quirais*¹¹ ou *opticamente ativos*), os campos $\mathbf{D}$ e $\mathbf{B}$ dependem de ambos $\mathbf{E}$ e $\mathbf{H}$, mas sem que haja alinhamento com esses campos; por exemplo, $\mathbf{D}$ é uma combinação linear de $\mathbf{E}$ e $\mathbf{H}$. Dessa forma, o campo $\mathbf{D}$ pode mudar de direção em um meio quiral sem que as direções de $\mathbf{E}$ e $\mathbf{H}$ sejam alteradas. A depender dos parâmetros materiais, um meio quiral pode ser chamado de *circularmente dicroico*

¹⁰ Alguns autores, como Kong [95], consideram apenas três categorias, colocando os meios bi-isotrópicos como um caso particular de bianisotropia.

¹¹ O termo *quiral*, que vem do grego e quer dizer “mão”, é usado para descrever objetos que não são sobreponíveis à sua imagem especular.

(absorção dependente da polarização) e/ou *circularmente birrefringente* (apresenta rotação óptica) [1].

3. Nos *materiais anisotrópicos*, os pares de campos relacionados são os mesmos do caso isotrópico $[(\mathbf{D}, \mathbf{E}), (\mathbf{B}, \mathbf{H}) \text{ e } (\mathbf{J}, \mathbf{E})]$; todavia, os campos em cada par não estão geralmente alinhados. Nessa classe de materiais, encaixam-se os *meios girotrópicos* [27], responsáveis, por exemplo, pela *rotação Faraday* (no caso da transmissão) e o *efeito Kerr magneto-óptico* (no caso da reflexão).
4. Os *materiais bianisotrópicos* exibem o comportamento mais geral: $\mathbf{D}$ e $\mathbf{B}$ dependem de ambos $\mathbf{E}$ e $\mathbf{H}$ como no caso bi-isotrópico, com a diferença de que os parâmetros materiais são tensores (anisotropia).

A maioria dos sistemas abordados nesta tese possuem centros espalhadores constituídos de materiais *isotrópicos*, tanto na geometria esférica (Capítulos 3, 4 e 5) quanto na cilíndrica (Capítulos 7 e 8), ou mesmo em geometrias arbitrárias (Capítulo 10). As exceções ficam por conta de um centro espalhador esférico *bi-isotrópico* (Capítulo 6) e um centro espalhador cilíndrico *girotrópico* (Capítulo 9).

Uma vez escolhido o *ansatz* do campo incidente (Apêndice B.2), e também a geometria e composição do centro espalhador, podemos finalmente calcular as grandezas importantes do espalhamento no escopo da teoria eletromagnética. Nas Seções a seguir, discutimos os métodos de resolução das equações de Maxwell no espalhamento simples (nas geometrias esférica e cilíndrica) e as principais grandezas usadas para descrever a física do processo.

2.3 Solução das equações de Maxwell

Há diferentes métodos analíticos de se tratar a interação de uma onda eletromagnética com um centro espalhador isolado e com um alto grau de simetria [1, 2, 6, 9, 32]. Todos esses métodos, em princípio, partem das equações de Maxwell macroscópicas sujeitas a condições de contorno específicas (Apêndice A.2). No caso isotrópico, mediante transformações convenientes dos campos *vetoriais*, podemos desacoplar as contribuições elétricas e magnéticas em equações de ondas *vetoriais* e *escalares* – via transformações de calibre, por exemplo. Dentro da teoria de

Lorenz-Mie, duas abordagens analíticas se sobressaem: (i) expansão dos campos em harmônicos vetoriais na geometria do sistema [1, 2] ou (ii) decomposição dos campos em modos transversais elétricos (TE) e magnéticos (TM) via vetores de Hertz e potenciais de Hertz-Debye [6, 97].

2.3.1 Equação de Helmholtz escalar

Na teoria clássica de espalhamento eletromagnético, ambos os métodos analíticos (expansão em harmônicos ou potenciais de Hertz-Debye) levam, do ponto de vista físico-matemático, à resolução de uma *equação de onda escalar*. A vantagem de se utilizar os potenciais de Hertz-Debye, por exemplo, reside no fato de que tanto o desacoplamento dos campos elétrico e magnético quanto a equação de onda escalar são obtidos sem menção alguma à geometria dos centros espalhadores¹². Esse método, portanto, é um método geral de resolução e aplica-se a centros espalhadores com formatos arbitrários. Na abordagem dos harmônicos vetoriais, entretanto, é necessário impor *a priori* a geometria da expansão multipolar dos campos vetoriais. Isso é feito através de uma função escalar ψ , chamada *função escalar geratriz*, e um *vetor piloto*, os quais “calibram” a transformação dos campos eletromagnéticos para que a solução final esteja expandida em termos de ondas parciais esféricas ou cilíndricas.

No estudo que aqui desenvolvemos, lidamos com centros espalhadores *esféricos* ou *cilíndricos* interagindo com ondas planas monocromáticas. Adotamos o método da expansão em harmônicos vetoriais por nos parecer o método analítico mais natural para essas geometrias. Como não existe uma maneira única de se definir esses harmônicos¹³, escolhemos a notação e o formalismo comumente empregado em teoria clássica de espalhamento, que é o de *Bohren & Huffman* [1]. Por

¹² É possível combinar os potenciais vetor ($\mathbf{A}$) e escalar (Φ) para formar um único vetor $\mathbf{\Pi}$, chamado *vetor de Hertz*, a partir do qual todas as componentes do campo podem ser calculadas [4, 98]. Usando o *calibre de Lorentz* ($\nabla \cdot \mathbf{A} + \varepsilon\mu\partial\Phi/\partial t = 0$), definimos $\mathbf{A} = \varepsilon\mu\partial\mathbf{\Pi}/\partial t$ e $\Phi = -\nabla \cdot \mathbf{\Pi} = \pi$ (*potencial de Hertz-Debye*), onde $\mathbf{E} = -\nabla\pi - \partial\mathbf{A}/\partial t$ e $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$. Supondo que o meio seja homogêneo e isotrópico, obtemos $(\nabla^2 - \varepsilon\mu\partial^2/\partial t^2)(\mathbf{\Pi}_1, \mathbf{\Pi}_2) = -(\mathbf{P}/\varepsilon, \mathbf{M})$, onde $\mathbf{\Pi}_1$ e $\mathbf{\Pi}_2$ são, respectivamente, os vetores de Hertz elétrico (TM) e magnético (TE). Se não houver fontes no meio, o problema é reduzido à equação de onda escalar $(\nabla^2 - \varepsilon\mu\partial^2/\partial t^2)\pi = 0$ [6, 98].

¹³ No caso esférico, *Jackson* [92] e *Tsang et al.* [3], por exemplo, se utilizam de uma notação mais adequada à Mecânica Quântica, gerando os harmônicos vetoriais a partir da aplicação de um operador diferencial (de momento angular) sobre os harmônicos esféricos escalares $Y_{\ell m}(\theta, \phi)$.

exemplo, para ondas planas monocromáticas (com dependência temporal harmônica $e^{-i\omega t}$), propagando-se em um meio isotrópico, linear e homogêneo [com relações constitutivas $(\mathbf{D}, \mathbf{B}) = (\varepsilon \mathbf{E}, \mu \mathbf{H})$], obtemos, no domínio da frequência ω , as equações de Maxwell: $\nabla \cdot (\mathbf{E}, \mathbf{H}) = (0, 0)$ e $\nabla \times (\mathbf{E}, \mathbf{H}) = i\omega(\mu \mathbf{H}, -\varepsilon \mathbf{E})$ (Apêndice B.2). Note que esse conjunto de equações é equivalente à *equação de Helmholtz vetorial*: $[\nabla^2 + k^2](\mathbf{E}, \mathbf{H}) = (\mathbf{0}, \mathbf{0})$, onde $k^2 = -\mu\varepsilon\partial^2/\partial t^2 = \omega^2\mu\varepsilon$. O cálculo dos campos eletromagnéticos, portanto, se resume à resolução dessa equação diferencial vetorial, que é uma simplificação da equação de onda graças ao *ansatz* temporal que escolhemos.

Conforme a Ref. [1], definimos os *harmônicos vetoriais* $\mathbf{M} = \nabla \times (\mathbf{c}\psi)$ e $\mathbf{N} = \nabla \times \mathbf{M}/k$, onde o vetor piloto $\mathbf{c}$ é escolhido de acordo com a geometria. No caso da esfera, temos necessariamente $\mathbf{c} = \mathbf{r}$, que é o vetor radial no sistema de coordenadas esféricas (r, θ, ϕ) ; para um cilindro infinito de seção transversal circular, $\mathbf{c} = \hat{\mathbf{z}}$ é o versor no sistema de coordenadas cilíndricas (r, ϕ, z) . Note que $\nabla \cdot (\mathbf{M}, \mathbf{N}) = (0, 0)$, satisfazendo, portanto, as equações de Maxwell para divergência nula. Para que os harmônicos $(\mathbf{M}, \mathbf{N})$ sejam de fato uma transformação dos campos $(\mathbf{E}, \mathbf{H})$, a condição adicional que devemos impor é a de que eles satisfaçam as equações rotacionais de Maxwell – ou, de modo equivalente, satisfaçam à equação de Helmholtz vetorial. Assim, impondo que $(\mathbf{M}, \mathbf{N})$ sejam soluções da equação de Helmholtz vetorial, obtemos a condição

$$[\nabla^2 + k^2] \psi(\mathbf{r}) = 0, \quad (2.1)$$

que nada mais é que a *equação de Helmholtz escalar* [99, 100] em coordenadas esféricas ($\mathbf{c} = \mathbf{r}$) ou cilíndricas ($\mathbf{c} = \hat{\mathbf{z}}$).

2.3.2 Condições de contorno

A solução da equação de Helmholtz escalar é bem conhecida e pode ser obtida, por exemplo, usando o método de separação de variáveis, também chamado de *método de Fourier*. As soluções da Eq. (2.1) para os casos esférico e cilíndrico podem ser encontradas, de forma resumida, nos Apêndices D.1 e D.2, respectivamente, ou em maiores detalhes na Ref. [1]. Uma vez calculada a função ψ , pode-se escrever os campos eletromagnéticos como expansões dos harmônicos esféricos vetoriais

$(\mathbf{M}_n, \mathbf{N}_n)$, onde n é um número inteiro. Dessa forma, os campos $(\mathbf{E}, \mathbf{H})$ ficam expressos em termos de somatórios infinitos de ondas parciais esféricas ou cilíndricas, onde os coeficientes de Fourier dessas expansões são chamados de amplitudes de multipolo ou *coeficientes de Lorenz-Mie*. Esses coeficientes são obtidos a partir das condições de contorno na interface entre o centro espalhador e o meio externo circundante. Para meios livres de cargas e correntes, impomos que as componentes tangenciais dos campos eletromagnéticos $(\mathbf{E}, \mathbf{H})$ sejam contínuas na interface:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{E}_{\text{incidente}} + \mathbf{E}_{\text{espalhado}} \\ \mathbf{H}_{\text{incidente}} + \mathbf{H}_{\text{espalhado}} \end{pmatrix} \times \hat{\mathbf{r}} = \begin{pmatrix} \mathbf{E}_{\text{interior}} \\ \mathbf{H}_{\text{interior}} \end{pmatrix} \times \hat{\mathbf{r}}, \quad (2.2)$$

onde $\hat{\mathbf{r}}$ é um versor normal à superfície de separação entre os meios interior e exterior aos centros espalhadores esférico ou cilíndrico (continuidade das componentes tangenciais).

Determinados os campos eletromagnéticos internos e espalhados por uma partícula isolada – agora expressos em termos de harmônicos vetoriais –, podemos então calcular as grandezas mensuráveis da teoria. Além disso, para o caso de espalhamento independente, a solução de uma partícula isolada pode ser generalizada para uma coleção de centros espalhadores distribuídos aleatória e uniformemente no meio material [2]. A única condição que se impõe é a de que o meio material tenha baixa densidade de centros espalhadores, a fim de garantir a independência dos campos espalhados. Em todos os casos, entretanto, nos experimentos feitos em laboratório, não temos acesso direto aos campos vetoriais eletromagnéticos, mas sim a grandezas escalares que os descrevem de forma equivalente. Na Seção a seguir, ainda que de modo heurístico e genérico, calculamos as principais grandezas escalares do espalhamento. Nosso intuito é apenas introduzi-las para que, ao longo dos próximos Capítulos, o conceito por trás dessas grandezas já esteja sedimentado, o que nos permitirá discutir tão somente nossos resultados analíticos.

2.4 Seções de choque

Uma das grandezas mensuráveis mais importantes das ondas eletromagnéticas é a *intensidade* I , que é aqui definida como fluxo de energia (potência) por unidade de área (Apêndice. B.2). Além dessa grandeza, para se caracterizar uma onda eletromagnética, é necessário também o conhecimento da *polarização* e da *fase* da onda. Nesse pequeno resumo, desconsideramos a fase e a polarização, que podem ser calculadas, por exemplo, via parâmetros de Stokes¹⁴. Nossa finalidade nesta Seção é apenas introduzir alguns conceitos relevantes para o desenvolvimento desta tese de doutorado. Em particular, mostramos como as grandezas de um único espalhamento podem ser usadas para estimar parâmetros importantes do espalhamento por uma coleção de partículas.

2.4.1 Conservação de energia

Seja $\mathbf{E}_i = E_0 e^{i(kz - \omega t)} \hat{\mathbf{x}}$ uma onda plana propagando-se no meio (ε_0, μ_0) na direção z e que é incidente a uma partícula arbitrária, de *raio efetivo* a , localizada na origem do sistema de coordenadas retangulares (x, y, z) , Fig. 2.1. A onda espalhada $\mathbf{E}_s$ nas proximidades da partícula, isto é, a uma distância $r \leq 4a^2/\lambda$, onde o limite superior é chamado de *distância de Fraunhofer* [31], tem amplitude e variações de fase complicadas por causa da interferência entre contribuições de diferentes partes da partícula (região de *campo próximo*). No entanto, para uma distância $r \gg 4a^2/\lambda$ (região de *campo distante*), o campo espalhado se comporta como uma *onda esférica* [1, 9], sendo expresso por

$$\mathbf{E}_s = E_0 \mathbf{f}(\theta, \phi) \frac{e^{i(kr - \omega t)}}{ikr}, \quad (2.3)$$

onde $\mathbf{f}(\theta, \phi)$ é a função amplitude de espalhamento, que leva em conta não apenas a amplitude, mas também a *fase* e a *polarização* da onda espalhada no campo distante

¹⁴ A dependência entre as intensidades e os estados de polarização das ondas espalhada e incidente é dada pela equação matricial $(I, Q, U, V)^T = [\mathbf{F}](I_0, Q_0, U_0, V_0)^T / (kr)^2$, onde $[\mathbf{F}]$ é uma matriz real 4×4 (*matriz de Mueller*), e I, Q, U e V são as intensidades de Stokes. Dada uma onda incidente $\mathbf{E}_i = \mathbf{E}_0 e^{i(kz - \omega t)}$, onde $\mathbf{E}_0 = E_{||} \hat{\mathbf{e}}_{||} + E_{\perp} \hat{\mathbf{e}}_{\perp}$, sendo $\{\hat{\mathbf{e}}_{||}, \hat{\mathbf{e}}_{\perp}\}$ uma base ortonormal, são definidas as intensidades: $I_0 = |E_{||}|^2 + |E_{\perp}|^2$, $Q_0 = |E_{||}|^2 - |E_{\perp}|^2$, $U_0 = E_{||} E_{\perp}^* + E_{\perp} E_{||}^*$ e $V_0 = i(E_{||} E_{\perp}^* - E_{\perp} E_{||}^*)$. Ondas completamente polarizadas satisfazem a relação $I^2 = Q^2 + U^2 + V^2$ (*esfera de Poincaré*) [95].

Figura 2.1 – Onda plana incidente $(\mathbf{E}_i, \mathbf{H}_i)$ na direção $\hat{\mathbf{z}}$ interagindo com uma partícula arbitrária e sendo espalhada na direção $\hat{\mathbf{r}}$, onde $(\mathbf{E}_s, \mathbf{H}_s)$ é o campo espalhado. O ângulo θ entre o eixo z e $\hat{\mathbf{r}}$ é chamado de *ângulo de espalhamento*.

no sistema de coordenadas esféricas (r, θ, ϕ) . A maneira como $\mathbf{f}(\theta, \phi)$ depende da forma e do tamanho da partícula espalhadora é um dos assuntos principais nos livros clássicos de teoria de espalhamento [1, 2, 6]. Nos Capítulos a seguir, embora não façamos referência direta à função amplitude de espalhamento, deve ficar implícito que as ressonâncias de espalhamento nos coeficientes das expansões em harmônicos vetoriais $(\mathbf{M}_n, \mathbf{N}_n)$ – os coeficientes de Lorenz-Mie – são, na verdade, ressonâncias da função $\mathbf{f}(\theta, \phi)$.

Por construção, note que θ é o *ângulo de espalhamento*, isto é, é o ângulo formado entre as direções de incidência ($\hat{\mathbf{z}}$) e de espalhamento ($\hat{\mathbf{r}}$), como pode ser confirmado na Fig. 2.1. Sendo a intensidade $I \propto |\mathbf{E}|^2$, podemos escrever que

$$I(\theta, \phi) = I_0 \frac{|\mathbf{f}(\theta, \phi)|^2}{(kr)^2}, \quad (2.4)$$

onde $I(\theta, \phi)$ e I_0 são, respectivamente, as intensidades das ondas incidente e espalhada. Como $\mathbf{f}(\theta, \phi)$ é uma função vetorial adimensional, resulta que

$|\mathbf{f}(\theta, \phi)|^2/k^2$ tem dimensões de área. Por definição, sendo a potência espalhada no ângulo sólido $d\Omega = \sin\theta d\theta d\phi$ proporcional a $I(\theta, \phi)r^2$, segue da Eq. (2.4) que a energia total espalhada em todas as direções é igual a energia da onda incidente que atinge a área σ_{sca} , a qual recebe o nome de *seção de choque (integrada) de espalhamento*:

$$\sigma_{\text{sca}} = \frac{1}{k^2} \int_{-1}^1 d(\cos\theta) \int_0^{2\pi} d\phi |\mathbf{f}(\theta, \phi)|^2. \quad (2.5)$$

A seção de choque diferencial de espalhamento, portanto, nada mais é que a potência espalhada no ângulo sólido dividida pela intensidade do campo incidente: $d\sigma_{\text{sca}}/d\Omega = |\mathbf{f}(\theta, \phi)|^2/k^2$. Logo, podemos calcular as seções de choque diferenciais de retroespalhamento (radar) (*back*, a 180°) e de espalhamento para frente (*forward*, a 0°), respectivamente:

$$\sigma_{\text{back}} = \frac{1}{k^2} |\mathbf{f}(\theta = 180^\circ)|^2, \quad (2.6)$$

$$\sigma_{\text{forward}} = \frac{1}{k^2} |\mathbf{f}(\theta = 0^\circ)|^2. \quad (2.7)$$

Sem entrarmos em muitos detalhes, através do *teorema óptico* [1], calculamos a *seção de choque de extinção* σ_{ext} (também chamada de *seção de choque total*) a partir da amplitude de espalhamento¹⁵ para frente ($\theta = 0^\circ$):

$$\sigma_{\text{ext}} = \frac{4\pi}{k^2} |\text{Re}[\mathbf{f}(\theta = 0^\circ)]|. \quad (2.8)$$

A seção de choque de extinção surge do fato de que a radiação do feixe incidente ($\theta = 0^\circ$) é reduzida pela presença da partícula em um processo de *interferência* com o campo espalhado para frente [2]. A partir de σ_{sca} e σ_{ext} , podemos definir a fração relativa de espalhamento eletromagnético, chamada de *albedo*: $\tilde{a} = \sigma_{\text{sca}}/\sigma_{\text{ext}}$.

Finalmente, por conservação de energia dos campos eletromagnéticos, definimos a *seção de choque de absorção*:

$$\sigma_{\text{abs}} = \sigma_{\text{ext}} - \sigma_{\text{sca}}. \quad (2.9)$$

Como mostraremos ao longo deste trabalho, σ_{abs} pode ser calculada *diretamente* em termos da energia armazenada no interior do centro espalhador. De fato, podemos definir σ_{abs} como sendo a razão da potência total dissipada no centro espalhador dividida pela intensidade do campo incidente (Apêndice C.2) [9].

¹⁵ Devido à definição na Eq. (2.3), note que devemos calcular $\text{Im}[-i\mathbf{f}(0^\circ)] = \text{Re}[\mathbf{f}(0^\circ)]$.

2.4.2 Conservação de *momentum*

De acordo com a teoria de Maxwell, as ondas eletromagnéticas carregam não apenas energia, mas também *momentum* linear¹⁶: energia/ c = momentum, onde c é a velocidade da luz. No espalhamento simples, a componente importante do *momentum* encontra-se na mesma direção de propagação da onda incidente. Assim, o *momentum* removido do feixe original na direção para frente é proporcional à seção de choque de extinção σ_{ext} , a qual representa a interação da partícula com o feixe. Da seção de choque de extinção, temos que σ_{abs} é perdida na interação via absorção e apenas parte de σ_{sca} é reposta na direção para frente, sendo proporcional a $I_0 \cos \theta$ em todas as direções.

A equação de conservação do *momentum*, portanto, deve levar em conta a componente para frente da seção de choque de espalhamento. Para calcularmos a média do $\cos \theta$ em todas as direções, precisamos antes definir uma função de ponderação do espalhamento em uma dada direção, chamada de *função de fase*: $p(\theta, \phi) \equiv |\mathbf{f}(\theta, \phi)|^2 / (k^2 \sigma_{\text{sca}})$. Essa função, definida a partir da Eq. (2.5), é comumente usada na teoria de transferência radiativa [9] e não possui relação alguma com a fase da onda¹⁷. Ela é uma função adimensional e sua integral em todas as direções é igual a 1. Em outras palavras, podemos calcular a média ponderada de $\cos \theta$ em todas as direções, a qual é chamada de *parâmetro de assimetria*¹⁸:

$$\langle \cos \theta \rangle = \int_{-1}^1 d(\cos \theta) \int_0^{2\pi} d\phi p(\theta, \phi) \cos \theta . \quad (2.10)$$

Finalmente, em termos de seções de choque, a parcela de *momentum* linear que é removida do feixe na direção para frente é proporcional a

$$\sigma_{\text{pr}} = \sigma_{\text{ext}} - \langle \cos \theta \rangle \sigma_{\text{sca}} , \quad (2.11)$$

onde σ_{pr} é a *seção de choque de pressão de radiação* [1,2,26]. Em particular, a *força de radiação* exercida pelo feixe incidente na partícula é dada por $F = I_0 \sigma_{\text{pr}} / c$.

¹⁶ As relações para a conservação do *momentum* angular em termos de seções de choque dependem da polarização da onda incidente [101] e fogem do escopo de nossa análise.

¹⁷ O nome “função de fase” tem sua origem na astronomia, onde ele se refere às fases lunares.

¹⁸ Na aproximação dipolar de partículas magnéticas [18], tem-se: $2\langle \cos \theta \rangle = (\sigma_{\text{forward}} - \sigma_{\text{back}}) / (\sigma_{\text{forward}} + \sigma_{\text{back}})$ [102]. Se o espalhamento é isotrópico (Rayleigh), segue: $\langle \cos \theta \rangle = 0$.

2.4.3 Coeficiente de difusão

A partir das grandezas escalares associadas à conservação da energia e à conservação do *momentum* linear em um único espalhamento, é possível calcular parâmetros importantes do espalhamento por uma coleção de partículas (*espalhamento múltiplo*). De fato, a propagação de ondas em meios desordenados é parametrizada, no aspecto escalar, somente por uma grandeza, qual seja, o coeficiente de difusão ($\mathcal{D}$). Para ondas eletromagnéticas, o coeficiente de difusão depende apenas do livre caminho médio de transporte (ℓ^*), da velocidade de transporte de energia (v_E) e da dimensionalidade do sistema (d), os quais são grandezas que podem ser estimadas de um único centro espalhador isolado via teoria de Lorenz-Mie, por exemplo. Explicitamente [89],

$$\mathcal{D} = \frac{v_E \ell^*}{d} , \quad (2.12)$$

de modo que, quando $\mathcal{D}$ diminui, tanto ℓ^* quanto v_E , ou ambos, podem ser a causa do fenômeno¹⁹.

O livre caminho médio de transporte pode ser entendido como a distância média que uma onda plana pode penetrar em um meio espalhador antes de perder sua coerência de fase [16, 103]. Essa grandeza pode ser expressa em termos do livre caminho médio de colisão elástica (ℓ) da “partícula” (difusão clássica) e do parâmetro de assimetria, Eq. (2.10), relacionado a um único centro espalhador:

$$\ell^* = \frac{\ell}{1 - \langle \cos \theta \rangle} . \quad (2.13)$$

Classicamente, o livre caminho médio de colisão elástica é definido como sendo $\ell = 1/(\rho\sigma_{\text{ext}})$, onde ρ é a densidade de centros espalhadores e σ_{ext} é a seção de choque extinção de um único centro espalhador para $\sigma_{\text{abs}} = 0$. No caso *absortivo*, temos a definição geral [9]: $\ell^* = 1/(\rho\sigma_{\text{pr}})$, onde σ_{pr} , definida na Eq. (2.11), é também chamada de *seção de choque de transporte*.

¹⁹ Um efeito que emerge do espalhamento múltiplo de ondas em um meio desordenado, dotado de imperfeições locais e *suficientemente* densas, é o *retroespalhamento coerente* [16, 103]. A preservação da coerência de fase apenas na direção de retroespalhamento significa um aumento na probabilidade de retroespalhamento através de *interferências construtivas*. Isso leva a um decréscimo de $\mathcal{D}$ em relação ao seu valor esperado na teoria clássica de difusão, a qual inclui o movimento browniano. A diminuição de $\mathcal{D}$ em virtude do retroespalhamento coerente está vinculada ao que hoje se denomina *localização fraca da luz* [19, 104], a qual é precursora da *localização de Anderson* [16].

A velocidade de transporte de energia (v_E) é uma grandeza associada à velocidade média com que a energia eletromagnética da onda é transportada localmente²⁰. Na aproximação de baixa densidade (*fraca desordem*) da equação de Bethe-Salpeter²¹, temos [89]

$$v_E \approx \frac{c}{1 + f_{\text{pack}}(W/W_0 - 1)} , \quad (2.14)$$

onde $c = 1/\sqrt{\varepsilon_0\mu_0}$ é a velocidade de propagação da onda no meio circundante, W/W_0 é o fator de aumento da energia eletromagnética média armazenada no interior do centro espalhador em relação ao espaço livre [106] e f_{pack} é a fração volumétrica de centros espalhadores no meio (*packing fraction*). Para um meio material com índice de refração complexo, $m = m' + im''$, no regime de fraca absorção ($m' \gg m''$), podemos escrever [107] $W/W_0 \approx m'\sigma_{\text{abs}}/(2kVm'')$, onde V é o volume da partícula e σ_{abs} é a seção de choque de absorção associada. Nos Capítulos por vir, mostraremos que existe uma relação analítica *exata* entre W/W_0 e σ_{abs} , a qual nos servirá, dentre outras aplicações, como um meio de confirmar a consistência dos cálculos analíticos de W/W_0 e fazer o vínculo das ressonâncias no campo próximo (energia interna) com as ressonâncias de espalhamento no campo distante (seções de choque).

²⁰ Na ausência de espalhamento forte, isto é, quando o livre caminho médio de colisão é pequeno comparado ao comprimento de onda $\lambda = 2\pi/k$, especialmente no espalhamento ressonante, a velocidade de transporte pode ser muito menor do que a velocidade de fase no espaço livre [$v_p = \omega(k)/k$] para ondas clássicas, mas ela é sempre idêntica à velocidade de grupo [$v_g = \partial\omega(k)/\partial k$] para funções de onda associadas a elétrons livres [89]. Esta diferença marcante entre ondas clássicas e quânticas tem origem nas diferentes relações de dispersão [$\omega(k)$] para os dois tipos de ondas e na maneira pela qual a aleatoriedade é introduzida nos dois tipos de equações de onda [16].

²¹ A equação de Bethe-Salpeter é uma das ferramentas comumente usadas no problema de dois corpos relativísticos em teoria quântica de campos e, devido à sua generalidade, possui aplicações em diversos ramos da física teórica [90]. Maiores detalhes podem ser encontrados, *e.g.*, na Ref. [105].

Esferas com uma camada de revestimento

O espalhamento eletromagnético por partículas esféricas com múltiplas camadas – dentre as quais podemos incluir a *esfera homogênea* de Lorenz-Mie como um caso particular de “camada zero” –, não é um problema novo em eletrodinâmica e já foi tratado exhaustivamente [1]. Todavia, até recentemente (ou antes do advento dos metamateriais nos anos 2000), o foco da maioria dos trabalhos voltava-se essencialmente para o *campo eletromagnético espalhado* e, a partir dele, conclusões acerca dos campos internos à partícula espalhadora eram auferidas.

A novidade em nosso trabalho é dar destaque especial aos *campos eletromagnéticos internos* e, via condições de contorno, deduzir o comportamento dos campos eletromagnéticos espalhados. Tal abordagem é de bastante relevância em situações nas quais o centro espalhador é composto por mais de um material, uma vez que nas ressonâncias de espalhamento, analisadas via seções de choque, obtemos um comportamento (médio) *efetivo* do centro espalhador. Em outras palavras, não é possível identificar-se facilmente de que estrutura ou material provêm as ressonâncias de espalhamento sem antes analisar em separado cada material que compõe o centro espalhador. Pela teoria, essas informações podem ser obtidas diretamente dos campos eletromagnéticos no interior de cada estrutura que compõe a partícula ou, mais precisamente, de funcionais que dependam desses campos, como a *densidade de energia eletromagnética*.

Neste Capítulo, usando a teoria de Lorenz-Mie, determinamos uma expressão *analítica* exata para a média temporal da energia eletromagnética no interior de

esferas revestidas, fornecendo um funcional energia tanto para o “caroço” quanto para a “casca” esférica *separadamente*²². Ambos os materiais do “caroço” e da camada esférica são considerados dispersivos e absorptivos, o que nos permite aplicar os resultados analíticos a situações de bastante interesse tecnológico, como no caso de *metamateriais isotrópicos* que apresentam *refração negativa* [81]. Assim, calculamos *numericamente* a energia interna para duas situações particulares envolvendo um esfera revestida contendo um metamaterial dispersivo: uma camada dielétrica e um caroço dispersivo, e vice-versa. Em especial, uma relação analítica *exata* entre a energia armazenada e a eficiência de absorção óptica é obtida, demonstrando, portanto, que a energia interna possui vínculos com *grandezas mensuráveis*. Mostramos ainda que a energia eletromagnética armazenada é um observável sensível a interferências dos modos dos campos eletromagnéticos internos – interferências essas, como discutiremos nos Capítulos a seguir, que levam a ressonâncias assimétricas nas seções de choque associadas ao efeito Fano.

3.1 Eficiências de Aden-Kerker para esferas concêntricas

Na teoria de espalhamento eletromagnético, a solução de Aden e Kerker [109] é uma generalização da solução de Lorenz-Mie [1]. Ela considera a interação entre uma onda eletromagnética plana, dada pelo *ansatz* $[\mathbf{E}(\mathbf{r}), \mathbf{H}(\mathbf{r})]e^{-i\omega t}$, onde ω é a frequência angular, e duas esferas concêntricas com raios interno e externo a e b , respectivamente. Como na teoria de Lorenz-Mie, todos os meios materiais envolvidos são tomados como sendo *lineares*, *homogêneos* e *isotrópicos*, de maneira que as propriedades ópticas de cada meio são definidas por apenas dois parâmetros, quais sejam, a permissividade elétrica e a permeabilidade magnética *escalares*, representadas, respectivamente, pelos pares ordenados: (ε_1, μ_1) para a esfera interior ou “caroço” ($0 \leq r \leq a$); (ε_2, μ_2) para a camada esférica envoltória ou “casca” ($a \leq r \leq b$); e (ε_0, μ_0) para o meio exterior ($r \geq b$), supondo como sendo o vácuo ou um dielétrico transparente arbitrário. A geometria desse sistema está ilustrada na

²² Os principais resultados deste Capítulo encontram-se, em grande parte, publicados no *Journal of Optics* (2012) sob o título: “*Electromagnetic energy within coated spheres containing dispersive metamaterials*” [108].

Fig. 3.1.

Figura 3.1 – Geometria do sistema: ondas planas na direção z interagindo com uma esfera (ε_1, μ_1) de raio a revestida por uma camada esférica (ε_2, μ_2) de espessura $(b - a)$.

Resolvendo-se as equações de Maxwell macroscópicas para essa geometria, obtemos os campos eletromagnéticos em cada uma das três regiões delimitadas. Um dos métodos usados para a resolução desse problema de espalhamento, e que envolve a expansão dos campos em *harmônicos esféricos vetoriais*, é discutido na Seção 2.1 e pode ser encontrado em detalhes na Ref. [1]. Aqui, apenas apresentamos a teoria e os coeficientes dos campos espalhados que calculamos para o caso *magnético*. A ideia é apresentar as principais grandezas calculadas via campos eletromagnéticos espalhados (seções de choque) e, em sequência, calcularmos a energia armazenada no interior das esferas concêntricas.

Assim como no espalhamento de Lorenz-Mie, as propriedades do

espalhamento eletromagnético de Aden-Kerker são geralmente analisadas mediante as seções de choque ou *eficiências* ópticas. As eficiências do espalhamento eletromagnético são definidas como as respectivas seções de choque, calculadas de acordo com a Seção 2.4, divididas pela seção de choque geométrica σ_g , que nada mais é que a área da seção transversal à partícula espalhadora vista pelo feixe de ondas incidente. Assim, empregando-se a mesma notação da Ref. [1], as eficiências de extinção ($Q_{\text{ext}} \equiv \sigma_{\text{ext}}/\sigma_g$), de espalhamento ($Q_{\text{sca}} \equiv \sigma_{\text{sca}}/\sigma_g$) e de absorção ($Q_{\text{abs}} \equiv \sigma_{\text{abs}}/\sigma_g$), que são calculadas pelas respectivas seções de choque em unidades de $\sigma_g = \pi b^2$, são definidas pelas expressões:

$$Q_{\text{ext}} = \frac{2}{y^2} \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1) \text{Re}(a_n + b_n) , \quad (3.1)$$

$$Q_{\text{sca}} = \frac{2}{y^2} \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1) (|a_n|^2 + |b_n|^2) , \quad (3.2)$$

$$Q_{\text{abs}} = Q_{\text{ext}} - Q_{\text{sca}} , \quad (3.3)$$

onde $y = kb$ é o parâmetro de tamanho da esfera exterior, sendo $k = \omega\sqrt{\varepsilon_0\mu_0}$ o número de onda incidente. Todos esses fatores de eficiência denotam *propriedades médias* de espalhamento tomadas em todas as direções e polarizações possíveis, como discutimos na Seção 2.4. Em particular, as eficiências para as seções de choque (*diferenciais*) de retroespalhamento ($Q_{\text{back}} \equiv \sigma_{\text{back}}/\sigma_g$) e espalhamento para frente ($Q_{\text{forward}} \equiv \sigma_{\text{forward}}/\sigma_g$) são, respectivamente [1]:

$$Q_{\text{back}} = \frac{1}{y^2} \left| \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n (2n+1) (a_n - b_n) \right|^2 . \quad (3.4)$$

$$Q_{\text{forward}} = \frac{1}{y^2} \left| \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1) (a_n + b_n) \right|^2 . \quad (3.5)$$

Em todas as expressões acima, os coeficientes de Fourier a_n e b_n dos campos espalhados²³ (Apêndice D.1.1.1), que chamaremos de *coeficientes de Aden-Kerker*

²³ Os coeficientes a_n e b_n estão relacionados, respectivamente, aos modos transversos magnéticos (TM ou $H_r = 0$) e elétricos (TE ou $E_r = 0$) em relação à componente radial. No limite de Rayleigh, esses coeficientes podem ser identificados com as amplitudes de multipolos elétricos e magnéticos, respectivamente [9].

para diferenciarmos do caso homogêneo (Lorenz-Mie), são [108]:

$$a_n = \frac{\tilde{m}_2 \psi'_n(y) [\psi_n(m_2 y) - A_n \chi_n(m_2 y)] - \psi_n(y) [\psi'_n(m_2 y) - A_n \chi'_n(m_2 y)]}{\tilde{m}_2 \xi'_n(y) [\psi_n(m_2 y) - A_n \chi_n(m_2 y)] - \xi_n(y) [\psi'_n(m_2 y) - A_n \chi'_n(m_2 y)]}, \quad (3.6)$$

$$b_n = \frac{\psi'_n(y) [\psi_n(m_2 y) - B_n \chi_n(m_2 y)] - \tilde{m}_2 \psi_n(y) [\psi'_n(m_2 y) - B_n \chi'_n(m_2 y)]}{\xi'_n(y) [\psi_n(m_2 y) - B_n \chi_n(m_2 y)] - \tilde{m}_2 \xi_n(y) [\psi'_n(m_2 y) - B_n \chi'_n(m_2 y)]}, \quad (3.7)$$

sendo as funções auxiliares

$$A_n = \frac{\tilde{m}_2 \psi_n(m_2 x) \psi'_n(m_1 x) - \tilde{m}_1 \psi'_n(m_2 x) \psi_n(m_1 x)}{\tilde{m}_2 \chi_n(m_2 x) \psi'_n(m_1 x) - \tilde{m}_1 \chi'_n(m_2 x) \psi_n(m_1 x)},$$

$$B_n = \frac{\tilde{m}_2 \psi'_n(m_2 x) \psi_n(m_1 x) - \tilde{m}_1 \psi_n(m_2 x) \psi'_n(m_1 x)}{\tilde{m}_2 \chi'_n(m_2 x) \psi_n(m_1 x) - \tilde{m}_1 \chi_n(m_2 x) \psi'_n(m_1 x)},$$

onde $x = ka$ é o parâmetro de tamanho relacionado à esfera interior. Os índices de refração e impedância relativos são, respectivamente, $m_q = k_q/k = \sqrt{\varepsilon_q \mu_q / (\varepsilon_0 \mu_0)}$ e $\tilde{m}_q = \mu_0 m_q / \mu_q = \sqrt{\varepsilon_q \mu_0 / (\varepsilon_0 \mu_q)}$ [18, 19, 110], onde $q = 1$ faz referência ao “caroço” e $q = 2$, à “casca”. As funções $\psi_n(\rho) = \rho j_n(\rho)$, $\chi_n(\rho) = -\rho y_n(\rho)$ e $\xi_n(\rho) = \psi_n(\rho) - \imath \chi_n(\rho)$ são as funções de Riccati-Bessel, Riccati-Neumann e Riccati-Hankel, respectivamente, onde j_n é a função esférica de Bessel e y_n é a função esférica de Neumann [99]. Aqui, as *plicas* (') nas funções especiais indicam derivação com relação ao argumento – *e.g.*, $\psi'_n(\rho) = d\psi_n(\rho)/d\rho$. Os coeficientes a_n (elétrico) e b_n (magnético) de Lorenz-Mie são recuperados trivialmente quando $A_n = B_n = 0$ [isto é, nas situações-limites em que $a/b \rightarrow 0$ ou $(\varepsilon_1, \mu_1) \rightarrow (\varepsilon_2, \mu_2)$] ou quando $a/b \rightarrow 1$ [1, 2, 6].

3.2 Energia eletromagnética interna

A densidade de energia eletromagnética $u(\mathbf{r}, t)$ dentro de um certo volume V é definida como a diferença entre a potência fornecida pela fonte ao volume e a potência fluindo no contorno, dada pelo vetor de Poynting (Apêndice C.1). Em outras palavras, é uma grandeza que expressa o quanto de energia é armazenada em um certo volume do espaço, em um certo instante de tempo. Seguindo a geometria esférica, considere um campo eletromagnético harmônico $[\mathbf{E}_q(\mathbf{r}), \mathbf{H}_q(\mathbf{r})]e^{-i\omega t}$ confinado a uma região do espaço homogênea e isotrópica que é restrita a uma casca esférica ($l_1 \leq r \leq l_2$), possuindo parâmetros materiais complexos: $\varepsilon_q = \varepsilon'_q + \imath \varepsilon''_q$ e $\mu_q = \mu'_q + \imath \mu''_q$. A média temporal da densidade de

energia eletromagnética nessa região do espaço é

$$\langle u_q \rangle_t(\mathbf{r}) = \frac{1}{4} [\varepsilon_q^{(\text{eff})} |\mathbf{E}_q(\mathbf{r})|^2 + \mu_q^{(\text{eff})} |\mathbf{H}_q(\mathbf{r})|^2] , \quad (3.8)$$

sendo $\varepsilon_q^{(\text{eff})}$ e $\mu_q^{(\text{eff})}$ os coeficientes efetivos de energia elétrica e magnética, respectivamente [111]. Em particular, para meios dispersivos e fracamente absorptivos [$\varepsilon'_q(\omega) \gg \varepsilon''_q(\omega)$, $\mu'_q(\omega) \gg \mu''_q(\omega)$], conforme *Landau et al.* [93], temos os coeficientes (positivos definidos):

$$\varepsilon_q^{(\text{eff})}(\omega) = \frac{\partial [\omega \varepsilon'_q(\omega)]}{\partial \omega} > 0 , \quad (3.9)$$

$$\mu_q^{(\text{eff})}(\omega) = \frac{\partial [\omega \mu'_q(\omega)]}{\partial \omega} > 0 . \quad (3.10)$$

Se o meio material (ε_q, μ_q) é não dispersivo e fracamente absorptivo, prontamente obtemos $\varepsilon_q^{(\text{eff})} = \varepsilon'_q$ e $\mu_q^{(\text{eff})} = \mu'_q$ das Eqs. (3.9) e (3.10), respectivamente. Para garantir a positividade da densidade de energia eletromagnética, portanto, essa última consideração impõe que materiais com ambos $\varepsilon'_q < 0$ e $\mu'_q < 0$ sejam *necessariamente* dispersivos. Para materiais dispersivos e *altamente absorptivos*, os coeficientes $[\varepsilon_q^{(\text{eff})}, \mu_q^{(\text{eff})}]$ que entram na Eq. (3.8) não podem ser calculados usando as Eqs. (3.9) e (3.10). Como discutiremos a seguir, esses coeficientes dependem da abordagem em *teoria de meios efetivos*²⁴ e do modelo usado para descrever as relações de dispersão do material [86, 87, 111]. Porém, independente da relação de dispersão do material, o caso homogêneo e isotrópico de fraca absorção pode ser bem descrito pelas Eqs. (3.9) e (3.10).

Uma vez definida a densidade de energia média no tempo $\langle u \rangle_t(\mathbf{r}) = \langle u \rangle_t(r, \cos \theta, \phi)$, podemos obter a grandeza extensiva associada através da integração no volume, cujo resultado nada mais é do que a média temporal da energia armazenada no volume de integração:

$$W_q(l_1, l_2) = \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^1 d(\cos \theta) \int_{l_1}^{l_2} dr \, r^2 \langle u_q \rangle_t(r, \cos \theta, \phi) . \quad (3.11)$$

²⁴ O nome “coeficiente efetivo de energia” vem do fato de que os parâmetros $(\varepsilon_q^{(\text{eff})}, \mu_q^{(\text{eff})})$ podem incluir informações acerca da absorção das heteroestruturas que compõem a região q no interior do centro espalhador (*energia efetiva*) [86, 111], e não devem ser confundidos com os parâmetros efetivos $(\varepsilon_{\text{eff}}, \mu_{\text{eff}})$, os quais representam um material heterogêneo como se fosse um único *meio efetivo* (como nas teorias de Maxwell Garnett [112] e Bruggeman [113], por exemplo).

Por simplicidade, não deixaremos explícitas as dependências de $W = \langle W \rangle_t$, de modo que fornecemos apenas os raios ou limites superiores de integração das camadas esféricas. Em particular, se a casca esférica tem as mesmas propriedades ópticas do meio circundante (ε_0, μ_0) , que é considerado não dispersivo e não absoritivo, obtemos

$$W_0(l_1, l_2) = \frac{2}{3} \pi |E_0|^2 \varepsilon_0 (l_2^3 - l_1^3). \quad (3.12)$$

A Eq. (3.12) fornece um fator natural de *escala* para descrevermos o aumento ou diminuição da energia no interior da casca esférica $l_1 \leq r \leq l_2$.

De posse das definições (3.11) e (3.12), podemos finalmente calcular a energia armazenada no centro espalhador da Fig. 3.1. Antes, porém, é conveniente definirmos uma função que leve em conta a integral do produto das funções esféricas de Bessel e Neumann, a qual possui solução analítica [108, 114]. Para $m_q \neq m_q^*$ ($q = \{1, 2\}$), definimos a função adimensional [107, 115, 116]

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_{q,n}^{(z\bar{z})}(l_1, l_2) &= \frac{1}{(l_2^3 - l_1^3)} \int_{l_1}^{l_2} dr \, r^2 z_n(\rho_q) \bar{z}_n(\rho_q^*) \\ &= r^3 \frac{[\rho_q^* z_n(\rho_q) \bar{z}_n'(\rho_q^*) - \rho_q z_n'(\rho_q) \bar{z}_n(\rho_q^*)]}{(l_2^3 - l_1^3) (\rho_q^2 - \rho_q^{*2})} \Bigg|_{r=l_1}^{r=l_2}, \end{aligned} \quad (3.13)$$

onde z_n e $\bar{z}_n$ podem ser quaisquer funções de Bessel ou Neumann, $\rho_q = m_q k r$ e $l_1, l_2 \in \mathbb{R}$ são os limites de integração. Em particular, se $m_q = \pm m_q^*$ ($q = \{1, 2\}$), usando a regra de L'Hospital e relações de recorrência envolvendo funções esféricas de Bessel e Neumann [114], obtemos

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_{q,n}^{(z\bar{z})}(l_1, l_2) &= \frac{1}{(l_2^3 - l_1^3)} \lim_{m_q \rightarrow \pm m_q^*} \int_{l_1}^{l_2} dr \, r^2 z_n(m_q k r) \bar{z}_n(m_q^* k r) \\ &= \frac{\varrho_{\pm,n}^{(z\bar{z})}}{(l_2^3 - l_1^3)} \frac{r^3}{4} \left[2z_n(\rho_q) \bar{z}_n(\rho_q) - z_{n-1}(\rho_q) \bar{z}_{n+1}(\rho_q) - z_{n+1}(\rho_q) \bar{z}_{n-1}(\rho_q) \right] \Bigg|_{r=l_1}^{r=l_2}, \end{aligned} \quad (3.14)$$

onde devemos necessariamente escolher $\varrho_{+,n}^{(z\bar{z})} = 1$ para $m_q = m_q^*$ [i.e., $\text{Im}(m_q) = 0$]. Para $m_q = -m_q^*$ [$\text{Re}(m_q) = 0$], de acordo com a definição na Eq. (3.14), tem-se as seguintes combinações: $\varrho_{-,n}^{(jj)} = \varrho_{-,n}^{(yy)} = (-1)^n$ e $\varrho_{-,n}^{(jy)} = \varrho_{-,n}^{(yj)} = (-1)^{n+1}$, uma vez que $j_n(-\rho) = (-1)^n j_n(\rho)$ e $y_n(-\rho) = (-1)^{n+1} y_n(\rho)$ [114]. As Es. (3.13) e (3.14) são bastante apropriadas para simplificar nossas expressões analíticas [106–108, 115–117].

3.2.1 Esfera interior

No caroço esférico ($0 \leq r \leq a$), considere em separado as contribuições dos campos elétrico e magnético à energia eletromagnética, respectivamente: $W_{1E} \equiv \int_{\mathcal{V}_1} d^3r \varepsilon_1^{(\text{eff})} |\mathbf{E}_1|^2/4$ e $W_{1H} \equiv \int_{\mathcal{V}_1} d^3r \mu_1^{(\text{eff})} |\mathbf{H}_1|^2/4$, com $\mathcal{V}_1$ sendo a respectiva região de integração. Usando as componentes do campo elétrico, Eqs. (D.42)–(D.44) do Apêndice D.1.1.1, e as definições das Eqs. (3.11) e (3.12) para $q = 1$, $l_1 = 0$ e $l_2 = a$, obtemos a média temporal da energia elétrica²⁵:

$$\frac{W_{1E}(0, a)}{W_0(0, a)} = \frac{3}{4} \frac{\varepsilon_1^{(\text{eff})}}{\varepsilon_0} \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ (2n+1) |c_n|^2 \mathcal{I}_{1,n}^{(jj)}(0, a) + |d_n|^2 \left[n \mathcal{I}_{1,n+1}^{(jj)}(0, a) + (n+1) \mathcal{I}_{1,n-1}^{(jj)}(0, a) \right] \right\}, \quad (3.15)$$

onde $\mathcal{I}_{1,n}$ é uma integral com solução analítica definida na Eq. (3.13) [ou (3.14)] e os coeficientes de Aden-Kerker internos são dados por

$$c_n = \frac{im_1 [\psi_n(m_2x) - B_n \chi_n(m_2x)] / \psi_n(m_1x)}{\xi'_n(y) [\psi'_n(m_2y) - B_n \chi'_n(m_2y)] - \tilde{m}_2 \xi_n(y) [\psi'_n(m_2y) - B_n \chi'_n(m_2y)]}, \quad (3.16)$$

$$d_n = \frac{im_1 [\psi'_n(m_2x) - A_n \chi'_n(m_2x)] / \psi'_n(m_1x)}{\tilde{m}_2 \xi'_n(y) [\psi_n(m_2y) - A_n \chi_n(m_2y)] - \xi_n(y) [\psi'_n(m_2y) - A_n \chi'_n(m_2y)]}. \quad (3.17)$$

A média temporal da energia magnética W_{1H} no interior da região ($0 \leq r \leq a$) pode ser obtida da Eq. (3.15) por simetria; bastam as substituições $\varepsilon_1^{(\text{eff})}/\varepsilon_0$ por $|\tilde{m}_1|^2 \mu_1^{(\text{eff})}/\mu_0$ e (c_n, d_n) por (d_n, c_n) . Finalmente, somando-se as contribuições elétrica e magnética dentro do caroço, obtemos a média temporal da energia eletromagnética:

$$W_1(0, a) = W_{1E}(0, a) + W_{1H}(0, a). \quad (3.18)$$

À parte os coeficientes de Aden-Kerker, esses resultados são os mesmos do caso homogêneo (teoria de Lorenz-Mie) e estão de acordo com os artigos de Bott e Zdzunkowski [106] no caso não magnético ($\mu_1 = \mu_0$) e Ruppín [116] para uma permeabilidade do tipo Drude-Lorentz. Detalhes desses cálculos para o caso magnético ($\mu_1 \neq \mu_0$) podem ser encontrados na Ref. [115].

²⁵ As contribuições radiais e angulares foram simplificadas pela aplicação das relações $(2n+1) \int_{-1}^1 d(\cos \theta) \pi_n \pi_{n'} \sin^2 \theta = 2n(n+1) \delta_{n,n'}$, $(2n+1) \int_{-1}^1 d(\cos \theta) (\pi_n \pi_{n'} + \tau_n \tau_{n'}) = 2n^2(n+1)^2 \delta_{n,n'}$ e $\int_{-1}^1 d(\cos \theta) (\pi_n \tau_{n'} + \tau_n \pi_{n'}) = 0$, onde $\pi_n = P_n^{(1)}(\cos \theta)/\sin \theta$ e $\tau_n = d[P_n^{(1)}(\cos \theta)]/d\theta$, sendo $P_n^{(1)}(\cos \theta)$ a função associada de Legendre de primeira ordem [1, 115].

3.2.2 Camada esférica

Na região da casca esférica ($a \leq r \leq b$), de maneira inteiramente análoga à discussão precedente, obtemos a média temporal da energia elétrica:

$$\begin{aligned} \frac{W_{2E}(a, b)}{W_0(a, b)} = \frac{3}{4} \frac{\varepsilon_2^{(\text{eff})}}{\varepsilon_0} \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ (2n+1) |f_n|^2 \mathcal{I}_{2,n}^{(jj)}(a, b) \right. \\ + |g_n|^2 \left[n \mathcal{I}_{2,n+1}^{(jj)}(a, b) + (n+1) \mathcal{I}_{2,n-1}^{(jj)}(a, b) \right] \\ + (2n+1) |v_n|^2 \mathcal{I}_{2,n}^{(yy)}(a, b) \\ + |w_n|^2 \left[n \mathcal{I}_{2,n+1}^{(yy)}(a, b) + (n+1) \mathcal{I}_{2,n-1}^{(yy)}(a, b) \right] \\ + 2\text{Re} \left[(2n+1) f_n v_n^* \mathcal{I}_{2,n}^{(jy)}(a, b) \right. \\ \left. \left. + g_n w_n^* \left(n \mathcal{I}_{2,n+1}^{(jy)}(a, b) + (n+1) \mathcal{I}_{2,n-1}^{(jy)}(a, b) \right) \right] \right\}, \quad (3.19) \end{aligned}$$

onde empregamos as Eqs. (D.42)–(D.44) do Apêndice D.1.1.1 e as definições (3.11) e (3.12) para $q = 2$, $l_1 = a$ e $l_2 = b$. As funções $\mathcal{I}_{2,n}$ estão definidas na Eq. (3.13) [ou (3.14)] e os coeficientes internos de Aden-Kerker são dados por

$$f_n = \frac{im_2}{\xi'_n(y) [\psi'_n(m_2y) - B_n \chi'_n(m_2y)] - \tilde{m}_2 \xi_n(y) [\psi'_n(m_2y) - B_n \chi'_n(m_2y)]}, \quad (3.20)$$

$$g_n = \frac{im_2}{\tilde{m}_2 \xi'_n(y) [\psi_n(m_2y) - A_n \chi_n(m_2y)] - \xi_n(y) [\psi'_n(m_2y) - A_n \chi'_n(m_2y)]}, \quad (3.21)$$

$$v_n = B_n f_n, \quad (3.22)$$

$$w_n = A_n g_n. \quad (3.23)$$

Por simetria, a energia correspondente ao campo magnético W_{2H} é obtida da Eq. (3.19) através das substituições de $\varepsilon_2^{(\text{eff})}/\varepsilon_0$ por $|\tilde{m}_2|^2 \mu_2^{(\text{eff})}/\mu_0$, (f_n, g_n) por (g_n, f_n) e (v_n, w_n) por (w_n, v_n) . Desse modo, a média temporal da energia eletromagnética dentro da camada esférica é prontamente calculada pela expressão

$$W_2(a, b) = W_{2E}(a, b) + W_{2H}(a, b). \quad (3.24)$$

3.2.3 Energia total

Finalmente, como a energia é uma grandeza *extensiva* e a operação de média é *linear*, podemos calcular a energia interna ao centro espalhador como a soma das

energias médias armazenadas no caroço e na casca esférica separadamente. Assim, das Eqs. (3.18) e (3.24), calculamos a energia eletromagnética total como sendo

$$W_{1,2}(a, b) = W_1(0, a) + W_2(a, b) . \quad (3.25)$$

Portanto, dados os parâmetros constitutivos associados aos meios (ε_q, μ_q) , onde $q = \{1, 2\}$, podemos determinar a respectiva energia eletromagnética dentro da partícula esférica por meio das Eqs. (3.15)–(3.25). Na Seção a seguir, aplicamos nossos resultados analíticos a um modelo de metamaterial dispersivo. Mostramos também que as seções de choque de Aden-Kerker estão vinculadas às intensidades dos campos eletromagnéticos no interior da esfera revestida. Assim como os cálculos apresentados nesta Seção, o cálculo analítico das seções de choque de esferas concêntricas em termos dos campos internos, até onde temos conhecimento, nunca havia sido feito até então [108].

3.3 Esferas revestidas contendo metamateriais

Foram necessárias três décadas para que o trabalho pioneiro de Veselago de 1968 [118], em que é introduzida a ideia de meios materiais com *refração negativa*, ganhasse a devida atenção e abandonasse o âmbito das especulações puramente teóricas²⁶. No final do século passado, foram construídos em laboratório os primeiros *metamateriais compósitos* [74], o que incentivou tanto a pesquisa teórica quanto as modernas aplicações em física experimental [72]. O desenvolvimento tecnológico da última década na miniaturização de estruturas, aliado aos avanços na física teórica para descrição e construção dos metamateriais *eletromagnéticos* [71], permitiu identificar elementos comuns a vários fenômenos ondulatórios da Física e seus meios materiais de propagação. Hoje, a ideia do “manto da invisibilidade”²⁷ e refração

²⁶ Historicamente, Veselago não foi o primeiro a estudar os efeitos da refração negativa. Antes dele, Lamb [119] e Schuster [10] em 1904, Mandel’shtam [120] em 1944 e Pafomov [121] em 1959 estudaram as chamadas *backward waves* (ondas com velocidade de grupo *negativa*, isto é, oposta à velocidade de fase), que se propagam em materiais com $\varepsilon < 0$ e $\mu < 0$ *simultaneamente*. Veselago [118], contudo, foi o primeiro a fazer a conexão dos parâmetros materiais negativos com um índice de refração negativo via condições de contorno, e a explorar meios dispersivos com “plásmons magnéticos” e suas aplicações em lentes não usuais [122].

²⁷ Dentre as várias técnicas de invisibilidade eletromagnética, há duas categorias que se destacam: a *óptica de transformação* [72], que se utiliza de metamateriais e refração negativa para “curvar a luz”, fazendo-a contornar objetos; e a técnica de *cancelamento de espalhamento* (manto

negativa encontra aplicações das mais variadas e não restritas apenas à óptica, como no caso dos *metamateriais acústicos* [127] e *metafluidos* [128], por exemplo, indo de camuflagens acústicas usando refração negativa de ondas sonoras [129] a escudos de invisibilidade aquática [130].

Nesta Seção, apresentamos uma aplicação de nossos resultados analíticos a um sistema composto por uma esfera revestida contendo um metamaterial dispersivo. Nosso objetivo é avaliar o comportamento da energia eletromagnética na presença de refração negativa.

3.3.1 Metamateriais isotrópicos e ressonâncias plasmônicas

Devido à simplicidade tanto do modelo teórico quanto experimental, escolhemos usar neste estudo os chamados metamateriais compósitos “clássicos”, então desenvolvidos no início da década passada e cujo modelo é ilustrado na Fig. 3.2. Assim, para os meios materiais que compõem o centro espalhador, consideramos um metamaterial isotrópico $[\varepsilon_q(\omega), \mu_q(\omega)]$, com os rótulos $q = 1$ para a esfera interior e $q = 2$ para a camada esférica homogênea, consistindo de arranjos de fios e ressonadores de anéis fendidos (SRR, do inglês “*split-ring resonator*”) [74]:

$$\frac{\varepsilon_q(\omega)}{\varepsilon_0} = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\gamma)}, \quad (3.26)$$

$$\frac{\mu_q(\omega)}{\mu_0} = 1 - \frac{F\omega^2}{(\omega^2 - \omega_0^2) + i\omega\Gamma}, \quad (3.27)$$

onde ω_p e ω_0 são as frequências *efetivas* de plasma e de ressonância associadas aos fios e ao meio de SRRs, respectivamente. O fator adimensional F é a área fracional de uma unidade celular ocupada pelo interior do anel metálico, normalmente de cobre, e γ e Γ são coeficientes de dissipação, que descrevem as interações elétron-fônon da rede. O nome “compósito” vem justamente do fato de metamateriais serem compostos por estruturas (milimétricas, no caso dos SRRs) com propriedades ópticas distintas entre si, mas que, uma vez combinadas, engendram efeitos que separadamente elas não exibiriam (definição de *sistemas complexos*. De fato, vale a pena reforçarmos que os parâmetros (ε_q, μ_q) são provenientes de uma *teoria de meios efetivos* e valem apenas para um regime específico de frequências, a saber,

plasmônico ou *cloaking* [123, 124]), que se baseia em interferências destrutivas não ressonantes, e em todas as direções, usando plasmônica [125] e metamateriais [126].

quando o comprimento de onda da radiação é muito maior que um comprimento característico das estruturas que compõem o metamaterial (tipicamente, o raio do anel). Fora desse regime, temos um “cristal” fotônico (anisotrópico) e o modelo descrito pelas Eqs. (3.26) e (3.27) não pode ser aplicado.

Figura 3.2 – Metamaterial composto de *split-ring resonators* (SRRs) e fios em lados opostos de uma placa dielétrica. (a) Uma unidade de SRR. (b) Arranjo periódico de SRRs e fios. Sendo r_0 o raio médio dos anéis externos, que é maior que o espaçamento entre os SRRs, a teoria de meios efetivos [Eqs. (3.26) e (3.27)] vale para $r_0 \ll \lambda$. Para $r_0 \approx \lambda$, temos um meio heterogêneo e anisotrópico. (Figura adaptada da Ref. [131].)

Em contraste com o *modelo empírico* descrito pelas Eqs. (3.26) e (3.27), é possível encontrar estudos teóricos em que a permeabilidade do metamaterial é proveniente de um *modelo fenomenológico* do tipo Lorentz [80]. A única diferença entre esses modelos está no fato de que, no caso do modelo do tipo Lorentz, o numerador da permeabilidade não depende da frequência de excitação ω , mas sim da frequência de ressonância ω_0 . Como usualmente as análises são realizadas próximas à frequência de ressonância, não há prejuízo algum ao optar-se por um desses modelos em detrimento do outro. A diferença de comportamento surge, porém, quando analisamos os regimes de baixas ($\omega < \omega_0$) e altas ($\omega > \omega_0$) frequências, como discutimos a seguir [111]. Para evitarmos ambiguidades, usamos neste Capítulo apenas o modelo empírico μ_q expresso na Eq. (3.27), que é também chamado de modelo do tipo *não* Lorentz. Por simplicidade, chamaremos as ressonâncias da Eq. (3.27) de “poláritons” magnéticos, enquanto o modelo de Drude, dado pela

Eq. (3.26), fornecerá os plásmons volumétricos ou de superfície.

Experimentalmente, para uma certa banda de frequência no regime de micro-ondas, a parte real das grandezas constitutivas expressas nas Eqs. (3.26) e (3.27) são ambas negativas ($\varepsilon'_q < 0, \mu'_q < 0$) [74]. Esses parâmetros negativos levam a um *índice de refração negativo* e o metamaterial é então chamado de material “canhoto” (*left-handed*), visto que, para ondas planas propagando-se através deste meio no regime de refração negativa, o vetor de onda $\mathbf{k}$ está no sentido oposto ao fluxo de energia eletromagnética, dado pelo vetor de Poynting $\mathbf{S}$ [88]. Em outras palavras, o conjunto de vetores $\{\mathbf{k}, \mathbf{E}, \mathbf{H}\}$ no espaço tridimensional forma uma base ortogonal *negativa*, não satisfazendo, portanto, a “regra da mão direita” (*right-handed*). Na situação em que não há perdas, temos explicitamente o índice de refração $m_q = \sqrt{\varepsilon'_q/\varepsilon_0} \sqrt{\mu'_q/\mu_0} = p \sqrt{\varepsilon'_q \mu'_q / (\varepsilon_0 \mu_0)}$, onde $p = -1$ se ambos ε'_q e μ'_q são negativos, e $p = 1$ caso contrário. É importante enfatizarmos que os metamateriais exibindo refração negativa devem ser *necessariamente* dispersivos de modo a garantir a *positividade* da densidade média de energia eletromagnética [88], expressa na Eq. (3.8). Ademais, o cálculo da densidade de energia em meios dispersivos (mais especificamente, dos coeficientes de energia $\varepsilon_q^{(\text{eff})}$ e $\mu_q^{(\text{eff})}$), na presença de perdas e refração negativa, não é trivial. No caso de meios lineares *passivos* e *fracamente absorptivos*, valem as definições das Eqs. (3.9) e (3.10). No entanto, a restrição de baixas perdas eletromagnéticas não é geralmente válida para os metamateriais dispersivos, uma vez que na região de mudança de sinal da permeabilidade ($\mu'_q = 0$) a dissipação pode ser considerável [87].

Uma forma de se calcular corretamente a média temporal da densidade de energia $\langle u \rangle_t$ é através de *teorias de meios efetivos*. Até pouco tempo atrás, no entanto, havia controvérsias entre duas abordagens para os metamateriais do tipo SRR, conhecidas como abordagem por *circuitos equivalentes* (EC), a qual associa cada grandeza óptica a um elemento de um circuito elétrico RLC no domínio da frequência (médias temporais), e a abordagem *eletrodinâmica* (ED), que se utiliza das equações dinâmicas para a polarização e magnetização do meio no domínio do tempo [111]. Tretyakov [132], a partir da permeabilidade do tipo *não Lorentz*, Eq. (3.27), e da dispersão do tipo plasma associada aos fios, Eq. (3.26), determinou uma expressão exata para $\langle u \rangle_t$ usando a abordagem EC. Neste mesmo contexto de

meios efetivos, as diferenças entre as abordagens EC e ED foram discutidas por Boardman e Marinov [111]. Esses autores, inspirados pelo trabalho de Loudon [86] em dielétricos dispersivos, estudaram os limites de validade de $\langle u \rangle_t$ calculada em metamateriais do tipo Lorentz e SRR. Na abordagem ED, os coeficientes efetivos de energia são expressos por [111]: $\varepsilon_q^{(\text{eff})}|_{\text{ED}} = \varepsilon_0[1 + \omega_p^2/(\omega^2 + \gamma^2)]$ e $\mu_q^{(\text{eff})}|_{\text{ED}} = \mu_0(1 + F\omega^2[\omega_0^2(3\omega_0^2 - \omega^2) + \omega^2\Gamma^2]/\{\omega_0^2[(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \omega^2\Gamma^2]\})$. Como discutido na Ref. [111], esses coeficientes estão de acordo com o resultado clássico da Ref. [93] para materiais dispersivos e sem perdas ($\gamma = \Gamma = 0$), Eqs. (3.9) e (3.10). Antes desse trabalho, porém, apenas as abordagens EC e a do modelo do tipo Lorentz eram empregadas. Na abordagem EC, os coeficientes de energia são [132]: $\varepsilon_q^{(\text{eff})}|_{\text{EC}} = \varepsilon_q^{(\text{eff})}|_{\text{ED}}$ e $\mu_q^{(\text{eff})}|_{\text{EC}} = \mu_0\{1 + F\omega^2(\omega_0^2 + \omega^2)/[(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \omega^2\Gamma^2]\}$, os quais são mais adequados para descrever o regime de baixas frequências ($\omega < \omega_0$) do que os coeficiente de energia fornecidos pelo modelo do tipo Lorentz [87, 116]: $\varepsilon_q^{(\text{eff})}|_{\text{Lorentz}} = \varepsilon_q^{(\text{eff})}|_{\text{ED}}$ e $\mu_q^{(\text{eff})}|_{\text{Lorentz}} = \mu_0\{1 + F\omega_0^2(\omega_0^2 + \omega^2)/[(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \omega^2\Gamma^2]\}$. Por outro lado, a dispersão do tipo Lorentz é uma descrição mais adequada do que a da abordagem EC no regime de altas frequências ($\omega > \omega_0$) [111]. Ambas as abordagens EC e de dispersão do tipo Lorentz, no entanto, não satisfazem o limite clássico de fraca absorção [93].

Embora a abordagem ED da Ref. [111] tenha solucionado o problema que havia no limite de fraca absorção, dado pelas fórmulas clássicas de Landau *et al.* [93], ainda persistia o fato de que ela não era consistente com as abordagens EC e do tipo Lorentz, as quais estavam de acordo com os dados experimentais. Assim, dependendo da abordagem escolhida, a fórmula para o cálculo da densidade de energia seria diferente. Essa aparente controvérsia entre as abordagens EC e ED foi solucionada apenas recentemente por Luan [133], o qual mostrou que se a potência dissipada é identificada *a priori*, a abordagem EC se reduz à abordagem ED. As expressões corretas para os coeficientes efetivos de energia elétrica e magnética, e que são consistentes com o limite de fraca absorção [93], são expressas por:

$$\frac{\varepsilon_q^{(\text{eff})}(\omega)}{\varepsilon_0} = 1 + \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + \gamma^2}, \quad (3.28)$$

$$\frac{\mu_q^{(\text{eff})}(\omega)}{\mu_0} = 1 + \frac{F\omega^2(3\omega_0^2 - \omega^2)}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \omega^2\Gamma^2}. \quad (3.29)$$

Neste estudo, empregamos exclusivamente as grandezas constitutivas calculadas por Luan [133], Eqs. (3.28) e (3.29), uma vez que elas são válidas para ambas as abordagens EC e ED e satisfazem o limite clássico de Landau *et al.* [93] para fraca absorção.

Antes de prosseguirmos, cabe aqui fazermos uma breve distinção (ainda que qualitativa) entre os tipos de excitações plasmônicas. Maiores detalhes podem ser encontrados, por exemplo, nas Refs. [42, 44]. Em resumo, tem-se os seguintes tipos de excitações:

- O plásmon volumétrico (ou plásmon do *bulk*) resulta dos deslocamentos de cargas no volume do material *induzidos* por uma onda eletromagnética plana incidente. Em outras palavras, a interação com a onda eletromagnética leva à criação de um *gap* de energia: $E_{bulk} = \hbar\omega_p$, onde ω_p é a frequência de plasma, satisfazendo a relação de dispersão $\omega^2 = \omega_p^2 + c^2k^2$, e $\hbar$ é a constante de Planck reduzida. O plásmon volumétrico é excitado para $\varepsilon'_q = 0$ (campo eletromagnético *longitudinal*) ou, dependendo da geometria, $\varepsilon'_q = \epsilon_0$ (modos do tipo vácuo), de forma que o comprimento de onda é *real* (onda propagante).
- Os plásmons-poláritons de superfície (SPPs, do inglês *surface plasmon-polariton*) são um *quantum* de onda eletromagnética polarizada em um meio dielétrico propagante (chamada de *poláriton*) acoplada a um plásmon. Supondo um modelo *ideal* de Drude de elétron livre para ε_q , a energia de um SPP em um *filme fino* metálico no ar é $E_{spp} = \hbar\omega_p/\sqrt{2}$. Em geral, a frequência característica de um SPP é $\omega_{spp} = \omega_p/\sqrt{1 + \varepsilon_s/\varepsilon_0}$, onde ε_s é a permissividade do dielétrico não absoritivo em contato com a superfície metálica, havendo um casamento de fase na interface (digamos, *xy*): $k_x = k\sqrt{\varepsilon_q\varepsilon_s/(\varepsilon_q + \varepsilon_s)}$. Esse casamento de fase, aliado às condições de contorno dos campos, faz com que as excitações de SPPs não existam para o modo TE (campo elétrico paralelo à interface), mas apenas para o modo TM (campo magnético paralelo à interface). Os SPPs são excitados para $\varepsilon'_q = -\varepsilon_s < 0$, levando a um comprimento de onda *imaginário* (ondas evanescentes).
- Os SPPs localizados (LSPs, do inglês *localized surface plasmon-polariton*), por sua vez, surgem quando a luz atinge uma nanoestrutura metálica. O

comprimento de onda da luz é muito maior do que a nanoestrutura (*limite de Rayleigh*), levando o plásmon a oscilar em torno da nanoestrutura. A energia de um plásmon de superfície em uma *esfera metálica* no ar, assumindo um modelo de Drude para ε_q , é $E_{\text{lsp}} = \hbar\omega_p/\sqrt{3}$. A partícula, neste caso, se comporta como um dipolo, e as ressonâncias ocorrem geralmente para $\varepsilon' < 0$, com dependência da geometria da partícula [42, 44]. Note uma clara diferença entre os fatores $\sqrt{2}$ (SSPs propagantes) e $\sqrt{3}$ (SPPs localizados). Isso é devido a efeitos da geometria de confinamento [42].

São, portanto, as propriedades de intensificação do *campo distante* (radiação de dipolo) acoplado às ressonâncias de SPP no *campo próximo* – em conjunto com o fato de suportar campos eletromagnéticos com comprimentos de onda menores que da radiação aplicada e sem casamento de fase –, que tornam as nanopartículas plasmônicas interessantes para aplicações [43]. O espalhamento eletromagnético por partículas que suportam SPPs localizados é precisamente a configuração de que nos ocupamos neste estudo. Todavia, enfatizamos que não tratamos *especificamente* de nanopartículas, mas sim, na maioria das vezes, de centros espalhadores no *limite de Rayleigh* (aproximação dipolar).

3.3.2 Cálculo numérico das eficiências e energia interna

Para a realização dos cálculos numéricos, usando procedimentos bem conhecidos no cálculo de funções especiais e series de Lorenz-Mie [1, 33], escrevemos um código para o *software* livre *Scilab* 5.4.1. Em particular, a fim de calcular a energia eletromagnética como estabelecida na Eq. (3.25), é conveniente lidarmos com *grandezas adimensionais*. Das Eqs. (3.12), (3.18), (3.24) e (3.25), definimos a energia normalizada no interior das esferas concêntricas:

$$\frac{W_{1,2}(a, b)}{W_0(0, b)} = S^3 \frac{W_1(0, a)}{W_0(0, a)} + (1 - S^3) \frac{W_2(a, b)}{W_0(a, b)}, \quad (3.30)$$

onde $S = a/b$ é a razão de espessura da esfera revestida, também chamada de razão de aspecto. $W_{1,2}/W_0$ é, portanto, o *fator de aumento de energia* no interior das esferas concêntricas em relação a uma esfera equivalente com as mesmas propriedades ópticas do meio externo. Note que S^3 e $(1 - S^3)$ são as frações volumétricas do caroço e da camada esférica, respectivamente, em relação ao volume total do centro

espalhador. Isso mostra que os fatores de aumento de energia em cada região da partícula são *ponderados* por suas respectivas frações em volume de matéria.

De acordo com Ruppín [80], escolhemos $f_p = 10$ GHz e $f_0 = 4$ GHz para as frequências de ressonância de plasma e magnética, respectivamente. Os coeficientes de amortecimento do sistema são $\gamma = 0,03\omega_p$ e $\Gamma = 0,03\omega_0$, e escolhemos o parâmetro adimensional $F = 0,56$. Como é bem conhecido, os parâmetros efetivos para os metamateriais, Eqs. (3.26)–(3.29), são válidos para a situação em que o comprimento de onda incidente é muito maior que as dimensões típicas das unidades de metamaterial (no caso, os SRRs) [88]. Como os SRRs são tipicamente da ordem de milímetros, em todos os cálculos numéricos aqui realizados o intervalo de frequência foi limitado a poucos GHz para garantir a validade das expressões para os parâmetros materiais efetivos.

Com este conjunto de parâmetros, as partes reais da permissividade elétrica e permeabilidade magnética são simultaneamente negativas de $f = 4$ a 6 GHz, de modo que uma banda de refração negativa mostra-se neste intervalo de frequência. Essa situação está ilustrada na Fig. 3.3. No que se segue, consideramos dois

Figura 3.3 – Permissividade elétrica $\varepsilon_q(\omega)$ [Eq. (3.26)] e permeabilidade magnética $\mu_q(\omega)$ [Eq. (3.27)] em função da frequência $f = \omega/2\pi$. (a) Partes real e imaginária de ε_q . (b) Partes real e imaginária de μ_q . A refração negativa acontece para $\text{Re}(\varepsilon_q) < 0$ e $\text{Re}(\mu_q) < 0$ *simultaneamente* – região $4 \text{ GHz} < f < 6 \text{ GHz}$.

casos típicos como estudados por Gao e Huang [81]: uma esfera revestida com caroço dispersivo e camada dielétrica, e vice-versa. O meio circundante (ε_0, μ_0)

é assumido como sendo o vácuo e o raio $b = 1$ cm é escolhido para a esfera exterior. Note que, com essas escolhas de parâmetros, temos $kb = \omega b \sqrt{\varepsilon_0 \mu_0} \approx 1$, para $f \approx 5,0$ GHz. Para um material dielétrico e não dispersivo, consideramos os parâmetros sem perdas $\varepsilon_q/\varepsilon_0 = 1,6$ e $\mu_q/\mu_0 = 1$ [81]. Como discutido em [81], as curvas de eficiência de extinção tornam-se mais suaves quando a camada dielétrica ou o caroço são absorptivos, levando a um decréscimo na amplitude de Q_{ext} à medida que a absorção aumenta para $S < 0,5$ ou $S > 0,5$, respectivamente. Aqui, consideramos uma situação sem perdas eletromagnéticas no dielétrico, de forma que os efeitos de absorção são provenientes tão somente do metamaterial. Essa é uma boa aproximação para o regime de frequências que escolhemos. Ademais, a média temporal de energia eletromagnética em um meio não dispersivo pode ser exatamente determinada apenas para meios fracamente absorptivos ou sem perdas [93].

3.3.2.1 Esfera de metamaterial revestida por um dielétrico

Algumas curvas de energia eletromagnética dentro do caroço [Fig. 3.4(a)] e dentro da camada [Fig. 3.4(b)], quando a primeira é dispersiva [$\varepsilon_1 = \varepsilon_1(\omega); \mu_1 = \mu_1(\omega)$] e a segunda é um dielétrico sem perdas ($\varepsilon_2/\varepsilon_0 = 1,6; \mu_2/\mu_0 = 1$), são apresentadas como funções da frequência e do parâmetro de espessura. Na Fig. 3.4(a), observamos na região de refração negativa (4 a 6 GHz) um forte aumento da energia eletromagnética no caroço de metamaterial. Esse aumento está relacionado à presença de ondas estacionárias no interior da esfera. Abaixo e acima deste intervalo de frequência, a energia interna decresce monotonicamente. Essa diminuição é de fato esperada para frequências na região de refração positiva [$\text{Re}(m_1) > 0$], uma vez que não há picos de ressonância na energia interna na região de parâmetros de tamanho de Rayleigh ($ka < kb \leq 1$) a menos que o espalhador exiba altos valores absolutos de permeabilidade ou permissividade [107, 115], o que não é o caso para $f < 3,5$ GHz e $f > 6$ GHz. Além disso, como neste intervalo $\varepsilon'_1(\omega) < 0$ ou $\mu'_1(\omega) < 0$, mas não ambos, temos $\text{Re}(m_1) \approx 0$ para baixa absorção, e as ondas eletromagnéticas não podem se propagar no interior do caroço, mas apenas excitar ressonâncias de plásmons-polárítos de superfície (SPPs), como o pico de ressonância entre 3,5 e 4 GHz [80]. Esses modos de superfície contribuem para o aumento da energia eletromagnética dentro da camada dielétrica, como pode ser

Figura 3.4 – Esfera de metamaterial dispersivo $[\varepsilon_1(\omega); \mu_1(\omega)]$, dado pelas Eqs. (3.26) e (3.27), revestida por uma camada dielétrica não absorptiva ($\varepsilon_2/\varepsilon_0 = 1,6; \mu_2/\mu_0 = 1$). O raio da camada esférica é $b = 1$ cm, onde variamos o tamanho do “caroço” de metamaterial, cujo raio é $a = Sb$, de acordo com os parâmetros de espessura: $S = 0,1; 0,3; 0,5; 0,9$. (a) Energia eletromagnética $W_1(0, a)/W_0(0, a)$ dentro do caroço $[\varepsilon_1(\omega), \mu_1(\omega)]$. (b) Energia eletromagnética $W_2(a, b)/W_0(a, b)$ dentro da camada (ε_2, μ_2).

observado na Fig. 3.4(b). Com o aumento da razão de espessura S , a energia dentro da camada dielétrica aumenta com valores máximos nas regiões de refração positiva e negativa, ambas associadas com ressonâncias de modos de superfície [80].

Somando-se as energias eletromagnéticas $W_1(0, a)$ e $W_2(a, b)$, representadas nas Figs. 3.4(a) e 3.4(b), por meio da Eq. (3.30), obtemos os perfis de energia eletromagnética dentro da esfera revestida como um todo, os quais podem ser observados Fig. 3.5(a). Note que o fator de aumento da energia $W_{1,2}/W_0$ é uma função crescente na região de refração negativa, tornando-se maior em magnitude à medida que o parâmetro de espessura S é aumentado, o que é o oposto da Fig. 3.4(a). Isso é mostrado explicitamente na Fig. 3.5(b) para algumas frequências na região de refração negativa. O mesmo comportamento pode ser constatado para a eficiência de extinção Q_{ext} , como mostramos na Fig. 3.6. Esses resultados para $b = 1$ cm são bastante diferentes da Ref. [81], onde $b = 10$ cm e as amplitudes de Q_{ext} decrescem com S .

Nos espectros de extinção, como discutido por Ruppín [80], as excitações de plásmons elétricos e “poláritons magnéticos” se reforçam mutuamente nas regiões de baixas frequências ($\omega < \omega_0$). Nesta região, a parte real da permissividade é negativa, enquanto que a permeabilidade tem uma parte real positiva [$\varepsilon'_1(\omega) < 0, \mu'_1(\omega) > 0$]. Uma vez que esses dois mecanismos, de excitações elétricas e magnéticas, podem ser considerados aproximadamente independentes nessa região de frequências, os picos abaixo de ω_0 são fornecidos pelas contribuições dos poláritons magnéticos volumétricos ($\mu'_1 \approx 0$) e SPPs localizados, onde esses últimos são obtidos das ressonâncias nos coeficientes de Aden-Kerker a_n . No entanto, logo acima de ω_0 , ambas permissividade elétrica e permeabilidade magnética têm partes reais negativas, e as ressonâncias de SPPs localizadas e de poláritons magnéticos, que são devidas às ressonâncias nos momentos de multipolo a_n e b_n , respectivamente, suprimem-se mutuamente na camada. Há, portanto, uma interferência destrutiva das respectivas contribuições elétricas e magnéticas para o campo espalhado. Fisicamente, isso acontece porque, exceto para uma pequena absorção intrínseca do sistema, o metamaterial torna-se transparente na região de refração negativa (o número de onda é *real*) e, por conseguinte, os modos de superfície, os quais dependem de ondas *evanescentes* (número de onda *imaginário*), não podem existir [80].

Figura 3.5 – Energia eletromagnética $W_{1,2}(a,b)/W_0$ no interior de um centro espalhador consistindo de uma esfera $[\varepsilon_1(\omega), \mu_1(\omega)]$, cuja dispersão é dada nas Eqs. (3.26) e (3.27), de raio a , revestida por uma camada dielétrica ($\varepsilon_2/\varepsilon_0 = 1,6$; $\mu_2/\mu_0 = 1$) de raio $b = 1$ cm. (a) $W_{1,2}(a,b)/W_0$ em função da frequência $f = \omega/2\pi$ para alguns valores de parâmetro de espessura $S = a/b$. (b) $W_{1,2}(a,b)/W_0$ em função do parâmetro de espessura S para algumas frequências na banda de *refração negativa* (4 a 6 GHz).

Figura 3.6 – Eficiência de extinção Q_{ext} para um centro espalhador consistindo de uma esfera de metamaterial $[\varepsilon_1(\omega), \mu_1(\omega)]$, dada pelas Eqs. (3.26) e (3.27), de raio a , revestida por uma camada dielétrica ($\varepsilon_2/\varepsilon_0 = 1,6; \mu_2/\mu_0 = 1$) de raio $b = 1$ cm, com razões de aspecto $S = 0,1; 0,3; 0,5; 0,9$.

3.3.2.2 Esfera dielétrica revestida por um metamaterial

Consideramos aqui a situação recíproca da Seção anterior: a esfera revestida é constituída de um caroço dielétrico sem perdas ($\varepsilon_1/\varepsilon_0 = 1,6; \mu_1/\mu_0 = 1$) e uma casca de metamaterial do tipo SRR e fios $[\varepsilon_2 = \varepsilon_2(\omega), \mu_2 = \mu_2(\omega)]$, dada pelas Eqs. (3.26) e (3.27). Uma vez mais, fixamos $b = 1$ cm e consideramos os mesmos parâmetros usados acima para o metamaterial dispersivo, levando a uma banda de refração negativa de 4 a 6 GHz, Fig. 3.3. As curvas correspondentes às energias eletromagnéticas dentro do caroço e da casca esférica em função da frequência da onda incidente, para algumas razões de espessura S , são apresentadas nas Figs. 3.7(a) e 3.7(b), respectivamente.

Na Fig. 3.7(b), obtemos que os picos de ressonância dentro da casca de metamaterial estão deslocados para baixas frequências ($\omega < \omega_0$) com o aumento em volume de material dielétrico no centro espalhador. Em particular, a energia

Figura 3.7 – Esfera dielétrica ($\varepsilon_1/\varepsilon_0 = 1,6$; $\mu_1/\mu_0 = 1$) de raio a revestida por uma camada de metamaterial $[\varepsilon_2(\omega), \mu_2(\omega)]$, dado pelas Eqs. (3.26) e (3.27), de raio $b = 1$ cm, com razões de aspecto $S = 0,1$; $0,5$; $0,7$; $0,9$. (a) Energia $W_1(0, a)/W_0(0, a)$ no interior do caroço (ε_1, μ_1). (b) Energia $W_2(a, b)/W_0(a, b)$ no interior da camada $[\varepsilon_2(\omega), \mu_2(\omega)]$.

Figura 3.8 – Energia eletromagnética $W_{1,2}(a,b)/W_0$ armazenada em um centro espalhador consistindo de uma esfera dielétrica ($\varepsilon_1/\varepsilon_0 = 1,6$; $\mu_1/\mu_0 = 1$) revestida por uma camada de metamaterial $[\varepsilon_1(\omega), \mu_1(\omega)]$, dada pelas Eqs. (3.26) e (3.27). (a) $W_{1,2}(a,b)/W_0$ em função da frequência para alguns parâmetros de espessura $S = a/b$. (b) $W_{1,2}(a,b)/W_0$ em função do parâmetro de espessura S para algumas frequências na região de *refração negativa* (4 a 6 GHz).

eletromagnética dentro do caroço dielétrico é fortemente suprimida em baixas frequências $\omega < \omega_0$, com um mínimo local em $f_0 = 4$ GHz [Fig. 3.7(a)]. Esse comportamento é devido à excitação de SPPs na camada de metamaterial nesse intervalo de frequência, fornecendo altos valores de intensidade de campos eletromagnéticos na superfície da esfera, os quais decaem de modo evanescente em direção ao seu centro. Por conseguinte, para uma espessura de penetração (*skin depth*) menor do que a espessura da camada $d = (b - a)$, o campo eletromagnético praticamente não alcança o caroço dielétrico, e isso é claramente observado na Fig. 3.7.

Figura 3.9 – Eficiência de extinção Q_{ext} para esferas revestidas consistindo de um caroço dielétrico ($\varepsilon_1/\varepsilon_0 = 1,6; \mu_1/\mu_0 = 1$) e uma camada de metamaterial $[\varepsilon_2(\omega), \mu_2(\omega)]$, dada pelas Eqs. (3.26) e (3.27), com parâmetros de espessura $S = 0,1; 0,5; 0,7; 0,9$.

É importante salientarmos que esses resultados apenas foram obtidos por meio da computação direta da energia eletromagnética armazenada no caroço e na casca separadamente, corroborando a importância desta grandeza. A energia eletromagnética total dentro da esfera revestida é mostrada nas Figs. 3.8(a) e 3.8(b), onde podemos observar um decréscimo da energia eletromagnética na região de

refração negativa em função do parâmetro de espessura S . O mesmo comportamento é também encontrado nos espectros de extinção, como mostrado na Fig. 3.9.

As esferas revestidas, tais quais as estudadas nesta Seção, são frequentemente um elemento chave em dispositivos plasmônicos e metamateriais que suportam ressonâncias de plásmons de superfície [134, 135]. Essas aplicações repousam em duas propriedades distintas das esferas revestidas: as ressonâncias de Fano e o grande aumento de campo eletromagnético nas vizinhanças de uma ressonância de SPP localizada. Recentemente, foi demonstrado que esferas de metamateriais com refração negativa são mais propensas a exibir ressonâncias de Fano no espalhamento de Lorenz-Mie do que as esferas constituídas de materiais convencionais, de forma que o metamaterial dispersivo tem uma “predisposição” a possuir ressonâncias de Fano [134]. Essa constatação faz com que nossos resultados sejam interessantes para aplicações envolvendo o efeito Fano, uma vez que a energia em metamateriais revestidos, a qual calculamos explicitamente aqui, é uma grandeza sensível à interferência entre as ressonâncias elétricas e magnéticas. Em particular, a densidade de energia não é apenas proporcional ao quadrado dos coeficientes de Aden-Kerker (intensidades), como outras observáveis do espalhamento de luz tais como as eficiências de extinção e espalhamento, fazendo-as insensíveis aos efeitos de interferência [56]. Ao contrário, ela depende de termos cruzados envolvendo diferentes coeficientes internos de Aden-Kerker, como pode ser verificado na Eq. (3.19). Desse resultado, concluímos que a energia eletromagnética armazenada poderia ser explorada não apenas para investigar ressonâncias de Fano em aplicações tecnológicas, que seriam mais prováveis de ocorrer devido à refração negativa em metamateriais, mas também para identificar regiões de aumento do campo eletromagnético.

Sem entrarmos em muitos detalhes (os quais serão discutidos no Capítulo a seguir), assumindo que a seção de choque de absorção está relacionada à potência dissipada no interior do centro espalhador (Apêndice C.2), verificamos numericamente que

$$Q_{\text{abs}} = \frac{8}{3}y \left\{ \left[\frac{\varepsilon_1''}{\varepsilon_1^{(\text{eff})}} \frac{W_{1E}(0, a)}{W_0(0, a)} + \frac{\mu_1''}{\mu_1^{(\text{eff})}} \frac{W_{1H}(0, a)}{W_0(0, a)} \right] S^3 \right.$$

Figura 3.10 – Eficiência de absorção Q_{abs} para esferas revestidas consistindo de um caroço dielétrico ($\varepsilon_1/\varepsilon_0 = 1,6$; $\mu_1/\mu_0 = 1$) e uma camada de metamaterial $[\varepsilon_2(\omega), \mu_2(\omega)]$, dada pelas Eqs. (3.26) e (3.27), com parâmetros de espessura $S = 0,1; 0,5; 0,7; 0,9$.

$$+ \left[\frac{\varepsilon_2''}{\varepsilon_2^{(\text{eff})}} \frac{W_{2E}(a, b)}{W_0(a, b)} + \frac{\mu_2''}{\mu_2^{(\text{eff})}} \frac{W_{2H}(a, b)}{W_0(a, b)} \right] (1 - S^3) \Bigg\} . \quad (3.31)$$

A Eq. (3.31) estende o resultado obtido por Ruppín [116] e pode ser generalizado para esferas multicamadas. Na Fig. 3.10, plotamos a eficiência de absorção de uma esfera dielétrica revestida por um metamaterial nas mesmas condições dos gráficos precedentes – caroço dielétrico e camada dispersiva. Escolhemos uma escala logarítmica para Q_{abs} no sentido de facilitar a comparação com a Fig. 3.8(a). Note que os perfis de $W_{1,2}/W_0$ e Q_{abs} , para as mesmas configurações, são bastante parecidos, confirmando o vínculo que existe entre essas duas grandezas. De fato, a Eq. (3.31) coloca em evidência a conexão que existe entre uma grandeza calculada, a energia armazenada no interior da esfera revestida, com uma grandeza *mensurável*, a eficiência de absorção. Em particular, note que o campo eletromagnético armazenado nas esferas revestidas constituídas de metamateriais, e daí as ressonâncias de Fano, dependem sensivelmente dos parâmetros efetivos $\varepsilon_q(\omega)$

e $\mu_q(\omega)$ [56,134]. Esse fato apenas reforça a importância de se considerar parâmetros efetivos realistas para os metamateriais [Eqs. (3.26)–(3.29)].

3.4 Conclusões

Calculamos analiticamente uma expressão exata para a energia eletromagnética média no interior de uma esfera revestida [Eq. (3.25)] usando expressões explícitas para os campos eletromagnéticos dentro do caroço e da camada esférica separadamente (Apêndice D.1.1.1). Embora se possa inferir algumas propriedades da energia interna e potência dissipada a partir da análise das eficiências de extinção (Q_{ext}) e espalhamento (Q_{sca}), o cálculo direto da energia armazenada no caroço e na casca separadamente nos permite compreender o comportamento dos campos internos em cada uma das estruturas que compõem o sistema. Aqui, mostramos alguns perfis de energia interna para duas situações envolvendo uma esfera de metamaterial revestida: uma casca dielétrica e um caroço de metamaterial dispersivo, e vice-versa. Para o metamaterial, usamos relações de dispersão realistas proveniente de um cristal fotônico feito de fios e SRRs. A fim de vincular a energia interna a grandezas mensuráveis, obtivemos uma relação analítica explícita entre as energias elétrica e magnética e a correspondente eficiência de absorção em esferas revestidas. Mostramos que a energia eletromagnética armazenada depende explicitamente de termos cruzados envolvendo os diferentes coeficientes internos de Aden-Kerker. Este resultado nos revela que a energia armazenada é uma grandeza sensível a interferências do campo interno responsáveis por ressonâncias assimétricas nas seções de choque, levando ao efeito Fano, que discutiremos no próximo Capítulo. Uma vez que o efeito Fano é mais propenso a ocorrer na presença de refração negativa [134], concluímos que a energia armazenada em esferas concêntricas, em conjunto com as seções de choque, pode ser utilizada para investigar ressonâncias de Fano em metamateriais.

Ressonâncias de Fano em esferas revestidas

Devido à capacidade de gerar campos eletromagnéticos extremamente fortes e confinados a uma escala nanoscópica, nanoestruturas metálicas que exibem modos localizados de plásmons-polárítons de superfície (SPPs) – por exemplo, as nanoesferas – desempenham um papel de grande relevância na atual nanociência [136, 137]. Recentemente, foi demonstrado que combinações adequadas de tais nanoestruturas metálicas na composição da nanopartícula podem levar a ressonâncias do tipo Fano [55, 56, 138, 139]. Essas ressonâncias surgem da interferência entre um modo discreto sub-radiativo e um contínuo de modos radiativos de ondas eletromagnéticas, e são distinguidas da *ressonância Lorentziana* em razão de seu formato *assimétrico* característico.

A *ressonância de Fano* (FR, do inglês *Fano resonance*), descoberta no ramo da física atômica por Ugo Fano em 1961 [54], é uma característica marcante de sistemas quânticos *interagentes*. Sendo um fenômeno de interferência, essas ressonâncias assimétricas também se manifestam em óptica clássica. Historicamente, a primeira observação de uma FR em óptica foi provavelmente a *anomalia de Wood* [140], a qual apenas recentemente foi explicada em termos do *efeito Fano*²⁸ [56, 142]. Com os avanços técnicos na engenharia de nanoestruturas

²⁸ Wood, em 1902, ao estudar o espectro de uma grade de difração metálica iluminada por uma fonte de luz contínua, notou que, sob certas condições, a distância espectral entre os máximos e mínimos de intensidade ocorria para comprimentos de onda não maiores do que a distância entre as linhas espectrais do sódio [140]. Esse efeito era observado para a luz p-polarizada, isto é, com o campo magnético paralelo aos sulcos da grade de difração. Na época, Wood não foi capaz de fornecer uma interpretação física do fenômeno [141], o qual chamou de “anomalias singulares”.

plasmônicas e metamateriais, o efeito Fano tem se tornado uma importante ferramenta para controlar as interações dos modos eletromagnéticos [57] – por exemplo, no espalhamento de luz por pequenas partículas (limite de Rayleigh) [55]. Graças ao perfil assimétrico da FR, que possui um pico de ressonância muito próximo (espectralmente) de uma antirressonância, sistemas exibindo o efeito Fano são altamente sensíveis ao ambiente dielétrico local. De fato, a interferência entre a radiação incidente e a reemitida pelo centro espalhador no dielétrico circundante dá origem tanto ao aumento de intensidade do campo eletromagnético próximo (interferência construtiva) quanto à sua supressão ressonante (interferência destrutiva) [65].

A maneira mais comum de se obter as FRs em nanoestruturas plasmônicas, usando um certo abuso de linguagem, é através de *quebras de simetria*²⁹ do sistema [56, 145]. A não uniformidade do campo eletromagnético nas superfícies metálicas (introduzida pela quebra da simetria rotacional do centro espalhador, por exemplo) promove um acoplamento mais eficiente entre as ressonâncias de SPPs discretas e um contínuo de modos eletromagnéticos fora da ressonância [55, 146]. Essa condição de assimetria das nanopartículas, no entanto, não é mandatória [147, 148]. No caso de partículas de simetria esférica (teoria de Lorenz-Mie), as FRs podem manifestar-se na seção de choque *diferencial* de retroespalhamento (ou alguma outra direção arbitrária) via interferência entre momentos de multipolo *distintos*. Se as nanopartículas forem revestidas por polímeros ou dielétricos arbitrários, essas ressonâncias podem induzir “estados escuros” (*dark states*) [67], que se caracterizam por um aumento de intensidade do campo próximo em regiões de frequência fora da ressonância de espalhamento [134].

Neste Capítulo, usando a teoria desenvolvida no Capítulo 3, investigamos o efeito Fano no espalhamento por esferas revestidas compostas de um caroço plasmônico arbitrário e uma camada dielétrica³⁰. Escrevendo a seção de choque de

²⁹ A *quebra de simetria* a que nos referimos é puramente geométrica (*e.g.*, duas esferas *descentralizadas*). No entanto, sob certas condições, os plásmons podem ser interpretados como *bósons de Goldstone* na quebra espontânea de simetria translacional (no espaço dos *momenta*) em um gás de elétrons livres [143, 144]. Tal discussão foge do escopo de nosso estudo e não será aqui abordada.

³⁰ Os principais resultados deste Capítulo encontram-se, em grande parte, publicados no *Physical Review A* (2013) sob o título: “*Unconventional Fano effect and off-resonance field enhancement in plasmonic coated spheres*” [83].

absorção em termos dos campos eletromagnéticos internos, demonstramos que ela é uma observável sensível a interferências, que em última instância levam ao efeito Fano. Em especial, mostramos que a *ressonância de Fano não convencional* [149] (UFR, do inglês *unconventional Fano resonance*), recentemente descoberta para esferas homogêneas com valores elevados de permissividade elétrica, podem também ocorrer para esferas metálicas revestidas com uma única camada dielétrica de baixa permissividade [83]. Um de nossos principais resultados analíticos é a constatação de que as UFRs, em esferas revestidas, surgem da interferência entre dois modos eletromagnéticos (com o *mesmo* momento de multipolo) *dentro da camada*, e não das interações entre os vários modos plasmônicos de diferentes camadas da partícula. Essas ressonâncias surgem da interferência entre dois modos radiantes dipolares fora de fase [150] e são independentes da direção de observação e da polarização.

Para evitarmos confusões em nossas análises, usamos UFR para as ressonâncias de Fano não convencionais (provenientes da interferência entre modos eletromagnéticos diferentes com o *mesmo* momento de multipolos em seções de choque *totais*) e FR para as convencionais (interferência entre multipolos *distintos* nas seções de choque *diferenciais*). Em contraste com as *esferas homogêneas*, as UFRs em *esferas revestidas* também existem no limite de Rayleigh. Essas ressonâncias podem induzir um aumento de intensidade do campo eletromagnético fora da ressonância de espalhamento, e que é aproximadamente uma ordem de magnitude maior do que aquela encontrada nas FRs convencionais. Mostramos neste Capítulo que as FRs e UFRs podem ocorrer na mesma frequência quando o caroço dispersivo tem um índice de refração negativo. Essa condição leva à otimização do aumento de campo no interior da partícula fora da ressonância (*estados escuros*).

A geometria de que tratamos neste Capítulo é a mesma do Capítulo 3. Todavia, abordaremos apenas a situação em que a esfera interior é dispersiva $[(\varepsilon_1(\omega), \mu_1(\omega))]$ e a camada de revestimento é dielétrica (ε_2, μ_2) . Um esquema do centro espalhador revestido e seus principais parâmetros está ilustrado na Fig. 4.1. A seguir, determinamos as intensidades dos campos internos – necessárias para o estudo dos “estado escuros” – e abordamos as FRs e UFRs em esferas concêntricas.

Figura 4.1 – Esfera dispersiva de raio a e propriedades ópticas $[\epsilon_1(\omega), \mu_1(\omega)]$ revestida por uma camada de espessura $(b - a)$ e propriedades ópticas não dispersivas (ϵ_2, μ_2) ; o meio externo tem propriedades não dispersivas (ϵ_0, μ_0) .

4.1 Intensidades dos campos internos

As ressonâncias do espalhamento eletromagnético – vistas, por exemplo, nas eficiências Q da teoria de Lorenz-Mie – são geralmente associadas às ressonâncias internas ao centro espalhador e, por conseguinte, ao campo próximo [1, 2]. Recentemente, Miroshnichenko [67] mostrou que essa associação nem sempre é verdadeira para esferas plasmônicas revestidas, onde a solução de Aden-Kerker fornece um amplo intervalo de parâmetros para excitações de SPPs. Assim, para alguns parâmetros de uma partícula metálica revestida por um dielétrico (ou vice-versa), as ressonâncias de espalhamento não necessariamente coincidem com o forte aumento de intensidade do campo eletromagnético nas vizinhanças da nanopartícula [67]. De fato, o aumento da intensidade do campo elétrico pode corresponder a uma supressão ressonante do espalhamento – o que é, à primeira vista, contra-intuitivo.

A forma mais direta e intuitiva de se estudar a influência do chamado *campo próximo* nos processos de espalhamento é mediante o campo eletromagnético no *interior* do centro espalhador ou em suas vizinhanças imediatas. Em geral, o estudo do campo eletromagnético armazenado no centro espalhador fornece informações

não apenas das ressonâncias de espalhamento [106, 115], as quais podem ser obtidas via seções de choque, mas também do tempo de permanência da radiação dentro da partícula e, por conseguinte, da velocidade de transporte de energia no meio desordenado [89, 90, 107], como mostramos na Seção 2.4.3. Essa vantagem oferecida pela densidade de energia, no entanto, não existe na prática, onde em geral não temos acesso ao campo eletromagnético interno às partículas, mas sim ao campo transmitido ou espalhado por elas (*Problema Inverso*). Essa é uma das razões pelas quais, como no caso da solução de Lorenz-Mie (*Problema Direto*), as grandezas mais relevantes do espalhamento eletromagnético são expressas em termos do campo espalhado. Contudo, como vimos no Capítulo anterior, para que se entenda com clareza o fenômeno de espalhamento, faz-se necessário, em algumas situações, o conhecimento do campo interno e de sua relação com as ressonâncias mensuráveis no *campo distante*. Essa análise é possível através de funcionais do campo interno – como a densidade de energia armazenada no volume do centro espalhador [107, 108, 115] ou, mais geralmente, a *intensidade do campo interno*. A vantagem de se trabalhar com a intensidade no lugar da densidade de energia reside na independência do modelo dispersivo – basicamente, dos coeficientes de energia da Eq. (3.8).

Por definição, as intensidades médias dos campos elétrico $\langle |\mathbf{E}|^2 \rangle_\Omega$ e magnético $\langle |\mathbf{H}|^2 \rangle_\Omega$ no ângulo sólido ($\Omega = 4\pi$) são calculadas por meio de uma integração levando em conta as contribuições de todas as direções possíveis [117]:

$$\langle |\mathbf{F}|^2 \rangle_\Omega = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^1 d(\cos \theta) |\mathbf{F}|^2, \quad (4.1)$$

onde $\mathbf{F} = \mathbf{F}(r, \cos \theta, \phi)$ pode ser tanto o campo elétrico ($\mathbf{E}$) quanto magnético ($\mathbf{H}$) no sistema de coordenadas esféricas (r, θ, ϕ) . Em particular, a média angular é mais interessante do que a média volumétrica porque nos permite obter informações da componente radial do campo *ao longo* da partícula [67]. Usando a expressão exata para o campo elétrico dentro do caroço ($0 \leq r \leq a$), fornecidas no Apêndice D.1.1.1, obtemos [108, 115]:

$$\begin{aligned} \frac{\langle |\mathbf{E}|^2 \rangle_\Omega}{|E_0|^2} = & \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ (2n+1) |c_n|^2 |j_n(\rho_1)|^2 \right. \\ & \left. + |d_n|^2 [n |j_{n+1}(\rho_1)|^2 + (n+1) |j_{n-1}(\rho_1)|^2] \right\}, \end{aligned} \quad (4.2)$$

onde $\rho_1 = m_1 k r$ e E_0 é a amplitude elétrica da onda incidente. Os índices de refração e impedância são $m_q = k_q/k = \sqrt{\varepsilon_q \mu_q / (\varepsilon_0 \mu_0)}$ e $\tilde{m}_q = \sqrt{\varepsilon_q \mu_0 / (\varepsilon_0 \mu_q)}$, respectivamente [151] (com $q = 1$ para o caroço e $q = 2$ para a casca). A expressão para o campo magnético é obtida usando a simetria que existe entre as propriedades elétricas e magnéticas na ausência de fontes (Apêndice A.1) através das substituições $(\mathbf{E}_1, E_0)$ por $(\mathbf{H}_1, H_0)$ (onde $H_0 = E_0 \sqrt{\varepsilon_0 / \mu_0}$) e (c_n, d_n) por $(\tilde{m}_1 d_n, \tilde{m}_1 c_n)$ na Eq. (4.2). Para a região da camada ($a \leq r \leq b$), a média angular do campo elétrico é [108]:

$$\begin{aligned} \frac{\langle |\mathbf{E}_2|^2 \rangle_\Omega}{|E_0|^2} = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ (2n+1) [|f_n|^2 |j_n(\rho_2)|^2 + |v_n|^2 |y_n(\rho_2)|^2] \right. \\ + |g_n|^2 [n |j_{n+1}(\rho_2)|^2 + (n+1) |j_{n-1}(\rho_2)|^2] \\ + |w_n|^2 [n |y_{n+1}(\rho_2)|^2 + (n+1) |y_{n-1}(\rho_2)|^2] \\ + 2\text{Re} \left[(2n+1) f_n v_n^* j_n(\rho_2) y_n(\rho_2^*) \right. \\ \left. \left. + g_n w_n^* [n j_{n+1}(\rho_2) y_{n+1}(\rho_2^*) + (n+1) j_{n-1}(\rho_2) y_{n-1}(\rho_2^*)] \right] \right\}, \quad (4.3) \end{aligned}$$

onde $\rho_2 = m_2 k r$. A expressão para a média angular do campo magnético dentro da camada é obtida pela substituição de $(\mathbf{E}_2, E_0)$ por $(\mathbf{H}_2, H_0)$, (f_n, g_n) por $(\tilde{m}_2 g_n, \tilde{m}_2 f_n)$, e (v_n, w_n) por $(\tilde{m}_2 w_n, \tilde{m}_2 v_n)$ na Eq. (4.3), e estão de acordo com a Ref. [117] no caso não magnético ($\mu_1 = \mu_2 = \mu_0$).

Os coeficientes internos c_n , d_n , f_n , g_n , v_n e w_n estão definidos nas Eqs. (3.16), (3.17) e (3.20)–(3.23), respectivamente, no Capítulo 3. No entanto, para a análise que fazemos a seguir (constituída de casos limites envolvendo aproximações polinomiais ou de séries de potências das funções de Bessel e Neumann), é conveniente que reescrevamos esses coeficientes, e também os coeficientes de espalhamento a_n [Eq. (3.6)] e b_n [Eq. (3.7)] que entram no cálculo das eficiências Q , em termos de *funções derivadas logarítmicas*, dadas por

$$D_n(\rho) = \frac{d}{d\rho} \ln[\psi_n(\rho)] . \quad (4.4)$$

Assim, os coeficientes de Aden-Kerker são:

$$a_n = \frac{\left(\tilde{D}_n / \tilde{m}_2 + n/y \right) \psi_n(y) - \psi_{n-1}(y)}{\left(\tilde{D}_n / \tilde{m}_2 + n/y \right) \xi_n(y) - \xi_{n-1}(y)} , \quad (4.5)$$

$$b_n = \frac{\left(\tilde{m}_2 \tilde{G}_n + n/y\right) \psi_n(y) - \psi_{n-1}(y)}{\left(\tilde{m}_2 \tilde{G}_n + n/y\right) \xi_n(y) - \xi_{n-1}(y)}, \quad (4.6)$$

$$c_n = \frac{m_1 f_n}{m_2 \psi_n(m_1 x)} [\psi_n(m_2 x) - B_n \chi_n(m_2 x)], \quad (4.7)$$

$$d_n = \frac{m_1 g_n}{m_2 \psi'_n(m_1 x)} [\psi'_n(m_2 x) - A_n \chi'_n(m_2 x)], \quad (4.8)$$

$$f_n = \frac{im_2 / [B_n \chi_n(m_2 y) - \psi_n(m_2 y)]}{\left(\tilde{m}_2 \tilde{G}_n + n/y\right) \xi_n(y) - \xi_{n-1}(y)}, \quad (4.9)$$

$$g_n = \frac{im_2 / [A_n \chi_n(m_2 y) - \psi_n(m_2 y)]}{\left(\tilde{D}_n + n\tilde{m}_2/y\right) \xi_n(y) - \tilde{m}_2 \xi_{n-1}(y)}, \quad (4.10)$$

$$v_n = B_n f_n, \quad (4.11)$$

$$w_n = A_n g_n, \quad (4.12)$$

onde definimos as novas funções auxiliares

$$\tilde{D}_n = \frac{D_n(m_2 y) - A_n \chi'_n(m_2 y) / \psi_n(m_2 y)}{1 - A_n \chi_n(m_2 y) / \psi_n(m_2 y)}, \quad (4.13)$$

$$\tilde{G}_n = \frac{D_n(m_2 y) - B_n \chi'_n(m_2 y) / \psi_n(m_2 y)}{1 - B_n \chi_n(m_2 y) / \psi_n(m_2 y)}, \quad (4.14)$$

$$A_n = \frac{\psi_n(m_2 x) [\tilde{m}_2 D_n(m_1 x) - \tilde{m}_1 D_n(m_2 x)]}{\tilde{m}_2 D_n(m_1 x) \chi_n(m_2 x) - \tilde{m}_1 \chi'_n(m_2 x)}, \quad (4.15)$$

$$B_n = \frac{\psi_n(m_2 x) [\tilde{m}_2 D_n(m_2 x) - \tilde{m}_1 D_n(m_1 x)]}{\tilde{m}_2 \chi'_n(m_2 x) - \tilde{m}_1 D_n(m_1 x) \chi_n(m_2 x)}, \quad (4.16)$$

com $x = ka$ e $y = kb$ sendo os parâmetros de tamanho. As funções ψ_n , χ_n e ξ_n são as funções de Riccati-Bessel, Riccati-Neuman e Riccati-Hankel, respectivamente.

4.2 Ressonância de Fano convencional

Na teoria de Lorenz-Mie, as ressonâncias de espalhamento se manifestam como pontos de máximo nas seções de choque de extinção e, via conservação de energia, nas seções de choque de espalhamento e absorção [1]. Nessa situação, os modos ressonantes presentes na partícula espalhadora acoplam-se ao campo distante e recebem o nome, com um certo abuso de linguagem, de “estados radiantes” (*bright states*). Ressonâncias desse tipo, na aproximação dipolar, são bastante similares a osciladores harmônicos forçados, sendo bem descritas, *na ressonância* ($\omega \approx \omega_0$),

por funções simétricas, as *funções Lorentzianas* (também chamadas de *funções de Cauchy* ou *fórmulas de Breit-Wigner* [152]):

$$\mathcal{L}_{\omega_0, \gamma}(\omega) = \frac{\gamma^2}{(\omega - \omega_0)^2 + \gamma^2} = \frac{1}{1 + \left(\frac{\omega - \omega_0}{\gamma}\right)^2}, \quad (4.17)$$

onde ω_0 e γ denotam, respectivamente, a posição e a largura à meia altura da ressonância [1]. Na presença de ressonâncias de diferentes origens físicas, se essas são *independentes*, as contribuições de ressonâncias individuais permanecem dadas pela função Lorentziana. Isso é contemplado, por exemplo, no modelo clássico de dispersão de *Drude-Lorentz* [1] para a permissividade elétrica³¹. Tanto na abordagem de gás de elétrons (Drude), quanto na consideração de elétrons harmonicamente ligados aos núcleos atômicos (Lorentz), o perfil de ressonância provém de um conjunto de osciladores harmônicos desacoplados [92].

No limite de Rayleigh, se uma partícula possui momento de dipolo nulo, ela irradiará fracamente e não será facilmente excitada pelo campo aplicado. Contudo, quando duas ou mais partículas estão próximas umas das outras – ou quando elas possuem estratificações de diferentes materiais, como no caso de uma esfera metálica revestida por um dielétrico –, pode ocorrer o acoplamento entre ressonâncias de ordens distintas mediado pelos campos elétricos dos plásmons de superfície [55, 56]. Esse acoplamento leva a trocas de energia, fornecendo um mecanismo para excitar modos *fracamente* radiantes (quadrupolo, octopolo, etc.), também chamados de modos “escuros”, de uma nanoestrutura. Tal mecanismo de troca de energia, baseado em interferência entre ressonâncias, pode ser explicado de maneira bastante didática usando dois osciladores acoplados [153].

4.2.1 Osciladores harmônicos acoplados

É muito comum na literatura a associação do efeito Fano a osciladores acoplados – a fim de explicar, por exemplo, efeitos como a *transparência eletromagneticamente induzida* (EIT) em sistemas atômicos [61]. Por ser a forma

³¹ Evidentemente, a origem do processo ressonante no espalhamento pode ser explicada em uma abordagem *quântica*, levando-se em conta, no caso de funções dielétricas, as interações dos fônons (vibrações da rede cristalina) com os elétrons e o campo aplicado. Para a descrição que aqui fazemos, todavia, não há necessidade de entrarmos nos detalhes microscópicos da matéria [1].

mais simples e didática de se entender a ressonância de Fano, vale a pena discutirmos a analogia entre sistemas mecânicos e excitações plasmônicas. Maiores detalhes sobre o efeito Fano e osciladores acoplados podem ser encontrados nas Refs. [56, 153].

Considere um oscilador 1 (com constante de mola K_1 e massa M_1) submetido a uma força externa harmônica $F(t) = F_0 e^{-i\omega t}$. Esse oscilador está acoplado a um oscilador 2 (com constante de mola K_2 e massa M_2) através de uma mola de constante K . Esse sistema encontra-se ilustrado na Fig. 4.2. As equações dinâmicas

Figura 4.2 – Modelo mecânico usado para explicar o efeito Fano. Dois osciladores com massas e constantes de mola dadas pelos pares ordenados (M_1, K_1) e (M_2, K_2) , respectivamente, acoplados por uma mola de constante K . O oscilador 1 é submetido a uma força harmônica $F(t)$.

para as partículas 1 e 2 (supondo $M_1 = M_2 = M$), em termos dos deslocamentos X_1 e X_2 em relação a suas respectivas posições de equilíbrio, são:

$$\begin{cases} \ddot{X}_1(t) + \gamma_1 \dot{X}_1(t) + \omega_1^2 X_1(t) - \Omega^2 X_2(t) = (F_0/M) e^{-i\omega t} , \\ \ddot{X}_2(t) + \gamma_2 \dot{X}_2(t) + \omega_2^2 X_2(t) - \Omega^2 X_1(t) = 0 , \end{cases} \quad (4.18)$$

onde as frequências naturais são $\omega_1 = \sqrt{K_1/M}$ e $\omega_2 = \sqrt{K_2/M}$ associadas aos osciladores 1 e 2, respectivamente, sendo γ_1 e γ_2 as respectivas frequências de amortecimento. A frequência de acoplamento entre os osciladores 1 e 2 é $\Omega = \sqrt{K/M}$. As soluções para as Eqs. (4.18) são as funções oscilantes $X_1(t) = C_1(\omega) e^{-i\omega t}$ e $X_2(t) = C_2(\omega) e^{-i\omega t}$, com amplitudes

$$C_1(\omega) = \frac{(\omega_2^2 - \omega^2 - i\gamma_2\omega) (F_0/m)}{(\omega_1^2 - \omega^2 - i\gamma_1\omega) (\omega_2^2 - \omega^2 - i\gamma_2\omega) - \Omega^4} , \quad (4.19)$$

$$C_2(\omega) = \frac{-\Omega^2(F_0/m)}{(\omega_1^2 - \omega^2 - i\gamma_1\omega)(\omega_2^2 - \omega^2 - i\gamma_2\omega) - \Omega^4} . \quad (4.20)$$

A partir dessas soluções, podemos explicar o efeito Fano de modo bastante intuitivo e de fácil visualização.

Figura 4.3 – Dependência ressonante das amplitudes (por unidade de comprimento) dos osciladores acoplados para $\omega_2 = 1,2\omega_1$, $\gamma_1 = 0,025\omega_1$, $\gamma_2 = 0$ e $\Omega^2 = 0,1\omega_1^2$ – parâmetros usados na Ref. [153]. (a) Amplitude do oscilador 1 (forçado) mostrando um perfil de ressonância Lorentziano na região de ω_1 e um perfil de Fano na região de ω_2 , onde a antirressonância (Fano *dip*) ocorre exatamente em $\omega = \omega_2$. (b) Amplitude do oscilador 2 mostrando dois perfis de ressonância simétricos (Lorentzianos).

Na Fig. 4.3, para uma análise qualitativa do processo, apresentamos a dependência das amplitudes de cada um dos osciladores usando os mesmos parâmetros da Ref. [153]. Em nossa analogia, o oscilador 2 faz o papel, por exemplo, do modo eletromagnético “escuro” ou quadrupolo elétrico, enquanto o oscilador 1 (forçado) faz o papel da ressonância que se acopla com o meio externo (campo incidente), isto é, o modo eletromagnético “radiante” ou dipolo elétrico. Assim, o oscilador 2 pode absorver energia do oscilador 1 [Fig. 4.3(b)], resultando, em nossa analogia, em um decréscimo na amplitude da radiação espalhada pelo dipolo no campo distante. Além disso, parte da energia transferida ao oscilador 2 (quadrupolo) pode ser transferida de volta ao oscilador 1 (dipolo) [Fig. 4.3(a)]. Se essa transferência estiver associada a uma diferença de fase, pode haver interferências destrutivas entre as ressonâncias nos dois osciladores, inibindo o dipolo de irradiar no campo distante [$\omega = \omega_2$ na Fig. 4.3(a)]. Essa interferência destrutiva explica,

dentre outros fenômenos, o que se conhece por *transparência induzida* [56, 61]; as ressonâncias internas que não se manifestam no espectro de extinção (amplitude do oscilador 1), mas sim em um modo de superfície da partícula (oscilador 2), são chamadas de “estados escuros” (*dark states*) [67].

O formato de linha assimétrico nas proximidades de $\omega_2 \approx 1,2\omega_1$ na Fig. 4.3(a), originado da interferência entre ressonâncias na aproximação de *acoplamento fraco*, é chamado de *ressonância de Fano*. Sua forma funcional, que pode ser obtida da Eq. (4.19) em torno de $\omega \approx \omega_2$, é [55]:

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_{\omega_0, \gamma, \beta}(\omega) &= \frac{1}{1 + \beta^2} \left[\frac{(\beta\gamma + \omega - \omega_0)^2}{(\omega - \omega_0)^2 + \gamma^2} \right] \\ &= \frac{\left(\beta + \frac{\omega - \omega_0}{\gamma} \right)^2}{1 + \beta^2} \left[\frac{1}{1 + \left(\frac{\omega - \omega_0}{\gamma} \right)^2} \right], \end{aligned} \quad (4.21)$$

onde β é o grau de assimetria, conhecido como parâmetro de Fano, de maneira que o perfil simétrico *Lorentziano* é recuperado para $\beta \rightarrow \infty$ e tem-se um perfil simétrico *anti-Lorentziano* (antirressonância) para $\beta = 0$. De modo geral, na teoria de Lorenz-Mie, a ressonância de Fano convencional é oriunda da interferência entre duas amplitudes de espalhamento: uma associada à onda de *background* não espalhada (processo de fundo) e a outra associada a uma excitação de um estado discreto (o processo ressonante ou ressonância de plásmons localizados). A energia do estado ressonante deve estar contida no intervalo de energia do contínuo de estados (*background*) para que o efeito Fano ocorra. Próxima à energia de ressonância, a amplitude de espalhamento do processo de fundo varia lentamente em função da energia, enquanto a amplitude de espalhamento ressonante muda rapidamente, tanto em magnitude quanto em fase. É essa variação que cria o *perfil assimétrico*. Aqui, os plásmons localizados, que são excitados pela radiação incidente, são equivalentes aos níveis quânticos *quase-discretos* na abordagem de Fano [54], enquanto a desexcitação radiativa desempenha o mesmo papel do tunelamento entre esses níveis [56]. Dessa maneira, o máximo e o mínimo locais em um espectro de espalhamento correspondem a interferências construtiva e destrutiva entre diferentes modos, respectivamente. Em especial, similarmente à Fig. 4.3, um perfil simétrico *Lorentziano* é sempre observado nas vizinhanças da *ressonância*

de *dipolo* no espalhamento de Lorenz-Mie *diferencial* (isto é, para uma direção específica), enquanto que um perfil de ressonância assimétrica de *Fano* pode ser visto nas vizinhanças da *ressonância de quadrupolo* [55].

4.2.2 Ressonâncias de plásmons-poláritons localizadas

As ressonâncias de dipolo e quadruplo em teoria de espalhamento estão associadas aos modos elétricos da partícula espalhadora, também chamados de ressonâncias *localizadas* de SPPs (plásmons-poláritons de superfície)³². Essas ressonâncias localizadas, formadas por ondas estacionárias de cargas na superfície condutora, provocam um forte aumento de intensidade do campo eletromagnético nas proximidades do centro espalhador [1, 43]. De acordo com a solução de Lorenz-Mie, as ressonâncias localizadas de SPPs podem ser obtidas analiticamente impondo-se que os denominadores dos coeficientes de espalhamento a_n e b_n – os quais são as amplitudes dos momentos de multipolo TM e TE, respectivamente – sejam nulos [1]. Por simplicidade, considere por enquanto o caso limite em que temos uma esfera magnética *homogênea* de raio b (ou seja, $a = b$) proveniente da solução de Aden-Kerker do Capítulo 3. Isso implica $\tilde{D}_n = \tilde{m}_2 D_n(m_1 y) / \tilde{m}_1$ e $\tilde{G}_n = \tilde{m}_1 D_n(m_1 y) / \tilde{m}_2$ nas Eqs. (4.13) e (4.14), de maneira que os coeficientes magnéticos de Lorenz-Mie a_n , b_n , c_n e d_n são recuperados [115]. No limite de pequena partícula comparada com o comprimento de onda incidente ($y = kb \ll 1$), as ressonâncias de plásmons de superfície ($|a_n| \gg 1$) e poláritons magnéticos ($|b_n| \gg 1$) são dadas por $\text{Re}(\varepsilon_1) = -(n+1)\varepsilon_0/n$ e $\text{Re}(\mu_1) = -(n+1)\mu_0/n$, respectivamente, onde $n = 1, 2, \dots$ é o número do modo correspondente às ressonâncias de dipolo, quadrupolo, etc. O modo mais baixo ($n = 1$) corresponde ao modo de *polarização uniforme* ao longo do volume da esfera, e a frequência ω_F na qual $\text{Re}[\varepsilon_1(\omega_F)] = -2\varepsilon_0$ é às vezes chamada de *frequência de Fröhlich* [1].

A condição de Fröhlich para que a ressonância do primeiro modo de superfície se manifeste aparece explicitamente nos denominadores das amplitudes

³² A analogia da qual se valem Bohren & Huffman [1] (página 254) merece ser reproduzida: “(...) Although a plasmon is made up of electrons, it is not an electron: it is a gang, or collection, of electrons that get together under the urging of the long-range Coulomb force and decide to act in concert. Hence, for the purpose of discussing their behavior, they may, like an orchestra or a choir, be considered as a single entity following the same (Coulombic) conductor. In a choir, members are sometimes called upon to sing solos; so it is also in a collection of electrons. (...)”.

dos momentos de dipolo. No limite de Rayleigh ($y \ll 1$ e $m_1 y \ll 1$), obtemos os coeficientes de Lorenz-Mie para a esfera homogênea [115]:

$$a_1 \approx -2i \frac{y^3}{3} (1 - d_1) + \mathcal{O}(y^5) , \quad (4.22)$$

$$b_1 \approx -2i \frac{y^3}{3} (1 - \tilde{m}_1 c_1) + \mathcal{O}(y^5) , \quad (4.23)$$

$$c_1 \approx \frac{3}{\tilde{m}_1 (2 + \mu_1/\mu_0)} + \mathcal{O}(y^2) , \quad (4.24)$$

$$d_1 \approx \frac{3}{2 + \varepsilon_1/\varepsilon_0} + \mathcal{O}(y^2) . \quad (4.25)$$

Essas aproximações dipolares, que são análogas à *primeira aproximação de Born* na mecânica quântica para baixas energias e fracos potenciais [95], são bastante úteis nos cálculos de espalhamento eletromagnético por desprezar os termos de altas ordens não ressonantes ($n > 1$). Neste caso em particular, podemos aplicar essas aproximações no cálculo das eficiências expressas nas Eqs. (3.2)–(3.4) em termos dos campos internos. De fato, para as grandezas complexas $\varepsilon_1 = \varepsilon'_1 + i\varepsilon''_1$ e $\mu_1 = \mu'_1 + i\mu''_1$, onde $i^2 = -1$ e as partes real e imaginária são vinculadas via relações de Kramers-Kronig [1], as eficiências de retroespalhamento e absorção em termos dos coeficientes internos magnéticos c_1 e d_1 , na aproximação de dipolo, são

$$Q_{\text{back}} \approx \frac{9}{y^2} |a_1 - b_1|^2 \approx 4y^4 |d_1 - \tilde{m}_1 c_1|^2 , \quad (4.26)$$

$$Q_{\text{abs}} \approx \frac{4y}{3} \left(\frac{\varepsilon''_1}{\varepsilon_0} |d_1|^2 + \frac{\mu''_1}{\mu_0} |\tilde{m}_1 c_1|^2 \right) . \quad (4.27)$$

Expressar os coeficientes de espalhamento a_1 e b_1 e, conseqüentemente, as eficiências Q em termos dos coeficientes internos c_1 e d_1 é bastante conveniente. No limite de Rayleigh, as médias angulares das intensidades do campo elétrico e magnético podem ser aproximadas por

$$\frac{\langle |\mathbf{E}_1|^2 \rangle_\Omega}{|E_0|^2} \approx |d_1|^2 + \mathcal{O}(\rho_1^2) , \quad (4.28)$$

$$\frac{\langle |\mathbf{H}_1|^2 \rangle_\Omega}{|H_0|^2} \approx |\tilde{m}_1 c_1|^2 + \mathcal{O}(\rho_1^2) , \quad (4.29)$$

as quais sugerem, quando comparadas com as Eqs. (4.26) e (4.27), relações explícitas entre os campos internos e as eficiências de retroespalhamento e de absorção. Em outras palavras, a partir dessas expressões aproximadas em primeira ordem, podemos

analisar os efeitos de ressonância nas seções de choque e suas relações com as intensidades dos campos elétrico e magnético dentro da esfera homogênea. Uma vez que a partícula é magnética ($\mu_1 \neq \mu_0$), temos necessariamente que $b_1 \neq 0$, e, por conseguinte, há interferência entre a_1 e b_1 na eficiência de retroespalhamento. O magnetismo nos permite, portanto, obter interferências entre os coeficientes de Lorenz-Mie na *primeira ordem* de aproximação, um resultado que, até onde sabemos, ainda não foi explorado.

A discussão feita até aqui a respeito das ressonâncias localizadas de SPPs é válida, evidentemente, apenas para esferas homogêneas ($a = b$) ou espalhamento de Lorenz-Mie. Para a solução de Aden-Kerker ($a \neq b$), o limite de pequena partícula ($kb \ll 1$) fornece

$$a_1 \approx \frac{2iy^3}{3} \left[\frac{(\varepsilon_0 - \varepsilon_2)(\varepsilon_1 + 2\varepsilon_2) - (\varepsilon_0 + 2\varepsilon_2)(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)S^3}{(2\varepsilon_0 + \varepsilon_2)(\varepsilon_1 + 2\varepsilon_2) - 2(\varepsilon_0 - \varepsilon_2)(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)S^3} \right] + \mathcal{O}(y^5), \quad (4.30)$$

onde $S = a/b$ é o parâmetro de espessura da camada esférica e b_1 pode ser obtido por meio da substituição de ε por μ . Portanto, as condições para a excitação de primeira ordem dos modos elétricos e magnéticos – divergência de $|a_1|^2$ e $|b_1|^2$ – são, respectivamente:

$$(\varepsilon_2 + 2\varepsilon_0)(\varepsilon_1 + 2\varepsilon_2) = 2S^3(\varepsilon_2 - \varepsilon_0)(\varepsilon_2 - \varepsilon_1), \quad (4.31)$$

$$(\mu_2 + 2\mu_0)(\mu_1 + 2\mu_2) = 2S^3(\mu_2 - \mu_0)(\mu_2 - \mu_1). \quad (4.32)$$

Em certas situações, os mecanismos de ressonância dados pelas Eqs. (4.31) e (4.32) podem ser considerados aproximadamente independentes [80]. Dependendo da escolha dos parâmetros do sistema, um dos modos de ressonância (elétrico ou magnético) é favorecido. Note que, para o “caroço” dielétrico (ε_1, μ_1) e “casca” dispersiva $[\varepsilon_2(\omega), \mu_2(\omega)]$, obtemos dois modos de ressonância para as propriedades elétrica e magnética dos meios, os quais são explicados pela teoria de hibridização de plásmos [53]. Por outro lado, quando temos uma camada dielétrica (ε_2, μ_2) e uma esfera interior dispersiva $[\varepsilon_1(\omega), \mu_1(\omega)]$, há apenas um modo de superfície [67]. De fato, resolvendo a Eq. (4.31) para $\varepsilon_1/\varepsilon_0$, obtemos

$$\frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_0} = -2\frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_0} \left[\frac{(2 + S^3) + (1 - S^3)\varepsilon_2/\varepsilon_0}{2(1 - S^3) + (1 + 2S^3)\varepsilon_2/\varepsilon_0} \right]. \quad (4.33)$$

Tomando agora $(b - a)/a \ll 1$ (limite de pequena espessura) e usando a Eq. (4.28), obtemos na primeira ordem de ressonância a seguinte condição:

$$\frac{\langle |\mathbf{E}_1|^2 \rangle_\Omega}{|E_0|^2} \approx \underbrace{\frac{9}{|2 + \varepsilon_1/\varepsilon_0|^2}}_{\varepsilon_1 = -2\varepsilon_0} = \underbrace{\frac{9}{4(1 - S^3)^2}}_{\varepsilon_2 = \varepsilon_0} \underbrace{\frac{|2(1 - S^3) + (1 + 2S^3)\varepsilon_2/\varepsilon_0|^2}{|1 - \varepsilon_2/\varepsilon_0|^2 |2 + \varepsilon_2/\varepsilon_0|^2}}_{\substack{e \\ \varepsilon_2 = -2\varepsilon_0}}, \quad (4.34)$$

onde temos explicitamente uma ressonância de SPP localizada (LSP) na esfera interior $[\varepsilon_1(\omega_{\text{lsp}}) = -2\varepsilon_0]$ para a camada dielétrica e, do ponto de vista da camada, temos um modo propagante $[\varepsilon_2(\omega_{\text{bulk}}) = \varepsilon_0]$ (*plásmon do bulk*) e um modo de superfície $[\varepsilon_2(\omega_{\text{lsp}}) = -2\varepsilon_0]$ na “casca” dispersiva para um “caroço” dielétrico [1]. Uma análise similar pode ser realizada para o caso limite de grande espessura ($a/b \ll 1$) usando essas mesmas aproximações *eletrostáticas* para a esfera “homogênea”. Evidentemente, esses modos de superfície podem ser deslocados em frequência variando-se continuamente o parâmetro de espessura ($0 < a/b < 1$). Para uma “casca” dielétrica ($\varepsilon_2 > \varepsilon_0$) e um “caroço” dispersivo, temos o intervalo $-2\varepsilon_2 < \varepsilon_1(\omega_{\text{lsp}}) < -2\varepsilon_0$ [67].

É importante mencionar que podemos estudar propriedades ópticas *efetivas* das partículas espalhadoras a partir das aproximações dipolares (limite de Rayleigh) – o que justifica analisarmos primeiro o caso homogêneo e então usá-lo como base para os cálculos. Empregando o argumento mais simples e usual de *teoria de meios efetivos* (teoria de Maxwell Garnett [112]), calculamos da Eq. (4.30) os parâmetros efetivos do meio $(\varepsilon_{\text{eff}}, \mu_{\text{eff}})$ para $y \ll 1$. Esses parâmetros são determinados pela condição de que $Q_{\text{ext}} = 0$ no limite de Rayleigh ($kb \ll 1$) quando $\varepsilon_{\text{eff}} = \varepsilon_0$ e $\mu_{\text{eff}} = \mu_0$, e são dados por:

$$\varepsilon_{\text{eff}} = \frac{\varepsilon_2 [\varepsilon_1 (1 + 2S^3) + 2\varepsilon_2 (1 - S^3)]}{\varepsilon_1 (1 - S^3) + \varepsilon_2 (2 + S^3)}, \quad (4.35)$$

$$\mu_{\text{eff}} = \frac{\mu_2 [\mu_1 (1 + 2S^3) + 2\mu_2 (1 - S^3)]}{\mu_1 (1 - S^3) + \mu_2 (2 + S^3)}. \quad (4.36)$$

Neste limite, as duas esferas concêntricas são “percebidas” pelo campo eletromagnético aplicado como sendo uma única esfera homogênea de raio b e índice de refração efetivo $m_{\text{eff}} = \sqrt{\varepsilon_{\text{eff}}\mu_{\text{eff}}/(\varepsilon_0\mu_0)}$, de forma que podemos reescrever a Eq. (4.30) no caso homogêneo [Eq. (4.22)]:

$$a_1 \approx -\frac{2\eta y^3}{3} \left(\frac{\varepsilon_{\text{eff}} - \varepsilon_0}{\varepsilon_{\text{eff}} + 2\varepsilon_0} \right) + \mathcal{O}(y^5). \quad (4.37)$$

O termo entre parênteses é proporcional à *polarizabilidade elétrica* da partícula, e essa relação de proporcionalidade, dependendo da variável em evidência, é conhecida como *relação de Clausis-Mossotti* (para a permissividade ε), *equação de Lorentz-Lorenz* (para o índice de refração m) ou *fórmula de Maxwell* (para a condutividade σ) [95].

Na prática, podemos obter ressonâncias de Fano por meio de interferências entre os momentos de multipolo elétricos e magnéticos nas seções de choque ou eficiências *diferenciais* (como Q_{back} , por exemplo). Essas interferências de multipolos podem facilmente ser confirmadas pela presença do operador $|\cdot|^2$ na Eq. (3.4), que fornece termos cruzados entre as várias ordens dos coeficientes de Lorenz-Mie a_n e b_n . Calculando a média em todas as direções possíveis de espalhamento, as grandezas de espalhamento tornam-se proporcionais à intensidade e estas interferências do campo desaparecem, como pode ser confirmado nas eficiências de extinção e espalhamento, Eqs. (3.1) e (3.2), respectivamente.

As interferências entre os multipolos a_n e b_n podem ser estudadas a partir dos coeficientes internos aos quais eles se relacionam (via condições de contorno, Apêndice. D.1.1.2). Como um exemplo, considere uma esfera homogênea com os mesmos parâmetros efetivos do metamaterial SRR, estudado no Capítulo 3, Eqs. (3.26) e (3.27). Substituindo os coeficientes aproximados c_1 [Eq. (4.24)] e d_1 [Eq. (4.25)] nas Eqs. (4.28) e (4.29), e definindo os parâmetros $\tilde{\omega}_p = \omega_p/\sqrt{3}$, $\tilde{\gamma} = \gamma/2$, $\tilde{w}_0 = \zeta w_0$, $\tilde{\Gamma} = \zeta^2 \Gamma/2$, $\varrho = 1 + (\tilde{w}_p/\tilde{\gamma})^2/4$, $\alpha = \zeta^2(1 + \zeta)^2/4$, $\beta = \tilde{w}_0(\zeta - 1)/(\zeta\tilde{\Gamma})$, com $\zeta = 1/\sqrt{1 + F/3}$, obtemos

$$\frac{\langle |\mathbf{E}_1|^2 \rangle_\Omega}{|E_0|^2} \approx \varrho \mathcal{L}_{\tilde{\omega}_p, \tilde{\gamma}}(\omega) , \quad (4.38)$$

$$\frac{\langle |\mathbf{H}_1|^2 \rangle_\Omega}{|H_0|^2} \approx \mathcal{L}_{\tilde{\omega}_0, \tilde{\Gamma}}(\omega) + \alpha \mathcal{F}_{\tilde{\omega}_0, \tilde{\Gamma}, \beta}(\omega) , \quad (4.39)$$

onde usamos as aproximações $\omega \approx \tilde{\omega}_p$ e $\omega \approx \tilde{\omega}_0$ nas Eqs. (4.38) e (4.39), respectivamente. Claramente obtemos na Eq. (4.38) um perfil simétrico de ressonância, dada por uma função Lorentziana, definida na Eq. (4.17). Entretanto, na Eq. (4.39), embora a primeira parcela da intensidade magnética média seja uma Lorentziana, a segunda é uma ressonância assimétrica expressa pela fórmula de Fano, Eq. (4.21).

Figura 4.4 – Intensidades elétrica e magnética [Eq. (4.2)] na superfície de uma esfera homogênea ($r = a = b$) de metamaterial SRR [$\varepsilon_1(\omega), \mu_1(\omega)$] [Eqs. (3.26) e (3.27)] e a correspondente eficiência de retroespalhamento Q_{back} [Eq. (3.4)] para $a = 1,0$ mm (limite de Rayleigh). Os parâmetros do metamaterial SRR são os mesmos fornecidos na Seção 3.3.2, com refração negativa de 4 a 6 GHz. O *inset* mostra a correspondente eficiência de espalhamento Q_{sca} , que é proporcional a $(|a_1|^2 + |b_1|^2)$. Apenas Q_{back} exibe interferência entre as amplitudes de dipolo elétrico (a_1) e magnético (b_1) – interferência essa que se manifesta no *campo próximo* no perfil de intensidade magnética.

A FR que aparece no campo magnético próximo, relacionada a $|c_1|^2$, deve ser entendida no contexto de osciladores acoplados, e está relacionado à interferência $a_1 b_1$ no campo distante, como mostramos na Fig. 4.4. Em outras palavras: os coeficientes internos podem nos dar pistas sobre interferências no campo distante. Como demonstraremos na Seção a seguir, o oposto também acontece: uma ressonância em um único coeficiente de espalhamento (por exemplo, $|a_1|^2$), pode estar vinculada a uma interferência “escondida” no campo próximo (ressonância de Fano não convencional). Em particular, note que embora Q_{back} exiba um perfil do tipo Fano para a esfera homogênea, o mesmo não acontece com Q_{sca} , uma vez que a interferência $a_1 b_1$ é eliminada pela média em todas as direções e polarizações.

4.3 Ressonância de Fano não convencional

A identificação das ressonâncias de Fano convencionais (FRs) em sistemas plasmônicos, como vimos na analogia com os osciladores acoplados [Seção 4.2.1] e demonstramos na Fig. 4.4, requer observáveis que sejam sensíveis a interferências ondulatórias. Consequentemente, no espalhamento eletromagnético por uma esfera homogênea, as FRs não ocorrem nas eficiências de extinção (Q_{ext}) e de espalhamento (Q_{sca}) – e, por conseguinte, na eficiência de absorção (Q_{abs}) –, uma vez que essas grandezas são proporcionais à soma das intensidades dos campos espalhados [55]. Isso ocorre porque tanto Q_{ext} quanto Q_{sca} são grandezas definidas a partir de médias entre todas as direções e polarizações possíveis, de forma que as propriedades de ressonância de espalhamento são, também, médias, não contemplando interferências entre multipolos de ordens distintas. Por esta razão, as FRs em nanoesferas homogêneas são esperadas ocorrer apenas nas seções de choque diferenciais, em direções particulares de espalhamento, como mostrado na Fig. 4.4. No entanto, para esferas concêntricas, as interferências ondulatórias que levam, em última instância, às ressonâncias assimétricas do tipo Fano podem mostrar-se na eficiência de absorção Q_{abs} mesmo que Q_{ext} e Q_{sca} não contenham explicitamente termos de interferência. Para demonstrarmos isso, note que podemos escrever explicitamente Q_{abs} em termos dos modos eletromagnéticos internos, como fizemos na Eq. (4.27) e, de forma exata, no Capítulo 3, na Eq. (3.31). De fato, definindo o volume $V_q = 4\pi(l_2^3 - l_1^3)/3$, onde $(l_1, l_2) = (0, a)$ para a esfera interior ($q = 1$) e $(l_1, l_2) = (a, b)$ para a camada esférica ($q = 2$), podemos calcular a intensidade média no volume usando a definição:

$$\langle |\mathbf{F}|^2 \rangle_{V_q} = \frac{1}{V_q} \int_{l_1}^{l_2} dr \, r^2 \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^1 d(\cos \theta) |\mathbf{F}|^2 = \frac{3}{(l_2^3 - l_1^3)} \int_{l_1}^{l_2} dr \, r^2 \langle |\mathbf{F}|^2 \rangle_{\Omega} , \quad (4.40)$$

onde a média angular $\langle \cdot \rangle_{\Omega}$ está definida nas Eqs. (4.2) e (4.3), e a integral radial que aparece na Eq. (4.40) tem solução analítica [108] – Eqs. (3.13) e (3.14). Uma vez que $\varepsilon_q = \varepsilon'_q + i\varepsilon''_q$ e $\mu_q = \mu'_q + i\mu''_q$, e usando as relações entre Q_{abs} e a potência dissipada (Apêndice C.2), $P_{E_q} = \omega \varepsilon''_q \int_{V_q} d^3r |\mathbf{E}_q|^2 / 2$ e $P_{H_q} = \omega \mu''_q \int_{V_q} d^3r |\mathbf{H}_q|^2 / 2$, obtemos:

$$Q_{\text{abs}} = \frac{4}{3} y \left[\left(\frac{\varepsilon''_1}{\varepsilon_0} \frac{\langle |\mathbf{E}_1|^2 \rangle_{V_1}}{|E_0|^2} + \frac{\mu''_1}{\mu_0} \frac{\langle |\mathbf{H}_1|^2 \rangle_{V_1}}{|H_0|^2} \right) S^3 \right]$$

$$+ \left(\frac{\varepsilon_2''}{\varepsilon_0} \frac{\langle |\mathbf{E}_2|^2 \rangle_{V_2}}{|E_0|^2} + \frac{\mu_2''}{\mu_0} \frac{\langle |\mathbf{H}_2|^2 \rangle_{V_2}}{|H_0|^2} \right) (1 - S^3) \Bigg], \quad (4.41)$$

com $S \equiv a/b$ sendo a razão de espessura ou de aspecto. Inspecionando a expressão para as intensidades do campo interno à camada [Eq. (4.3)], nota-se que a Eq. (4.41) contém termos cruzados, tais como $f_n v_n^*$ e $g_n w_n^*$, os quais, fisicamente, representam interferência entre modos internos dentro da camada. Este resultado mostra que as ressonâncias do tipo Fano, mesmo que não sejam as convencionais (isto é, interferências entre multipolos de *ordens distintas* no campo distante), possam ser detectadas em Q_{abs} (ou Q_{sca} e Q_{ext} , via conservação de energia) para esferas revestidas.

Para esferas homogêneas, as *ressonâncias de Fano não convencionais* (UFRs) resultam da interferência entre diferentes modos eletromagnéticos (um contínuo) com o mesmo momento de multipolo (o dipolo, por exemplo), de forma que elas se mostram em Q_{ext} [149, 154]. Essas UFRs são esperadas existir tanto em esferas homogêneas com grandes permissividades elétricas ($|\varepsilon| \gg \varepsilon_0$), isto é, fora da aproximação de Rayleigh, quanto em partículas com dispersão espacial [149]. No primeiro caso, tais ressonâncias ocorrem devido à interferência de dois modos “dipolares” (eles estão fora do limite de Rayleigh e, portanto, carregam informação de outros modos eletromagnéticos³³): o modo ressonante (excitado em um valor elevado de permissividade dielétrica) e um modo de Rayleigh fora da ressonância. O comportamento das UFRs em esferas revestidas foi apenas recentemente reportado e é um de nossos principais resultados [83].

Para estabelecer as condições para a ocorrência das UFRs em esferas revestidas, vamos examinar as ressonâncias nos momentos multipolares a_1 e b_1 , que estão relacionados aos modos de superfície de primeira ordem. Da Eq. (4.30), correspondente ao primeiro modo de Fröhlich para esferas revestidas no limite de Rayleigh ($y \ll 1$, $|m_1|x \ll 1$ e $|m_2|y \ll 1$), reescrevemos o coeficiente de

³³ Há uma sutileza na teoria de Lorenz-Mie e que, muitas vezes, passa despercebida: os coeficientes de espalhamento a_n e b_n , também chamados de momentos de multipolo de ordem n em razão da expansão em ondas parciais esféricas ou cilíndricas, fornecem as amplitudes dos respectivos modos elétricos (a_n) e magnéticos (b_n) *apenas* no limite de Rayleigh. Isso significa que, fora do limite de pequena partícula (satisfeito por nanoesferas, por exemplo), o coeficiente a_1 carrega informações não apenas do modo elétrico correspondente ao dipolo, mas também de ordens mais elevadas, como no caso de partículas magnéticas ou com grandes permissividades. Nesse caso, a_1 passa a depender não mais da permissividade apenas, mas do índice de refração.

espalhamento dipolar:

$$a_1 \approx -\frac{2iy^3}{3} \left[\frac{\varepsilon_2/\varepsilon_0 - (1 - S^3)/(1 + 2S^3)}{\varepsilon_2/\varepsilon_0 + 2(1 - S^3)/(1 + 2S^3)} \right] \left(\frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_1^{(\text{ant})}}{\varepsilon_1 - \varepsilon_1^{(\text{res})}} \right) + \mathcal{O}(y^5), \quad (4.42)$$

de maneira que $\varepsilon_1^{(\text{ant})}$ e $\varepsilon_1^{(\text{res})}$ são os valores de ε_1 que fazem o numerador (*antirressonância*) ou denominador (*ressonância*) de a_1 anularem-se, respectivamente. Consideramos aqui a configuração ilustrada na Fig. 4.1: apenas o caroço é dispersivo [$\varepsilon_1 = \varepsilon_1(\omega)$], sendo o modo de Fröhlich determinado por $\varepsilon_1(\omega_F) = \varepsilon_1^{(\text{res})}$. Supondo que os meios são fracamente absorptivos ($\varepsilon_q'' \ll \varepsilon_q'$), obtemos

$$|a_1(\omega)|^2 \propto \left[\frac{\varepsilon_1(\omega) - \varepsilon_1^{(\text{ant})}}{\varepsilon_1(\omega) - \varepsilon_1^{(\text{res})}} \right]^2 = \frac{[\beta(\varepsilon_1) + X(\varepsilon_1)]^2}{1 + X(\varepsilon_1)^2}, \quad (4.43)$$

onde $X(\varepsilon_1) \equiv (\varepsilon_1 - \tilde{\omega}_0)/\sqrt{\tilde{\gamma}^2 - 2\tilde{\gamma}(\varepsilon_1 - \tilde{\omega}_0)}$ e $\beta(\varepsilon_1) \equiv \tilde{\gamma}/\sqrt{\tilde{\gamma}^2 - 2\tilde{\gamma}(\varepsilon_1 - \tilde{\omega}_0)}$, com $\tilde{\omega}_0 = [\varepsilon_1^{(\text{res})} + \varepsilon_1^{(\text{ant})}]/2$ e $\tilde{\gamma} = [\varepsilon_1^{(\text{res})} - \varepsilon_1^{(\text{ant})}]/2$. Uma pequena “dessintonia” entre os parâmetros de ressonância e antirressonância, $|\tilde{\gamma}/\varepsilon_0| \ll 1$ (obtidos para $S \ll 1$), implica que $X(\varepsilon_1) \approx (\varepsilon_1 - \tilde{\omega}_0)/|\tilde{\gamma}|$ e $\beta \approx \tilde{\gamma}/|\tilde{\gamma}|$, para $\varepsilon_1(\omega) \approx \tilde{\omega}_0$. Nesta situação, $|a_1|^2$, como uma função de $\varepsilon_1(\omega)$, é uma ressonância do tipo Fano, caracterizada pelo seguinte formato de linha (normalizado) [55]:

$$\mathcal{F}_\beta(X) = \frac{(\beta + X)^2}{(1 + \beta^2)} \frac{1}{(1 + X^2)}, \quad (4.44)$$

com β sendo o parâmetro de assimetria, como na Eq. (4.21). Este resultado mostra que é possível obter uma UFR no limite dipolar, ou seja, sem a necessidade de considerarmos multipolos de ordem superior. Em nossa analogia com osciladores acoplados da Seção 4.2.1, tudo se passaria aqui como se *ambos* os osciladores sofressem a ação de uma mesma força externa. Observe ainda que a condição de pequena razão de aspecto ($S = a/b \ll 1$), isto é, um volume grande de camada dielétrica em relação ao caroço dispersivo, é necessária para obtermos ressonâncias com perfil da Eq. (4.44).

Na Fig. 4.5(a), plotamos a eficiência de espalhamento Q_{sca} para uma esfera revestida no limite de Rayleigh ($y \ll 1$, $|m_1|x \ll 1$ e $|m_2|y \ll 1$) em função da permissividade elétrica do caroço ($\varepsilon_1, \mu_1 = \mu_0$) na vizinhança de uma ressonância dipolar. Este gráfico confirma que $|a_1|^2$ exhibe uma ressonância de Fano não

convencional, que é bem descrita pelo perfil de Fano, Eq. (4.44). Ainda, o gráfico na Fig. 4.5(a) demonstra que, para esferas revestidas sem dispersão espacial, a existência das ressonâncias de Fano *não necessariamente* requerem grandes valores de permissividades elétricas, uma situação que é tipicamente difícil de se obter com materiais naturais. Este resultado está em contraste com o caso das esferas homogêneas, onde tais ressonâncias são previstas ocorrer apenas fora do limite de Rayleigh, obrigatoriamente [149]. De fato, o gráfico na Fig. 4.5(a) mostra que ressonâncias de Fano não convencionais no espalhamento eletromagnético por esferas revestidas podem existir mesmo no limite de Rayleigh ($y \ll 1$, $|m_1|x \ll 1$ e $|m_2|y \ll 1$), corroborando o resultado analítico indicado na Eq. (4.43).

O efeito da dissipação finita é investigado na Fig. 4.5(b), onde Q_{sca} é plotada em função da parte real da permissividade do caroço dispersivo (ε'_1), para diferentes valores de sua parte imaginária (ε''_1), nas vizinhanças das ressonâncias dipolares que resultam no perfil de Fano em $|a_1|^2$. Essa análise é necessária uma vez que, mesmo não usando um modelo dispersivo em particular (estamos apenas assumindo ε_1 dependente da frequência na aproximação de parâmetros de tamanho constantes), a dispersão impõe a existência de dissipação em meios dispersivos causais via relações de Kramers-Kronig [1]. Da Fig. 4.5(b), fica evidente que as UFRs são bastante robustas em relação às perdas eletromagnéticas (absorção), uma vez que elas não são completamente destruídas na presença de dissipação.

Para esferas homogêneas, as UFRs em $|a_1|^2$ manifestam-se não apenas na eficiência de espalhamento Q_{sca} , mas também na eficiência de extinção Q_{ext} mesmo na presença de dissipação finita [149]. Para esferas revestidas no limite de Rayleigh, com $S \ll 1$, o gráfico na Fig. 4.5(a) revela que a extinção é dominada pela absorção, isto é, tipicamente $Q_{\text{sca}} \ll Q_{\text{abs}}$, de forma que $Q_{\text{ext}} \approx Q_{\text{abs}}$, mesmo na aproximação de meios fracamente absorptivos. Verificamos numericamente que $Q_{\text{sca}} \approx (kb)^3 Q_{\text{abs}}$ nas regiões fora da ressonância. Esse é um resultado esperado e bastante conhecido em teoria de espalhamento por esferas homogêneas *suficientemente pequenas*³⁴ de raio R , onde $Q_{\text{abs}} \propto kR$ e $Q_{\text{sca}} \propto (kR)^4$ – veja Eq. (4.26) e (4.27). Consequentemente, as UFRs em Q_{sca} tendem a não ser notadas em Q_{ext} , visto que Q_{abs} exibe um

³⁴ Dentre outros fenômenos, esse resultado é usado para explicar classicamente a dependência $1/\lambda^4$ do espalhamento de Rayleigh na alta atmosfera e a cor azul do céu.

Figura 4.5 – Eficiência de espalhamento Q_{sca} nas vizinhanças da ressonância de dipolo elétrico para uma esfera plasmônica ($\epsilon_1; \mu_1 = \mu_0$) revestida com uma camada dielétrica com perdas ($\epsilon_2/\epsilon_0 = 3,4 + 0,001i; \mu_2 = \mu_0$) em função de ϵ_1 no limite de pequenas partículas (parâmetros de tamanho $ka = 10^{-4}$, $kb = 10^{-2}$). (a) A ressonância de dipolo para um caroço sem perdas ($\epsilon_1 = \epsilon_1'$) é bem descrita por um perfil do tipo Fano, Eq. (4.44) (linha pontilhada). O *inset* mostra a eficiência de absorção em função de ϵ_1 . (b) Q_{sca} em função da parte real da permissividade elétrica do caroço (ϵ_1') para diferentes valores de sua parte imaginária (ϵ_1'') nas vizinhanças das ressonâncias de dipolo. A escala vertical está dividida em incrementos de 2×10^{-12} .

perfil Lorentziano nas vizinhanças da ressonância de dipolo em $|a_1|^2$. O perfil Lorentziano é exibido em Q_{abs} , a despeito das interferências de multipolos internos mostrados na Eq. (4.41), porque estamos no limite de fraca absorção ($\varepsilon_2'' \ll \varepsilon_2'$) em pequenas partículas ($kb \ll 1$): as ressonâncias em Q_{abs} são “*deltas de Dirac*”, essencialmente. Disso concluímos que para a observação das UFRs no espectro de extinção, no caso do espalhamento por esferas dispersivas recobertas por um dielétrica na aproximação $S \ll 1$, é necessário $Q_{\text{ext}} \approx Q_{\text{sca}}$. Esta condição pode ser encontrada impondo-se $ka \ll 1$ para o caroço e que kb seja grande o bastante para apenas amplificar a ressonância de dipolo, mas pequeno o suficiente para assegurar a validade da aproximação de primeira ordem. Em outras palavras, saímos no limite de Rayleigh (apenas na camada) para amplificar o efeito Fano *já existente* na interação dipolo-dipolo.

Enfatizamos que as UFRs em esferas revestidas não são um resultado de interferências entre modos plasmônicos de *diferentes* estruturas do sistema (no caso, esfera e camada), como é geralmente esperado para nanopartículas estratificadas [55]. Em contraste, a ressonância do tipo Fano em Q_{sca} no limite de Rayleigh [Fig. 4.5(a)] ocorre devido às interferências entre as ondas parciais *dentro* da camada. Essas interferências surgem das ondas parciais geradas pelas funções esféricas de Bessel e de Neumann na camada de revestimento. Dentro do caroço, entretanto, as interferências entre as ondas estacionárias são oriundas apenas das funções de Bessel, uma vez que a função de Neumann diverge na origem. A existência dessas interferências de ondas parciais, que eventualmente levam às UFRs em Q_{sca} , é confirmada pelas expressões analíticas para as médias angulares das intensidades dentro do caroço e da camada, Eqs. (4.2) e (4.3), respectivamente. De fato, a Eq. (4.3) mostra interferências entre os coeficientes dos campos internos que ponderam os harmônicos gerados pelas funções de Bessel e de Neumann, e que estão associados aos coeficientes de espalhamento pela condição de contorno (Apêndice D.1.1.2):

$$a_n = \frac{\psi_n(y)}{\xi_n(y)} - \frac{[\psi_n(m_2 y) - A_n \chi_n(m_2 y)]}{\xi_n(y) \mu_2 / \mu_0} g_n . \quad (4.45)$$

A condição correspondente para b_n é obtida substituindo-se (a_n, A_n) por (b_n, B_n) e $(\mu_2 / \mu_0, g_n)$ por (m_2, f_n) . Trivialmente, a Eq. (4.45) confirma que as ressonâncias

associadas a $|a_n|^2$ contêm termos de interferência entre os coeficientes internos g_n (harmônicos de Bessel) e $w_n = A_n g_n$ (harmônicos de Neumann) da camada. A presença desses termos de interferência, tais como $g_1^* w_1 = A_1^{-1} |w_1|^2$, mostra que A_1^{-1} fora da ressonância pode desempenhar o papel de um contínuo (*background*) que interfere com uma ressonância estreita em w_1 . Como os denominadores de a_1 e w_1 são o mesmo [veja as Eqs. (4.5) e (4.12)] e $A_1 \ll 1$ em regiões fora da ressonância para $x \ll 1$, uma UFR em $|a_1|^2$ pode ocorrer para esferas revestidas mesmo no limite de Rayleigh. De fato, para uma camada dielétrica e caroço dispersivo no limite de Rayleigh, tem-se $|\tilde{\gamma}/\varepsilon_0| \ll 1$ se $S \ll 1$; neste caso, A_1^{-1} desempenha o papel de “contínuo” no efeito Fano e $a_1 \approx iy^3[1 - (\varepsilon_2/\varepsilon_0)g_1]/3$, com $|g_1|^2 = g_1^* w_1 A_1^{-1}$.

Figura 4.6 – Eficiência de espalhamento Q_{sca} em função da permissividade elétrica do caroço ε_1 . O caroço metálico é não absorutivo (com $\mu_1 = \mu_0$) e é revestido por uma camada dielétrica absorativa ($\varepsilon_2/\varepsilon_0 = 3,4 + 0,004i$; $\mu_2 = \mu_0$), com parâmetros de tamanho $ka = 0,2$ e $kb = 1$, respectivamente, nas vizinhanças da ressonância de dipolo. A linha sólida representa Q_{sca} calculado a partir da teoria de Lorenz-Mie, mostrando que a ressonância de dipolo exibe um perfil do tipo Fano. A linha pontilhada representa Q_{sca} calculado usando os coeficientes a_n e b_n sem os termos de interferência associados a $g_n^* w_n A_n^{-1}$, $g_n^* w_n$, $\psi_n(y) w_n A_n^{-1}$, $\psi_n(y) w_n$, e seus complexos conjugados na Eq. (4.45); neste caso a ressonância de dipolo tem um perfil Lorentziano.

Figura 4.7 – Esquema de hibridização de modos plasmônicos em esferas revestidas por camadas metálicas e geração de ressonâncias de Fano devido à sobreposição espectral de modos ligantes (ω_b) e antiligantes (ω_a). Em partículas dielétricas com revestimentos metálicos, há interferência entre duas excitações localizadas de plásmons-polártons de superfície (SPPs) associadas às interfaces *metal*-dielétrico, a saber, *camada*-caroço e *camada*-meio externo. Essa interferência pode ser interpretada como a sobreposição dos “estados de energia” de uma esfera dielétrica em um meio plasmônico (ω_c) com uma esfera plasmônica em um meio dielétrico (ω_s), ambos sistemas que suportam SPPs. As diferenças de fase entre as excitações nas duas interfaces da partícula levam a interferências destrutivas e construtivas, responsáveis pelo efeito Fano. O gráfico de Q_{sca} é apenas qualitativo e mostra a sobreposição espectral das excitações ω_b e ω_a . Figura adaptada da Ref. [40].

Para confirmarmos que as UFRs são devidas à presença de termos de interferência, plotamos na Fig. 4.6 a eficiência de espalhamento Q_{sca} nas vizinhanças da ressonância de dipolo, com e sem os termos de interferência da Eq. (4.45). Note que quando Q_{sca} é calculada usando os coeficientes $|a_n|^2$ e $|b_n|^2$ sem os termos de interferência $g_n^* w_n A_n^{-1}$, $g_n^* w_n$, $\psi_n(y) w_n A_n^{-1}$, $\psi_n(y) w_n$ e seus complexos conjugados, a ressonância de dipolo tem um perfil *Lorentziano*. Em contraste, quando esses termos de interferência são levados em conta nos cálculos, a ressonância de dipolo em Q_{sca} exibe um perfil de Fano, como é mostrado na Fig. 4.6. Os termos de

interferência correspondentes em $|b_n|^2$ [quais sejam, $f_n^* v_n B_n^{-1}$, $f_n^* v_n$, $\psi_n(y) v_n B_n^{-1}$, $\psi_n(y) v_n$ e complexos conjugados] não contribuem para o efeito Fano no caso *não magnético*. Este resultado demonstra que a origem da UFR é de fato relacionada à presença de termos de interferência na ressonância de dipolo, via Eq. (4.45).

É interessante observarmos que, no caso de uma nanocamada metálica e um caroço dielétrico, um resultado similar e qualitativo já era conhecido na teoria de hibridização de plásmons e foi usado recentemente para explicar a UFR [40]. Neste caso, as interferências entre modos internos que observamos na camada, originadas pelas ondas parciais de Bessel e Neumann, explicariam a hibridização de plásmons de superfície nas duas interfaces do sistema, responsáveis pelos estados ligantes não ressonantes e antiligantes ressonantes. O que obtivemos em nosso trabalho foi um análogo para uma camada dielétrica, mostrando, portanto, que o efeito de hibridização plasmônica pode ser visto do ponto de vista puramente ondulatório via interferência de modos de Bessel e Neumann. Um esquema de hibridização em camadas plasmônicas é reproduzido na Fig. (4.7).

4.3.1 Aumento de intensidade do campo fora da ressonância

Para esferas revestidas consistindo de materiais metálicos e dielétricos, foi demonstrado que as ressonâncias de Fano convencionais (FRs) estão na origem do aumento de intensidade do campo próximo fora da ressonância de espalhamento – os chamados “estados escuros”. Devido ao efeito Fano, oriundo da hibridização de plásmons ou por efeitos polaritônicos do dielétrico na camada, o máximo aumento de intensidade do campo dentro do centro espalhador não necessariamente corresponde a uma ressonância na eficiência de extinção, ao contrário do que afirma a teoria clássica de Lorenz para esferas homogêneas-Mie [67].

No gráfico da Fig. 4.8(a), investigamos em que situação as ressonâncias de Fano não convencionais (UFRs) podem induzir um efeito similar – dessa vez, não apenas em Q_{back} (direção específica de espalhamento), mas também em Q_{sca} . Como $Q_{\text{ext}} = Q_{\text{sca}} + Q_{\text{abs}}$, apenas as eficiências Q_{sca} e Q_{abs} são calculadas para uma esfera metálica não absorviva ($\varepsilon_1 < 0; \mu_1 = \mu_0$) revestida por uma camada dielétrica ($\varepsilon_2/\varepsilon_0 = 3,4 + 0,004i; \mu_2 = \mu_0$) em função de ε_1 . O perfil assimétrico de Q_{sca} nas vizinhanças do dipolo elétrico é resultado do efeito Fano não convencional,

Figura 4.8 – Ressonâncias de Fano e aumento de campo fora da ressonância (“estado escuro”) para uma esfera metálica não absorptiva ($\epsilon_1/\epsilon_0 < 0$; $\mu_1 = \mu_0$) revestida por uma camada dielétrica ($\epsilon_2/\epsilon_0 = 3,4 + 0,004i$; $\mu_2 = \mu_0$) com parâmetros de tamanho $ka = 0,2$ e $kb = 1$. (a) Q_{sca} e Q_{abs} em função de ϵ_1 . A linha vertical pontilhada indica a posição da ressonância de Fano não convencional (UFR). O *inset* mostra a eficiência de retroespalhamento Q_{back} em função de ϵ_1 nas vizinhanças da ressonância de quadrupolo – ressonância de Fano convencional (FR). (b) Média angular da intensidade do campo elétrico em função da distância radial ao centro da esfera revestida para $\epsilon_1/\epsilon_0 = -7,91$ (ressonância de dipolo), $\epsilon_1/\epsilon_0 = -7,85$ (UFR), $\epsilon_1/\epsilon_0 = -7,32$ (Fano *dip*) e $\epsilon_1/\epsilon_0 = -5,27$ (FR).

uma vez que resulta da interferência entre duas ressonâncias de dipolo (exibida em ressonância em $|a_1|^2$). A frequência em que a URF ocorre corresponde a $\varepsilon_1/\varepsilon_0 = -7,85$, que é um valor escolhido entre o máximo e o mínimo de espalhamento (interferências construtiva e destrutiva): $\varepsilon_1/\varepsilon_0 = -7,91$ (ressonância de dipolo) e $\varepsilon_1/\varepsilon_0 = -7,32$ (antirressonância ou mínimo de espalhamento), respectivamente. Por simplicidade, nos referimos ao mínimo de espalhamento na curva de Fano como “Fano *dip*”. O valor $\varepsilon_1/\varepsilon_0 = -7,85$ corresponde ao pico de absorção em Q_{abs} , o qual, pela Eq. (4.41), está relacionado ao máximo aumento de campo dentro do centro espalhador. Esse resultado demonstra que as ressonâncias de Fano não convencionais podem também levar a um aumento de campo fora da ressonância (*estados escuros*). Essa conclusão é corroborada pela análise do gráfico na Fig. 4.8(b), que mostra a média angular do campo elétrico no interior do centro espalhador em função da distância ao centro da esfera revestida para diferentes valores de ε_1 . Como se nota, o máximo aumento de intensidade do campo interno não corresponde ao máximo de espalhamento, ocorrendo para $\varepsilon_1/\varepsilon_0 = -7,85$, que é precisamente a posição da URF e o pico em Q_{abs} .

O gráfico na Fig. 4.8(a) também revela a existência de uma UFR em $\varepsilon_1/\varepsilon_0 = -5,27$. Ela aparece na eficiência de retroespalhamento Q_{back} [veja o *inset* da Fig. 4.8(a)] e resulta da interferência entre um dipolo não ressonante e uma ressonância estreita de quadrupolo, como discutido na Ref. [67]. Usando a Eq. (4.41) e o fato da ressonância em Q_{back} não aparecer como um pico em Q_{sca} (ela foi eliminada pela média angular), podemos concluir que essa UFR está relacionada a um possível *estado escuro*, o qual é verificado na Fig. 4.8(b). Para esses parâmetros, podemos ver do gráfico na Fig. 4.8(b) que o aumento de campo fora da ressonância associado à FR é aproximadamente uma ordem de magnitude menor do que aquele encontrado para UFR. Tirante a dependência óbvia com relação aos parâmetros que escolhemos para a análise, podemos explicar parcialmente esse resultado através da observação de que o efeito Fano não convencional (UFR) envolve duas ressonâncias de dipolo ($a_1 a_1^*$) enquanto o efeito Fano convencional (FR) envolve ressonâncias de dipolo e quadrupolo ($a_1 a_2^*$), que são de ordem mais alta ($n = 2$). No entanto, é preciso notar que a energia armazenada na ressonância de quadrupolo depende crucialmente da absorção no caroço ($\varepsilon_1; \mu_1 = \mu_0$) e na

camada ($\varepsilon_2/\varepsilon_0 = 3,4 + 0,004i$; $\mu_2 = \mu_0$). Se $\varepsilon_2''/\varepsilon_0 < 0,004$ no exemplo de caroço sem perdas ($\varepsilon_1'' = 0$), pode obter-se, na ressonância de quadrupolo, uma energia eletromagnética armazenada na partícula maior do que na ressonância de dipolo. Todavia, nesse caso pouco realista de um dielétrico completamente transparente, a ressonância de quadrupolo apareceria como um pico em Q_{sca} (“delta de Dirac”). Isso indica que, para uma camada dielétrica sem perdas, uma absorção finita no caroço dispersivo é necessária para minimizar o espalhamento na ressonância de quadrupolo no limite de pequena partícula, condição essa que sempre é satisfeita para meios dispersivos causais [93]. Ainda, para um caroço metálico e uma camada dielétrica, um aumento de intensidade do campo fora da ressonância de espalhamento nas vizinhanças do quadrupolo surge apenas para $S \ll 1$ [67], que é a mesma condição que obtivemos para as UFRs em esferas concêntricas, Eq. (4.43). Esse resultado sugere a possibilidade de combinarmos estes dois efeitos de interferência (FR e UFR em esferas concêntricas) no sentido de maximizar o aumento de campo fora da ressonância de espalhamento.

Embora as FRs em Q_{back} existam mesmo para esferas homogêneas [55], ressonâncias de quadrupolo “escondidas” em Q_{sca} (elas aparecem apenas em Q_{abs} e levam a um aumento de campo fora da ressonância) são usualmente obtidas em partículas heterogêneas, como mostramos aqui para esferas revestidas. De fato, na solução de Aden-Kerk do Capítulo 3, para um parâmetro de tamanho kb em regiões fora da ressonância, temos que $ka \ll 1$ leva a $|A_n| \ll 1$ e $|B_n| \ll 1$, onde A_n e B_n estão definidos nas Eqs. (4.15) e (4.16). Obter condições de ressonância para as funções A_n e B_n é importante à discussão, uma vez que, em última análise, quando essas funções são *identicamente* nulas, recuperamos a solução da esfera homogênea (Lorenz-Mie). São elas, portanto, que estão na origem dos *estados escuros*, os quais não observados na solução clássica de Lorenz-Mie para a esfera homogênea.

No limite de Rayleigh, obtemos as seguintes aproximações:

$$A_1 \approx -2(m_2x)^3 \left(\frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{\varepsilon_1 + 2\varepsilon_2} \right) \left[\frac{1}{3} + \frac{(m_2x)^2}{5} \left(\frac{\varepsilon_1 - 2\varepsilon_2}{\varepsilon_1 + 2\varepsilon_2} \right) \right] + \mathcal{O}(x^7), \quad (4.46)$$

$$A_2 \approx -\frac{(m_2x)^5}{15} \left(\frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{2\varepsilon_1 + 3\varepsilon_2} \right) + \mathcal{O}(x^7). \quad (4.47)$$

Assim, ressonâncias em A_1 e A_2 são obtidas quando as partes reais de seus denominadores são nulas: $\varepsilon_1'(\omega) = -2\varepsilon_2'$ e $\varepsilon_1'(\omega) = -3\varepsilon_2'/2$, respectivamente. Se

não existe absorção ($\varepsilon_1'' = \varepsilon_2'' = 0$), para um $x = ka$ finito, ambos A_1 e A_2 divergem na ressonância e não há ressonância de quadrupolo “escondida” em Q_{sca} . Em vez disso, uma ressonância estreita é observada em $|a_2|^2$. Considere agora um meio fracamente absorptivo tal que o primeiro termo na Eq. (4.46) não depende de ka na ressonância de dipolo: $x^3 \approx (\varepsilon_1'' + 2\varepsilon_2'')/\varepsilon_0$. Isso leva a $x^5 \ll (2\varepsilon_1'' + 3\varepsilon_2'')/\varepsilon_0$, de forma que a Eq. (4.47) é parcialmente suprimida na ressonância de quadruplo, enquanto o segundo termo dentro dos colchetes na Eq. (4.46) fornece $A_1 \sim 1/x$ em regiões fora da ressonância e está associado ao dipolo não ressonante a_1 . Portanto, nesta aproximação, a ressonância de dipolo é grande comparada a de quadruplo em Q_{sca} e pode obter-se interferência entre a_1 e a_2 em Q_{back} . Esse resultado, embora aproximado e indireto (olhamos para A_1 e A_2 em vez de a_1 e a_2), fornece uma condição simples para a obtenção de “estados escuros” no limite de pequena partícula. De fato, no gráfico das Figs. 4.8, supomos $x^3 = (\varepsilon_1'' + 2\varepsilon_2'')/\varepsilon_0 = 8 \times 10^{-3}$, e condições similares podem ser obtidas para outros carcos dispersivos.

4.3.2 Estados escuros e refração negativa

Muitas aplicações em fotônica dependem crucialmente da amplificação e confinamento da energia eletromagnética em pequenos volumes e com pouca absorção. Na Seção anterior, demonstramos que as UFRs em Q_{sca} levam a um grande aumento de campo fora da ressonância, até mesmo maiores do que as encontradas para as FRs em Q_{back} . No intuito de obtermos um aumento *ótimo* de intensidade de campo eletromagnético dentro da esfera revestida, vamos investigar as condições para a ocorrência simultânea das FRs e UFRs na mesma frequência de excitação. Com esta finalidade, consideramos um carco plasmônico dispersivo $[\varepsilon_1(\omega), \mu_1(\omega)]$ revestido por uma camada dielétrica não dispersiva ($\varepsilon_2; \mu_2 = \mu_0$) e impomos que a ressonância dipolar em $|a_1|^2$ coincide com a ressonância quadrupolar em $|a_2|^2$ na mesma frequência $\bar{\omega}$. A antirressonância em $|a_1|^2$ (Fano *dip*), para $ka \ll 1$ (*i.e.* $S \ll 1$) e $|m_2| \approx 1$, coincide *aproximadamente* com a antirressonância em A_1 [cujo inverso desempenha o papel de um processo não ressonante de fundo (*background* ou contínuo) no efeito Fano não convencional]: $\tilde{m}_2 D_1(m_1 x) = \tilde{m}_1 D_1(m_2 x)$. A partir dessa expressão, podemos notar que no meio não magnético ($\tilde{m}_q = m_q$) a condição $A_1 = 0$ pode ser satisfeita apenas para $m_1 = m_2$, ou seja, para esferas homogêneas.

Figura 4.9 – Ressonâncias de Fano não convencionais (UFRs) e convencionais (FRs) e sua relação com o aumento de campo próximo (intensidade) fora da ressonância de espalhamento para uma esfera não absorptiva com índice de refração negativo ($\epsilon_1/\epsilon_0 < 0$; $\mu_1/\mu_0 = -21$) revestida por uma camada dielétrica ($\epsilon_2/\epsilon_0 = 3,4 + 0,004i$; $\mu_2 = \mu_0$) com parâmetros de tamanho $ka = 0,2$ e $kb = 1$, respectivamente. (a) Q_{sca} e Q_{abs} em função de ϵ_1 . A linha vertical tracejada indica a posição da UFR. (b) Média angular da intensidade elétrica em função da distância radial para $\epsilon_1/\epsilon_0 = -4,44$ (ressonância de dipolo), $\epsilon_1/\epsilon_0 = -4,42$ (UFR) e $\epsilon_1/\epsilon_0 = -4,27$ (Fano dip).

Como esferas homogêneas não exibem aumento de intensidade de campo fora da ressonância devido ao efeito Fano convencional [67], para o propósito de auferimos o máximo aumento de intensidade, devemos imperativamente considerar $\mu_1 \neq \mu_2$. Por simplicidade, consideramos a aproximação $D_1(\rho) \approx 2/\rho - \rho/5$ para a função derivada logarítmica [1], Eq. (4.4). Dentro desta aproximação, a condição para a existência de uma antirressonância em $|a_1|^2$ é $x^2 \approx 10\varepsilon_0\mu_0(\varepsilon'_2 - \varepsilon'_1)/[\varepsilon'_1\varepsilon'_2(\mu'_1 - \mu'_2)] > 0$. Como o caroço é magnético ($\mu_1 \neq \mu_0$), podemos impor também uma antirressonância em $|b_1|^2$, a qual fornece $x^2 \approx 10\varepsilon_0\mu_0(\mu'_2 - \mu'_1)/[\mu'_1\mu'_2(\varepsilon'_1 - \varepsilon'_2)] > 0$. Juntas, ambas as condições de antirressonância para A_1 ($|a_1|^2$) e B_1 ($|b_1|^2$) são equivalentes a

$$\varepsilon'_1(\omega)\mu'_1(\omega)\varepsilon'_2\mu'_2 > 0. \quad (4.48)$$

Para uma camada dielétrica ($\varepsilon'_2 > \varepsilon_0 > 0$) com parâmetro de espessura $0 < S < 1$, o segundo modo de Fröhlich ocorre no intervalo $-3\varepsilon'_2/2 < \varepsilon'_1(\omega_F) < -3\varepsilon_0/2$ [1]. Como $\varepsilon'_2\mu'_2 > 0$ e $\varepsilon'_1 < 0$, segue da Eq. (4.48) que $\mu'_1 < 0$ (permeabilidade negativa). Como resultado, concluímos que para $ka \ll 1$ e uma camada dielétrica ($m'_2 > 0$), uma ressonância plasmônica estreita em $|a_2|^2$ apenas coincidirá com uma antirressonância em $|a_1|^2$ se o caroço dispersivo tiver *índice de refração negativo* ($m'_1 < 0$).

A Fig. 4.9(a) mostra os gráficos das eficiências de espalhamento Q_{sca} e absorção Q_{abs} para esferas não absorptivas com índice de refração negativo ($\varepsilon_1/\varepsilon_0 < 0$; $\mu_1/\mu_0 = -21$) revestida por um dielétrico com perdas ($\varepsilon_2/\varepsilon_0 = 3,4 + 0,004i$; $\mu_2 = \mu_0$) em função de ε_1 . Demonstramos no gráfico que as ressonâncias de dipolo e quadrupolo podem ser trazidas próximas uma da outra se o caroço tem um índice de refração negativo, confirmando o resultado analítico expresso na Eq. (4.48). Em outras palavras, a UFR e a FR podem ocorrer no mesmo valor de $\varepsilon_1(\omega)$. Como consequência, há um grande aumento de intensidade próximo a essas ressonâncias, como se confirma na análise do gráfico na Fig. 4.9(b), onde auferimos o máximo aumento de energia armazenada na partícula com o mínimo de espalhamento (Fano *dip* em $\varepsilon_1/\varepsilon_0 = -4,27$).

4.4 Conclusões

Investigamos neste Capítulo as ressonâncias de Fano no espalhamento eletromagnético por esferas revestidas compostas de um caroço dispersivo e uma

casca dielétrica. Usando a solução de Aden-Kerker, derivamos uma expressão analítica para a eficiência de absorção Q_{abs} como uma função das intensidades dos campos internos. Essa expressão contém explicitamente termos de interferência entre os coeficientes internos de Aden-Kerker da camada que não são eliminados pela média entre todas as direções e polarizações possíveis. Esse resultado mostra que as ressonâncias de Fano, que resultam da interferência entre modos eletromagnéticos dentro do centro espalhador, podem ser identificadas nas seções de choque totais. Em especial, demonstramos que as ressonâncias de Fano não convencionais (UFRs), recentemente descobertas para esferas homogêneas com altas permissividades [149], podem também ocorrer em esferas concêntricas e no limite de Rayleigh. Mostramos que as UFRs surgem a partir de interferências entre dois modos eletromagnéticos com o mesmo momento de multipolo ($|a_1|^2$, por exemplo) *dentro da camada* e não de interações entre vários modos plasmônicos de diferentes camadas da partícula. À semelhança das FRs [67], as UFRs em esferas concêntricas podem induzir um aumento de intensidade de campo fora da ressonância de espalhamento (*estados escuros*). Este aumento é, no entanto, aproximadamente uma ordem de magnitude maior que aquele encontrado com a FR para espalhadores com perdas, uma vez que as UFRs envolvem momentos de multipolo com a mesma ordem. Finalmente, examinamos as condições para um aumento ótimo de intensidade de campo dentro do centro espalhador. Mostramos que as ressonâncias de Fano convencionais e não convencionais podem ocorrer simultaneamente desde que o caroço tenha um índice de refração negativo, levando a um máximo de aumento de campo com um mínimo de espalhamento. No Capítulo a seguir, abordamos a situação complementar: ressonâncias de Fano em esferas dielétricas revestidas por camadas dispersivas.

Ressonâncias de Fano em *comblikes*

Embora a solução do espalhamento por duas esferas concêntricas seja bem conhecida e possa facilmente ser generalizada para esferas multicamadas, a combinação de diferentes materiais plasmônicos na composição desses centros espalhadores, como mostramos nos Capítulos 3 e 4, pode introduzir efeitos não triviais no espalhamento [56, 83, 135]. Um exemplo recente, e que explora o conceito de ressonâncias de Fano, são as ressonâncias de Fano em estrutura de “pente” (*comblikes*), as quais são um conjunto de ressonâncias assimétricas muito próximas em frequência [155, 156]. Esse efeito pode ser obtido em esferas dielétricas revestidas por múltiplas camadas de óxidos metálicos *fracamente* absorptivos (*e.g.*, óxidos de zinco dopados com alumínio ou gálio no infravermelho próximo ou médio [157, 158]). Nesse caso em particular, as ressonâncias estreitas obtidas no espectro de espalhamento são, cada uma delas, correspondentes a uma camada específica do centro espalhador, o qual é construído de forma que as ressonâncias de plásmons dos vários revestimentos semicondutores estejam próximas em frequência. Como demonstrou Monticone *et al.* [155], para se obter um mínimo de dois picos de ressonância de Fano nessa estrutura de “pentes” de ressonâncias são necessárias pelo menos *duas* camadas semicondutoras revestindo a esfera dielétrica. Esse resultado é explicado via hibridização de plásmons entre as camadas plasmônicas adjacentes.

No presente Capítulo, mostramos que é possível obter ressonâncias de Fano em *comblikes* no espalhamento por uma esfera revestida por uma *única* camada. A condição que impomos é a de que a camada de revestimento

seja magnética e tenha um valor elevado de permeabilidade magnética (ou de permissividade elétrica). Para a construção de nosso sistema, usamos o conceito de *cloaking* eletromagnético [123, 124], também chamada de técnica de cancelamento de espalhamento, e a ressonância de Fano não convencional (UFR), discutida no Capítulo 4. O *cloaking* eletromagnético é definido, *grosso modo*, como a redução drástica da eficiência total de espalhamento ($Q_{\text{sca}} \approx 0$) devido ao revestimento do centro espalhador com um “manto” de permissividade elétrica inferior à do meio circundante. Essa redução ocorre através de mecanismos de cancelamento do espalhamento baseados na polarizabilidade local negativa [154], que leva a interferências destrutivas entre os modos de superfície do objeto a ser camuflado e do “manto”.

5.1 Camada no limite ferromagnético

A teoria que empregamos aqui é a mesma dos Capítulos 3 e 4: duas esferas concêntricas de raios interno a e externo b , interagindo com uma onda plana de frequência angular ω . As permissividades elétricas (ε) e permeabilidades magnéticas (μ) da esfera interior ou “caroço” ($0 \leq r \leq a$), da camada esférica ($a \leq r \leq b$) e do meio circundante ($b \leq r$) são representadas pelos pares ordenados (ε_1, μ_1) , (ε_2, μ_2) e (ε_0, μ_0) , respectivamente. A eficiência de espalhamento é $Q_{\text{sca}} = (2/y^2) \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1)(|a_n|^2 + |b_n|^2)$, onde $y = kb$ é o parâmetro de tamanho da esfera exterior (k sendo o número de onda incidente). A geometria do centro espalhador está ilustrada na Fig. 5.1.

A fim de estudarmos as ressonâncias de espalhamento no interior de *materiais isotrópicos* e magnéticos em geral (dentre os quais podemos incluir os metamateriais dispersivos), a influência dos índices de refração $m_1 = \sqrt{\varepsilon_1 \mu_1 / (\varepsilon_0 \mu_0)}$ no “caroço” e $m_2 = \sqrt{\varepsilon_2 \mu_2 / (\varepsilon_0 \mu_0)}$ na camada esférica deve ser analisada em conjunto com o parâmetro de espessura $S = a/b$. Nesta situação em que m_1 e m_2 são arbitrários, mesmo no limite de pequenas partículas $kb \ll 1$ – que nos permite estudar apenas as primeiras ordens de multipolos e satisfaz algumas teorias de meios efetivos (*e.g.*, teoria de Maxwell Garnett [112]) –, os argumentos $|m_1|ka$ e $|m_2|kb$ das funções esféricas de Bessel e Neumann não são *necessariamente* pequenos; em

Figura 5.1 – Esfera não dispersiva de raio a e propriedades ópticas (ε_1, μ_1) revestida por uma camada dispersiva de espessura $(b - a)$ e propriedades ópticas $[\varepsilon_2(\omega), \mu_2(\omega)]$; o meio externo tem parâmetros não dispersivos (ε_0, μ_0) .

outras palavras, o sistema pode estar fora do limite de Rayleigh [115]. Com um certo abuso de linguagem, chamamos o limite de pequenas partículas com $|\mu/\mu_0| \rightarrow \infty$ (e, por conseguinte, com valores elevados de índices de refração) de *limite ferromagnético* [19, 110, 115]. Todavia, como as funções especiais dependem apenas do *índice de refração* (no argumento entra o produto $\varepsilon\mu$ e não ε ou μ separadamente), esse caso limite também inclui configurações com $|\varepsilon/\varepsilon_0| \rightarrow \infty$ [149].

Generalizando as expressões de Tribelsky *et al.* [149], válidas para esferas homogêneas, reescrevemos os momentos de multipolo a_n e b_n no intuito de simplificar as condições de ressonância e antirressonância (*cloaking*) de espalhamento por esferas revestidas. Assim, a partir das Eqs. (4.5) e (4.6) do Capítulo 4, reescrevemos os coeficientes de Lorenz-Mie:

$$a_n = \frac{\mathcal{F}_n^{(A)}}{\mathcal{F}_n^{(A)} + i\mathcal{G}_n^{(A)}} , \quad b_n = \frac{\mathcal{F}_n^{(B)}}{\mathcal{F}_n^{(B)} + i\mathcal{G}_n^{(B)}} ,$$

onde, no limite de pequena partícula ($y \ll 1$) e índices de refração arbitrários (isto é, não impomos condição alguma sobre $|m_1|x$ ou $|m_2|y$), as novas funções auxiliares são

$$\mathcal{F}_n^{(A)} \approx \frac{y^n}{(2n+1)!!} \left[(n+1)\tilde{m}_2 - y\tilde{D}_n \right] , \quad (5.1)$$

$$\mathcal{G}_n^{(A)} \approx \frac{(2n-1)!!}{y^n} \left[\tilde{D}_n + \frac{\tilde{m}_2 n}{y} \right] , \quad (5.2)$$

$$\mathcal{F}_n^{(B)} \approx \frac{y^n}{(2n+1)!!} \left[\tilde{m}_2 y \tilde{G}_n - (n+1) \right] - \frac{y^{n+2}}{2(2n+3)!!} \left[\tilde{m}_2 y \tilde{G}_n - (n+3) \right], \quad (5.3)$$

$$\mathcal{G}_n^{(B)} \approx -\frac{(2n-1)!!}{y^n} \left[\tilde{m}_2 \tilde{G}_n + \frac{n}{y} \right], \quad (5.4)$$

sendo $\tilde{D}_n$ e $\tilde{G}_n$ funções auxiliares definidas nas Eqs. (4.13) e (4.14), respectivamente, e $\tilde{m}_2 = \sqrt{\varepsilon_2 \mu_0 / (\varepsilon_0 \mu_2)}$ é a impedância óptica da camada. A operação $(\cdot)!!$ indica o fatorial dos números ímpares. Portanto, há ressonâncias ou interferências construtivas em $|a_n|^2$ e $|b_n|^2$ quando $\mathcal{G}_n^{(A,B)} = 0$ ($|a_n|^2 = |b_n|^2 = 1$), ao passo que as interferências destrutivas (*cloaking*) ocorrem quando $\mathcal{F}_n^{(A,B)} = 0$ ($|a_n|^2 = |b_n|^2 = 0$). Em particular, a Eq. (5.3) necessita de uma acurácia maior relativa às outras aproximações, visto que no limite de Rayleigh para partículas não magnéticas o termo de ordem mais alta é nulo [1, 149]. As expressões apresentadas na Ref. [149] para uma esfera homogênea são recuperadas quando $a \rightarrow b$ [$\tilde{D}_n = D_n(m_1 x) \tilde{m}_2 / \tilde{m}_1$, $\tilde{G}_n = D_n(m_1 x) \tilde{m}_1 / \tilde{m}_2$] e $a \rightarrow 0$ [$\tilde{D}_n = \tilde{G}_n = D_n(m_2 y)$], onde $x = ka$ é o parâmetro de tamanho da esfera interior.

No limite ferromagnético, se consideramos $|m_2|y \gg 1$, temos as seguintes aproximações para as funções de Riccati-Bessel e Riccati-Neumann, respectivamente: $\psi_n(m_2 y) \approx \sin(m_2 y - n\pi/2)$ e $\chi_n(m_2 y) \approx \cos(m_2 y - n\pi/2)$ [1]. Definindo os deslocamentos de fase $\Delta_n^{(A)} = \tan^{-1}(-A_n)$ e $\Delta_n^{(B)} = \tan^{-1}(-B_n)$, a aproximação de pequena partícula ($y \ll 1$) para o limite ferromagnético ($|m_2|y \gg 1$) é obtida das Eqs. (5.1)–(5.4) permutando-se $\tilde{D}_n$ com $\cot(m_2 y + \Delta_n^{(A)} - n\pi/2)$ e $\tilde{G}_n$ com $\cot(m_2 y + \Delta_n^{(B)} - n\pi/2)$. Em particular, as aproximações de dipolo ($n = 1$) para o limite ferromagnético são:

$$\mathcal{F}_1^{(A)} \approx \frac{y}{3} \left\{ 2\tilde{m}_2 + y \tan \left[m_2 y + \Delta_1^{(A)} \right] \right\}, \quad (5.5)$$

$$\mathcal{G}_1^{(A)} \approx \frac{1}{y} \left\{ \frac{\tilde{m}_2}{y} - \tan \left[m_2 y + \Delta_1^{(A)} \right] \right\}, \quad (5.6)$$

$$\mathcal{F}_1^{(B)} \approx -\frac{y}{3} \left\{ \tilde{m}_2 y + 2 \cot \left[m_2 y + \Delta_1^{(B)} \right] \right\}, \quad (5.7)$$

$$\mathcal{G}_1^{(B)} \approx \frac{1}{y} \left\{ \tilde{m}_2 - \frac{1}{y} \cot \left[m_2 y + \Delta_1^{(B)} \right] \right\}. \quad (5.8)$$

Desconsiderando parâmetros materiais (ε, μ) negativos, há duas situações recíprocas para camadas magnéticas revestindo caroços dielétricos: (i) camadas com valores altos de permeabilidade magnética e baixa permissividade ($|\varepsilon_2/\varepsilon_0| \ll$

1; $|\mu_2/\mu_0| \gg 1$) e (ii) camadas com valores elevados de permissividade elétrica e baixa permeabilidade ($|\varepsilon_2/\varepsilon_0| \gg 1; |\mu_2/\mu_0| \ll 1$). Embora não seja uma condição necessária, parâmetros materiais pequenos em relação ao meio externo favorecem o cancelamento do espalhamento eletromagnético. O mecanismo de cancelamento (*cloaking*) se baseia, *grosso modo*, na indução de uma polarizabilidade no revestimento plasmônico que oscile *fora de fase* com o campo interno. Em outras palavras, ocorre o cancelamento dos campos eletromagnéticos devido a uma polarizabilidade local negativa em relação à polarizabilidade do material a ser tornado “invisível”. Explicitamente, os dipolos elétrico e magnético ($n = 1$) são fornecidos pelas integrais de volume dos vetores de polarização elétrica $\mathbf{P}(\mathbf{r}, \omega) = [\varepsilon(\mathbf{r}, \omega) - 1]\varepsilon_0\mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega)$ e de magnetização $\mathbf{M}(\mathbf{r}, \omega) = [\mu(\mathbf{r}, \omega) - 1]\mu_0\mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega)$, respectivamente, onde se consideram os campos locais e parâmetros dentro do centro espalhador. Portanto, os casos (i) e (ii), respectivamente, induzem vetores de polarização e de magnetização fora de fase em relação aos campos elétrico e magnético locais, facultando o cancelamento parcial ou total do sinal de espalhamento. Além disso, parâmetros elevados no limite de pequena partícula são responsáveis por quebrar a isotropia do espalhamento de Rayleigh, então favorecendo o retroespalhamento e as ressonâncias no interior das partículas [19]. Consequentemente, podem-se construir centros espalhadores com propriedades adequadas para modular tanto o *cloaking* quanto as fortes ressonâncias de espalhamento em esferas magnéticas revestidas.

No caso (i), a camada esférica é constituída de um material que apresente, para uma certa faixa de frequência, valores altos de permeabilidade magnética ($|\mu_2/\mu_0| \gg 1$). Teremos por consequência, na mesma faixa de frequência, altos valores de índice de refração ($|m_2| \gg 1$) e baixas impedâncias ópticas ($|\tilde{m}_2| \ll 1$). De fato, em teoria, para garantirmos que m_2 seja finito quando $|\mu_2/\mu_0| \rightarrow \infty$, devemos imperativamente considerar $|\varepsilon_2/\varepsilon_0| \rightarrow 0$ [2]. Portanto, das Eqs. (5.5) e (5.7) no limite ferromagnético ($|m_2|y \gg 1$), o cancelamento dos dipolos elétrico e magnético ocorre, respectivamente, para

$$\tan \left[m_2 y + \Delta_1^{(A)} \right] = -\frac{2\varepsilon_2}{m_2 y} \approx 0, \quad (5.9)$$

$$\cot \left[m_2 y + \Delta_1^{(B)} \right] = -\frac{\varepsilon_2 y^2}{2m_2 y} \approx 0, \quad (5.10)$$

o que nos fornece um critério simples para encontrarmos as regiões de interferência destrutiva no espalhamento. Por outro lado, para o caso (ii), altos valores de permissividades elétricas ($|\varepsilon_2| \gg 1$) levam a $|m_2| \gg 1$ e $|\tilde{m}_2| \gg 1$, que prontamente fornecem as condições de *cloaking* elétrico e magnético:

$$\cot \left[m_2 y + \Delta_1^{(A)} \right] \approx 0, \quad (5.11)$$

$$\tan \left[m_2 y + \Delta_1^{(B)} \right] \approx 0. \quad (5.12)$$

As condições de *cloaking* para os casos (i) e (ii) nos permitem analisar a ressonância nas vizinhanças do *cloaking* eletromagnético. A seguir, apresentamos uma configuração especial onde as ressonâncias de Fano na seção de choque total de espalhamento são obtidas.

5.1.1 Condições para o cancelamento de espalhamento

Vamos considerar por enquanto uma esfera dielétrica não absorptiva (ε_1, μ_1) revestida por uma camada dispersiva magnética sem perdas $[\varepsilon_2(\omega), \mu_2(\omega)]$, com $|\mu_2(\omega)/\mu_0| \gg 1$, embebida no vácuo (ε_0, μ_0). Mantendo constantes os parâmetros de tamanho $x = ka$ e $y = kb$, a condição de *cloaking* na frequência $\omega = \omega_0$ [$Q_{\text{sca}}(\omega_0) = 0$] acontecerá para um certo índice de refração $\bar{m}_2 \equiv m_2(\omega_0)$: $\tan[\bar{m}_2 y + \Delta_1^{(A)}] = \cot[\bar{m}_2 y + \Delta_1^{(B)}] = 0$. Perceba que nessa condição de *cloaking* os argumentos dessas funções trigonométricas podem ser muito grandes, de forma que não podemos extraí-los diretamente das equações. Para contornarmos essa dificuldade, consideramos uma pequena variação de frequência $\delta\omega$ na vizinhança da antirressonância ω_0 , levando a uma variação correspondente no índice de refração: $m_2(\omega_0 + \delta\omega) = \bar{m}_2 + \delta m$. Ainda, para simplificarmos nossa análise, assumimos que apenas $\varepsilon_2 = \varepsilon_2(\omega)$ depende da frequência neste intervalo $\delta\omega$, de maneira que o índice de impedância, no limite ferromagnético de pequena partícula ($y \ll 1$, $|m_2|y \gg 1$), permanece aproximadamente inalterado: $\tilde{m}_2(\omega_0 + \delta\omega) \approx \tilde{m}_2(\omega_0) = \tilde{m}_2 \ll 1$. Uma vez que supomos um caroço dielétrico ($\varepsilon_1/\varepsilon_0 > 0, \mu_1 = \mu_0$) no limite de pequena partícula ($y \ll 1$), ele automaticamente satisfaz o limite de Rayleigh ($|m_1|x \ll 1$), enquanto a camada satisfaz o limite ferromagnético ($|m_2|y \gg 1$). Dessas considerações, resulta que $A_1 \approx [\varepsilon_1 x \tan(m_2 x) + 2\tilde{m}_2]/[\varepsilon_1 x - 2\tilde{m}_2 \tan(m_2 x)]$, onde usamos $D_1(m_1 x) \approx 2/(m_1 x) + \mathcal{O}(x)$ e B_1 pode ser obtido de A_1 através da

substituição $(\varepsilon_1, \tilde{m}_2)$ por $(\mu_1, 1/\tilde{m}_2)$, sendo essas funções definidas nas Eqs. (4.15) e (4.16). Consequentemente, temos que $\Delta_1^{(A,B)}(\omega_0 + \delta m) \approx \Delta_1^{(A,B)} - (\delta m)x$. Impondo $S = a/b \rightarrow 1$ (*limite de camada fina*) e usando $\tan(A \pm B) = [\tan(A) \pm \tan(B)]/[1 \mp \tan(A) \tan(B)]$, obtemos

$$\begin{aligned} \tan[\overline{m}_2 y + \Delta_1^{(A)} + y(1-S)\delta m] &= \tan[y(1-S)\delta m] \approx y(1-S)\delta m, \\ \cot[\overline{m}_2 y + \Delta_1^{(B)} + y(1-S)\delta m] &= -\tan[y(1-S)\delta m] \approx -y(1-S)\delta m, \end{aligned}$$

uma vez que podemos escolher $|\delta m|y(1-S) \ll 1$ mesmo se $|\delta m|y \gg 1$. Substituindo essas aproximações nas Eqs. (5.5)–(5.8) e redefinindo as funções auxiliares, obtemos:

$$\mathcal{F}_1^{(A)} \approx \frac{y^3}{3} \left[\frac{2\tilde{m}_2}{y^2(1-S)} + \delta m \right], \quad (5.13)$$

$$\mathcal{G}_1^{(A)} \approx \frac{\tilde{m}_2}{y^2(1-S)} - \delta m, \quad (5.14)$$

$$\mathcal{F}_1^{(B)} \approx -\frac{y^3}{3} \left[\frac{\tilde{m}_2}{1-S} - 2\delta m \right], \quad (5.15)$$

$$\mathcal{G}_1^{(B)} \approx \frac{\tilde{m}_2}{1-S} + \delta m. \quad (5.16)$$

Nessas aproximações, as interferências construtiva e destrutiva em $|a_1|^2$ ocorrem, respectivamente, para

$$\delta m_+^{(A)} = \frac{\tilde{m}_2}{y^2(1-S)}, \quad (5.17)$$

$$\delta m_-^{(A)} = -\frac{2\tilde{m}_2}{y^2(1-S)}. \quad (5.18)$$

Analogamente, as interferências construtiva e destrutiva em $|b_1|^2$ ocorrem para

$$\delta m_-^{(B)} = -\frac{\tilde{m}_2}{(1-S)}, \quad (5.19)$$

$$\delta m_+^{(B)} = \frac{\tilde{m}_2}{2(1-S)}, \quad (5.20)$$

respectivamente. Em particular, podemos demonstrar que ambos $|a_1|^2$ e $|b_1|^2$ têm um perfil do tipo Fano em função de δm : $|a_1|^2 \propto (\rho + \beta)^2/(\rho^2 + 1)$, onde $\rho = [(1 + \alpha)\delta m - \alpha\delta m_+^{(A)} - \delta m_-^{(A)}]/[|\gamma|\sqrt{\alpha(3 - \alpha)}]$, $\alpha = y^6/9$, $\beta = 2\gamma/[|\gamma|\sqrt{\alpha(3 - \alpha)}]$ e $\gamma = \delta m_-^{(A)} - \delta m_+^{(A)}$. O perfil de $|b_1|^2$ é obtido de $|a_1|^2$ pela troca de $\delta m_\pm^{(A)}$ por $\delta m_\mp^{(B)}$. Supondo que apenas ε_2 depende de ω , obtemos um perfil de Fano para

ambos $|a_1|^2$ e $|b_1|^2$ em função de $\varepsilon_2(\omega)$. Essas ressonâncias de dipolo assimétricas estão relacionadas ao efeito Fano não convencional [83, 149], uma vez que elas são diferentes das ressonâncias de Fano convencionais, que surgem da interferência entre diferentes ordens multipolares em uma direção específica de espalhamento [55, 67]. Além disso, note que o parâmetro de assimetria β tem sinais diferentes nos perfis de $|a_1|^2$ e $|b_1|^2$ em função da frequência. Isso fornece uma configuração em que as interferências destrutivas dos dipolos elétrico e magnético coincidam sem sobrepor as ressonâncias de espalhamento. Portanto, temos uma estrutura de “pente” de ressonâncias de dipolo elétrico e magnético para $S \approx 1$, $|m_1|x \ll 1$, $|m_2|y \gg 1$ e $y \ll 1$. A análise para o caso $|\varepsilon_2(\omega)/\varepsilon_0| \gg 1$, com $|\mu_2(\omega)/\mu_0| \ll 1$, é inteiramente análoga. Ainda, de acordo com Monticone *et al.* [159], as configurações de camadas que consideramos são as configurações ótimas para a redução global do espalhamento na eficiência de espalhamento integrada.

5.1.2 Ressonâncias em estrutura de pente

Demonstramos até aqui que é possível obter ressonâncias em estrutura de “pente” (*comblikes*) em ambos os casos (i) ($|\mu_2/\mu_0| \gg 1$) e (ii) ($|\varepsilon_2/\varepsilon_0| \gg 1$) desde que se tenham a razão de aspecto $S \approx 1$ e um material de revestimento com um valor elevado de índice de refração. Para localizar esses *comblikes* em frequência, consideramos $\tilde{m}_2 \rightarrow 0$ para $|\mu_2/\mu_0| \rightarrow \infty$, levando a $A_1 \approx -1/B_1 \approx \tan(m_2x)$. Das Eqs. (5.5) e (5.7), a condição de *cloaking* torna-se $\tan[m_2y(1-S)] = 0$, isto é, $m_2y(1-S) = N\pi$, com $N = \pm 1, \pm 2, \dots$. A condição $N = 0$ leva a uma esfera dielétrica homogênea (ε_1, μ_1) , e, portanto, não há *cloaking*. Analogamente, considerando $1/\tilde{m}_2 \rightarrow 0$ para $|\varepsilon_2| \rightarrow \infty$, a condição de *cloaking* torna-se $\cot[m_2y(1-S)] = 0$, isto é, $m_2y(1-S) = N\pi/2$, com $N = \pm 1, \pm 2, \dots$. Note que, em ambos os casos, a *refração negativa* é permitida para N negativo. Reescrevendo essas condições de cancelamento, temos explicitamente a dependência de μ_2 em relação a ε_2 para $y \ll 1$, $|m_1|x \ll 1$, e $|m_2|y \gg 1$:

$$\frac{\varepsilon_2\mu_2}{\varepsilon_0\mu_0} \approx \left[\frac{\eta N}{y(1-S)} \right]^2, \quad N = 1, 2, \dots, \quad (5.21)$$

onde $\eta = \pi$ para $(|\varepsilon_2/\varepsilon_0| \ll 1; |\mu_2/\mu_0| \gg 1)$ e $\eta = \pi/2$ para $(|\varepsilon_2/\varepsilon_0| \gg 1; |\mu_2/\mu_0| \ll 1)$. Note que, para ε_2 (μ_2) não nulo, altos valores de μ_2 (ε_2) podem ser obtidos

para $S \approx 1$ (camada de pequena espessura). Além disso, a Eq. (5.21) não depende de (ε_1, μ_1) , e essa independência com relação ao material do caroço é válida para $|m_1|x \ll 1$. Esse resultado é de grande interesse, por exemplo, para camuflar uma partícula dielétrica arbitrária. Para valores de $|m_1|x \approx 1$, é possível controlar o quão próximas as ressonâncias dipolares elétrica e magnética estão uma da outra para um certo valor de N . Ademais, note que as ressonâncias em estrutura de “pente” que encontramos neste sistema, para um certo conjunto fixo de parâmetros materiais, são “quantizadas” como se fossem modos estacionários de uma cavidade ressonante ou estados ligados de um poço de potencial. As antirressonâncias de dipolo *permitidas*, neste caso, são condicionadas pela Eq. (5.21).

5.2 Cálculo numérico do espalhamento

Para testarmos nossos resultados analíticos, usamos um modelo de Drude para a permissividade elétrica da camada $\varepsilon_{\text{Drude}}(\omega) = \varepsilon_\infty - \omega_p^2/[\omega(\omega + i\Gamma)]$ com os mesmos parâmetros da Ref. [155]: $\varepsilon_\infty = 3,3$, $\omega_p = 2213,2$ THz e $\Gamma = 0,002\omega_p$. Para a permeabilidade da camada, em vez de considerarmos $\mu_2/\mu_0 = 1$ como a Ref. [155], consideramos os casos $\mu_2/\mu_0 = 1 \times 10^3$, 2×10^3 , 5×10^3 . O raio do caroço é fixo em $a = 100$ nm e a razão de aspecto é $S = 0,9$. Usamos aqui a solução analítica exata fornecida no Capítulo 3 para o espalhamento de Aden-Kerker [108]. Em particular, um metamaterial com tais propriedades magnéticas poderia ser construído, por exemplo, a partir de heteroestruturas em teoria de meios efetivos. Um exemplo que não lida com o ferro- ou ferrimagnetismo (no caso das ferritas), mas sim com altas permissividades elétricas e permeabilidades magnéticas próximas de zero (diamagnetismo) [caso (ii)], tendo as mesmas propriedades desejadas de dispersão, pode ser construído mediante uma coleção de nanoesferas de cloreto de cobre (CuCl_2) em teoria de meios efetivos [52].

A Fig. 5.2 ilustra os *comblikes* no intervalo de frequência em que $\varepsilon'_2(\omega) > 0$ nas vizinhanças de ω_p . Note que Q_{sca} é dramaticamente reduzida nas regiões de *cloaking*, fornecidas pela Eq. (5.21), quando comparada a uma esfera sem revestimento. A posição desses *comblikes* pode ser controlada pelo valor de μ_2 , um resultado bastante interessante quando comparado com a Ref. [155], onde os *comblikes* são dependentes

Figura 5.2 – Eficiência de espalhamento Q_{sca} para uma esfera dielétrica ($\varepsilon_1/\varepsilon_0 = 10$, $\mu_1/\mu_0 = 1$) revestida por uma camada magnética dispersiva [$\varepsilon_2(\omega) = \varepsilon_{\text{Drude}}$; $\mu_2 \gg \mu_0$]. A esfera interior tem raio $a = 100$ nm e razão de aspecto $S = a/b = 0,9$, onde b é o raio da camada. A linha pontilhada representa a esfera sem revestimento. O cancelamento de espalhamento (*cloaking*) ocorre nos valores de ε_2 dados pela Eq. (5.21) para $\eta = \pi$. (a) $\mu_2/\mu_0 = 1 \times 10^3$. (b) $\mu_2/\mu_0 = 2 \times 10^3$

Figura 5.3 – Eficiência de espalhamento Q_{sca} para uma esfera dielétrica ($\epsilon_1/\epsilon_0 = 10$, $\mu_1/\mu_0 = 1$) revestida por uma camada magnética dispersiva [$\epsilon_2(\omega) = \epsilon_{\text{Drude}}$, $\mu_2 \gg \mu_0$]. A esfera interior tem raio $a = 100$ nm e razão de aspecto $S = a/b = 0,9$, onde b é o raio da camada. A linha pontilhada representa a esfera sem revestimento. Os valores de *cloaking* são dados pela Eq. (5.21). (a) $\mu_2/\mu_0 = 5 \times 10^3$. (b) Valores de ϵ_2 para o modelo de Drude e para a Eq. (5.21) com $N = 1, 2, 3$ e $\eta = \pi$. As intersecções indicadas pelas linhas verticais correspondem às localizações, em frequência, dos *comblikes*.

da geometria e do material das diferentes multicamadas metálicas. Aqui, temos um modelo que depende apenas do valor de μ_2 , que pode ser modulado via um campo magnético externo, por exemplo. Na Fig. 5.3, é verificado que a Eq. (5.21) é válida mesmo para $\varepsilon'_2/\varepsilon_0 > 1$ e $y = kb \approx 1$, desde que $\mu_2/\mu_0 \gg 1$. Esse efeito ocorre devido a ressonâncias de Fano não convencionais (UFRs), obtidas tanto para valores elevados de permeabilidade [149] (na camada) quanto para partículas revestidas no limite de Rayleigh [83] (no caroço). Assim, mesmo na ausência do mecanismo de uma polarizabilidade local negativa, a coincidência das duas UFRs com parâmetros de assimetria de sinais opostos leva a $Q_{\text{sca}} \approx 0$ na antirressonância. De fato, os casos limites que estudamos são mais gerais e valem para $|\mu_2/\mu_0| \gg |\varepsilon_2/\varepsilon_0|$ e $|\mu_2/\mu_0| \ll |\varepsilon_2/\varepsilon_0|$.

5.3 Conclusões

Neste Capítulo estudamos as condições para que as ressonâncias de Fano dos dipolos elétricos e magnéticos no espalhamento por esferas revestidas aconteçam na mesma frequência. A teoria que desenvolvemos impõe o limite de Rayleigh para o caroço dielétrico ($|m_1|x \ll 1$) e o limite ferromagnético para uma casca plasmônica fina de revestimento ($|m_2|y \gg 1$) para a obtenção das ressonâncias de Fano em estruturas de “pente” (*comblikes*) em uma *única* camada, o que é diferente da Ref. [155]. Mostramos que a teoria fornece a posição precisa das antirressonâncias de espalhamento (*cloaking*) e que, no caso magnético, ela depende essencialmente da razão de aspecto $S = a/b$ e do valor da permeabilidade da camada. Na ausência do mecanismo de cancelamento baseado em uma polarizabilidade local negativa, mostramos que as ressonâncias de Fano não convencionais, induzidas no sistema por duas vias distintas, levam a $Q_{\text{sca}} \approx 0$ na antirressonância. Acreditamos que esses resultados possam ser explorados em sistemas realistas usando metamateriais em teoria de meios efetivos. No Capítulo a seguir, finalizamos o estudo em geometria esférica explorando outro sistema que envolve interferências não triviais de modos eletromagnéticos e ressonâncias de Fano: as *esferas quírais*.

Esferas opticamente ativas

Derivamos aqui, de forma análoga ao Capítulo 3, uma expressão exata para a energia armazenada no interior de uma esfera quiral dispersiva, fazendo então o vínculo da energia com as seções de choque ópticas³⁵. *Grosso modo*, um material quiral ou opticamente ativo possui índices de refração diferentes dependendo da polarização da luz, os quais são diferenciados por um parâmetro de quiralidade do meio³⁶. A solução do espalhamento simples por esferas quirais, que é uma das generalizações da teoria de Lorenz-Mie, é bastante engenhosa e foi construída por Bohren em 1974 [162]. O método analítico utilizado para se resolver este problema parte da decomposição de ondas eletromagnéticas planas em ondas circularmente polarizadas à esquerda (*levógiras*) e à direita (*dextrógiras*) no meio quiral. São esses campos eletromagnéticos que servem de base para aplicarmos o método dos harmônicos vetoriais (descrito na Seção 2.1), e são chamados de *campos de Beltrami*³⁷. Esses campos, aliás, possuem uma série de propriedades matemáticas [164] que os tornam relevantes em diversas áreas da Física, tais como em dinâmica dos fluidos, astrofísica, termoacústica, física de altas energias, magneto-hidrodinâmica, dentre outras [163].

Nosso intuito aqui é revisitar o espalhamento por esferas quirais, calculando

³⁵ Os principais resultados deste Capítulo encontram-se, em grande parte, publicados no *Journal of the Optical Society of America A* (2013) sob o título: “*Electromagnetic energy within single-resonance chiral metamaterial spheres*” [160].

³⁶ O termo “quiralidade” foi proposto por Lord Kelvin em 1873 para explicar algumas propriedades especiais de moléculas [161].

³⁷ Um campo vetorial $\mathbf{Q}$ é um *campo de Beltrami* se, em uma região livre de fontes, ele satisfizer a equação: $\nabla \times \mathbf{Q} = \eta \mathbf{Q}$, onde $\eta \neq 0$ é um comprimento recíproco [163]. Para η espacialmente constante, $\mathbf{Q}$ é um campo de Beltrami *solenoidal*: $\nabla \cdot \mathbf{Q} = 0$.

explicitamente os campos eletromagnéticos internos à esfera (no *caso magnético*), e aplicar sua solução analítica ao problema de uma esfera constituída de um *metamaterial quiral* (CMM, do inglês *chiral metamaterial*). Em particular, mostramos que o funcional de energia do campo interno agrega, necessariamente, duas representações diferentes de parâmetros materiais em razão do *ansatz* escolhido e das relações constitutivas. No regime de baixa absorção, mostramos ainda que valores elevados de quiralidade levam a um aumento de campo interno fora da ressonância de espalhamento. Esse efeito está relacionado às interferências entre os diferentes multipolos dos campos eletromagnéticos de Beltrami.

6.1 Metamateriais quirais

Os metamateriais, como discutimos no final do Capítulo 3, são estruturas artificiais com resposta eletromagnética construída que exibem propriedades ópticas não usuais, tais como refração negativa [74] e resolução de imagem além do limite da difração [75]. Uma das rotas possíveis para se obter um índice de refração negativo, e também a mais conhecida delas [118], requer que a permissividade elétrica (ε) e a permeabilidade magnética (μ) sejam simultaneamente negativas [74, 75]. Essa condição, como vimos na Seção 3.3, pode ser obtida com metamateriais constituídos de estruturas periódicas contendo ambos ressonadores elétricos e magnéticos [74], como os SRRs da Fig. 3.2. Essa abordagem, no entanto, é limitada pela resposta magnética dos SRRs [165].

Uma rota alternativa para refração negativa, onde não há obrigatoriedade de ε e μ serem negativos, envolve metamateriais quirais (CMMs) [166], tais como os meios bi-anisotrópicos [167, 168]. Além dessas abordagens, a refração negativa [169] e um índice de refração negativo [170] podem ser obtidos com metamateriais hiperbólicos (HMMs, do inglês *hyperbolic metamaterials*), uma classe de meios dielétricos anisotrópicos artificiais que exibem relação de dispersão hiperbólica [73, 171]. Embora fisicamente diferentes, a maioria dessas rotas para a refração negativa, bem como muitas aplicações com metamateriais, envolvem meios que são necessariamente dispersivos e, conseqüentemente, absorptivos [86, 87, 93], o que dificulta a determinação da energia eletromagnética neles armazenada.

Neste Capítulo, usamos as relações de dispersão de um CMM (meio bi-isotrópico). Diferentemente de nossa apresentação no Capítulo 3, em que tínhamos uma solução geral para esferas concêntricas e aplicamos os resultados analíticos a um metamaterial dispersivo, seguiremos outra abordagem aqui. Partindo do modelo de um CMM e da densidade de energia associada, usamos a solução do Bohren para o cálculo das intensidades dos campos internos e eficiências de uma esfera quiral.

6.1.1 Relações constitutivas e parâmetros efetivos

Considere um *metamaterial quiral* linear, espacialmente homogêneo e isotrópico, com propriedades ópticas $[\varepsilon_1(\omega), \mu_1(\omega), \kappa(\omega)]$, onde ε_1 e μ_1 são, respectivamente, a permissividade elétrica e a permeabilidade magnética efetivas, e κ é o parâmetro adimensional de quiralidade. As relações constitutivas concernentes ao CMM que escolhemos (*meio de Pasteur*³⁸) são [172]

$$\mathbf{D}_1 = \varepsilon_1(\omega)\mathbf{E}_1 + i\frac{\kappa(\omega)}{c}\mathbf{H}_1, \quad (6.1)$$

$$\mathbf{B}_1 = \mu_1(\omega)\mathbf{H}_1 - i\frac{\kappa(\omega)}{c}\mathbf{E}_1, \quad (6.2)$$

onde $c = 1/\sqrt{\varepsilon_0\mu_0}$ é a velocidade da luz no vácuo. Meios materiais descritos pelas Eqs. (6.1) e (6.2) alteram a polarização de ondas harmônicas com exceção apenas de ondas circularmente polarizadas à direita (RCP,+) e à esquerda (LCP,-), onde os sinais de “+” e “-” indicam a helicidade positiva ou negativa da onda, respectivamente. Isso acontece porque os índices de refração para ambas as helicidades são diferentes: $m_1^{(\pm)} = \sqrt{\varepsilon_1/\varepsilon_0}\sqrt{\mu_1/\mu_0} \pm \kappa$. Em especial, para um κ real positivo, note que é possível obter *refração negativa* para ondas LCP mesmo se as partes reais de ε_1 e μ_1 forem positivas [166]. A Fig. 6.1 ilustra um exemplo típico de metamaterial quiral com estruturas metálicas em forma de hélice.

³⁸ Os meios quirais pertencem a uma classe grande de meios materiais chamados de bi-isotrópicos (BIs), cujas relações constitutivas gerais (na forma *simetrizada de Condon*) são: $\mathbf{D} = \varepsilon\mathbf{E} + (\chi + i\kappa)\mathbf{H}/c$ e $\mathbf{B} = \mu\mathbf{H} + (\chi - i\kappa)\mathbf{E}/c$, onde χ é o parâmetro adimensional magneto-elétrico e descreve a *reciprocidade* do material e κ é o parâmetro adimensional de *quiralidade* [96]. Assim, materiais com $\chi \neq 0$ são não recíprocos e materiais com $\kappa \neq 0$ são quirais. Os meios BIs se classificam em: *meio BI geral* – não recíproco ($\chi \neq 0$), quiral ($\kappa \neq 0$); *meio de Tellegen* – não recíproco ($\chi \neq 0$), não quiral ($\kappa = 0$); *meio de Pasteur* – recíproco ($\chi = 0$), quiral ($\kappa \neq 0$).

Figura 6.1 – Metamaterial quiral constituído de estruturas metálicas em formatos de hélice [73]. (a) Duas hélices em planos diferentes, ligeiramente deslocadas, formando uma estrutura helicoidal. (b) Arranjo periódico de hélices metálicas em uma camada dupla imersa em um substrato parcialmente transparente. Para comprimentos de onda muito maiores que as estruturas helicoidais desacopladas ($\lambda \gg L > d$), vale a *teoria de meios efetivos* expressa nas Eqs. (6.3)–(6.5) [173]. (Figuras adaptadas das Refs. [168] e [174], respectivamente.)

De acordo com Silverman [175], as relações constitutivas expressas pelas Eqs. (6.1) e (6.2) para campos harmônicos são baseadas nas relações simetrizadas de Condon [176] e, por esta razão, as chamaremos de *relações de Condon*. De acordo com as Refs. [172, 173], para o metamaterial quiral da Fig. 6.1, consideramos os parâmetros constitutivos efetivos:

$$\varepsilon_1(\omega) = \varepsilon_0 \left[1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 - \omega_0^2 + i\Gamma\omega} \right], \quad (6.3)$$

$$\mu_1(\omega) = \mu_0 \left[1 - \frac{F\omega^2}{\omega^2 - \omega_0^2 + i\Gamma\omega} \right], \quad (6.4)$$

$$\kappa(\omega) = \frac{A\omega}{\omega^2 - \omega_0^2 + i\Gamma\omega}, \quad (6.5)$$

onde ω_p e ω_0 são as frequências de plasma e de ressonância dos ressonadores [173], F é um fator adimensional que se refere à fração ocupada por uma unidade celular em hélice ($0 < F < 1$), Γ é um coeficiente de dissipação e $A = \pm\omega_p F^{1/2}$ [172, 173]. Note que ambos μ_1 e κ dependem do fator de preenchimento F ; em particular, $|\kappa|^2 \propto F$. Essa observação é importante, pois mostra que podemos controlar a quiralidade variando F . Ademais, para garantir a validade desses parâmetros efetivos, assumimos que os comprimentos de onda relevantes no material são muito

maiores que a constante de rede associada a uma unidade celular dos ressonadores helicoidais desacoplados [173].

6.1.2 Densidade de energia eletromagnética

Para uma onda harmônica propagando-se no meio $[\varepsilon_1(\omega), \mu_1(\omega), \kappa(\omega)]$, descrito pelas Eqs. (6.1)–(6.5), a densidade de energia eletromagnética média no tempo é

$$\langle u \rangle_t = \frac{1}{4} \left[\varepsilon_{\text{eff}} |\mathbf{E}_1|^2 + \mu_{\text{eff}} |\mathbf{H}_1|^2 + \frac{2}{c} \text{Re} (\kappa_{\text{eff}} \mathbf{E}_1^* \cdot \mathbf{H}_1) \right], \quad (6.6)$$

onde os coeficientes efetivos de energia são [133, 172]

$$\varepsilon_{\text{eff}}(\omega) = \varepsilon_0 \left[1 + \frac{\omega_p^2 (\omega_0^2 + \omega^2)}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \Gamma^2 \omega^2} \right], \quad (6.7)$$

$$\mu_{\text{eff}}(\omega) = \mu_0 \left[1 + \frac{F \omega^2 (3\omega_0^2 - \omega^2)}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \Gamma^2 \omega^2} \right], \quad (6.8)$$

$$\kappa_{\text{eff}}(\omega) = -\frac{A \omega (\Gamma \omega + 2i \omega_0^2)}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \Gamma^2 \omega^2}. \quad (6.9)$$

Sob a hipótese de que o meio seja *fracamente absoritivo* ($\Gamma \approx 0$), esses coeficientes assumem uma forma bem conhecida [93, 177]: $\varepsilon_{\text{eff}} = \partial(\omega \varepsilon_1)/\partial \omega > 0$, $\mu_{\text{eff}} = \partial(\omega \mu_1)/\partial \omega > 0$ e $\kappa_{\text{eff}} = i \partial(\omega \kappa)/\partial \omega$, com a restrição $\varepsilon_{\text{eff}} \mu_{\text{eff}} > \kappa_{\text{eff}}^2$. Portanto, a média temporal da energia eletromagnética W no interior de uma esfera de raio a com parâmetros materiais dados pelas Eqs. (6.7)–(6.9) é obtida a partir da integração da Eq. (6.6) com respeito ao volume da partícula:

$$W = \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^1 d(\cos \theta) \int_0^a dr r^2 \langle u \rangle_t, \quad (6.10)$$

onde r é a variável radial, θ e ϕ são as variáveis polar e azimutal, respectivamente, em um sistema de coordenadas esféricas, e $\langle u \rangle_t = \langle u \rangle_t(r, \cos \theta, \phi)$. Enfatizamos que as Eqs. (6.7)–(6.9) não são gerais, uma vez que elas são derivadas para um tipo especial de CMM com parâmetros materiais dados pelas Eqs. (6.3)–(6.5).

6.2 Eficiências de Bohren para esferas quirais

A solução exata do espalhamento eletromagnético por uma esfera quiral ou *opticamente ativa* é desenvolvida em detalhes nas Refs. [1, 162] para os campos

espalhados. O termo “opticamente ativa”, como mencionado na Seção 2.2, não se refere, por exemplo, a um meio *Faraday ativo*, em que a rotação do plano de polarização da onda incidente é dependente de um campo magnético uniforme aplicado na direção de propagação da onda no material (*efeito magneto-óptico*) [96]. Tratamos, de fato, de um esfera de raio a que apresenta *birrefringência* e/ou *dicroísmo* circulares [178], ou seja, exibe rotação óptica sem a necessidade de um campo magnético estático.

6.2.1 Relações de Drude-Born-Fedorov

Para a construção do problema, considere uma onda eletromagnética plana e monocromática $[\mathbf{E}(\mathbf{r}), \mathbf{H}(\mathbf{r})]^T e^{-i\omega t}$, onde ω é a frequência angular e T é o operador de transposição, isto é, o campo eletromagnético é um *hipervetor* em forma de coluna³⁹. Essa onda é incidente a uma esfera de raio a e cujas relações constitutivas são dadas por

$$\mathbf{D}_1 = \varepsilon_1^{(\text{DBF})} (\mathbf{E}_1 + \beta \nabla \times \mathbf{E}_1) , \quad (6.11)$$

$$\mathbf{B}_1 = \mu_1^{(\text{DBF})} (\mathbf{H}_1 + \beta \nabla \times \mathbf{H}_1) , \quad (6.12)$$

as quais são conhecidas como *relações de Drude-Born-Fedorov* (DBF) [179, 180]. As grandezas $\varepsilon_1^{(\text{DBF})}$, $\mu_1^{(\text{DBF})}$ e β são os coeficientes fenomenológicos que descrevem a atividade óptica da esfera quiral. Note que as Eqs. (6.11) e (6.12) são diferentes das relações constitutivas expressas nas Eqs. (6.1) e (6.2). Entretanto, como assumimos dependência temporal harmônica, as equações rotacionais de Maxwell tornam-se $\nabla \times \mathbf{E}_1 = i\omega \mathbf{B}_1$ e $\nabla \times \mathbf{H}_1 = -i\omega \mathbf{D}_1$ para ambos os conjuntos de equações. Definindo os parâmetros $\alpha = \beta\omega$ e $\gamma = \kappa/c$, podemos demonstrar facilmente que as relações constitutivas de Condon e DBF são equivalentes (*isomórficas*) pelas transformações [179, 180]:

$$\varepsilon_1^{(\text{DBF})} = \varepsilon_1 - \frac{\gamma^2}{\mu_1} , \quad (6.13)$$

³⁹ Como ficará claro adiante, essa notação *hipervetorial*, agregando os campos elétrico e magnético em um *único* vetor coluna, não é apenas conveniente para a resolução do problema: ela evidencia o fato de que estamos lidando com uma única entidade vetorial, o *campo eletromagnético*. Quando o meio não é opticamente ativo, esses campos se desacoplam e podemos tratá-los separadamente.

$$\mu_1^{(\text{DBF})} = \mu_1 - \frac{\gamma^2}{\varepsilon_1}, \quad (6.14)$$

$$\alpha = \frac{\gamma}{\varepsilon_1 \mu_1 - \gamma^2}, \quad (6.15)$$

com relações de inversão [179] $\varepsilon_1 = \varepsilon_1^{(\text{DBF})}/\zeta$, $\mu_1 = \mu_1^{(\text{DBF})}/\zeta$ e $\gamma = \alpha \varepsilon_1^{(\text{DBF})} \mu_1^{(\text{DBF})}/\zeta$, onde $\zeta = 1 - \alpha^2 \varepsilon_1^{(\text{DBF})} \mu_1^{(\text{DBF})}$. As relações (6.13)–(6.15) são interessantes porque nos levam à conclusão de que, embora claramente diferentes, *ambas* as representações da permissividade e permeabilidade do meio quiral estão corretas do ponto de vista do modelo matemático e da física que descrevem. Graças a essa constatação, podemos resolver o problema da esfera quiral usando duas representações *simultaneamente*: as grandezas de Lorenz-Mie (*seções de choque*) são calculadas no sistema de parâmetros materiais $[\varepsilon_1^{(\text{DBF})}, \mu_1^{(\text{DBF})}, \beta]$, de acordo com a solução de Bohren; e a média temporal da energia eletromagnética, fornecida pela Eq. (6.6), no sistema de parâmetros $(\varepsilon_1, \mu_1, \kappa)$.

Seguindo as Refs. [162, 181], podemos relacionar os parâmetros materiais da representação DBF aos índices de refração complexos m_L e m_R relacionados à esfera:

$$\beta = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{k_R} - \frac{1}{k_L} \right), \quad (6.16)$$

$$\omega \sqrt{\varepsilon_1^{(\text{DBF})} \mu_1^{(\text{DBF})}} = \left[\frac{1}{2} \left(\frac{1}{k_R} + \frac{1}{k_L} \right) \right]^{-1}, \quad (6.17)$$

onde $k_q = km_q$ é o número de onda no meio quiral $[\varepsilon_1^{(\text{DBF})}, \mu_1^{(\text{DBF})}, \beta]$, sendo q igual a L ou R para índices de refração associados às ondas circularmente polarizadas à esquerda (m_L) ou à direita (m_R), respectivamente⁴⁰, e k é o número de onda incidente. Explicitamente, temos $1/k_R = 1/k_1^{(\text{DBF})} + \beta$ e $1/k_L = 1/k_1^{(\text{DBF})} - \beta$, com $k_1^{(\text{DBF})} = \omega \sqrt{\varepsilon_1^{(\text{DBF})} \mu_1^{(\text{DBF})}}$. Uma vez que as partes reais de $\varepsilon_1^{(\text{DBF})}$ e $\mu_1^{(\text{DBF})}$ podem ambas assumir valores negativos, é conveniente escrever $k_1^{(\text{DBF})} = \omega \sqrt{\varepsilon_1^{(\text{DBF})}} \sqrt{\mu_1^{(\text{DBF})}}$ a fim de preservar o sinal correto da parte real do índice de refração efetivo k_1/k .

⁴⁰ A polarização de uma onda que se propaga em um meio quiral, e não seja circularmente polarizada, varia continuamente. Se em $z = 0$ ela é *linearmente polarizada*, em $z = h$ ela será *elipticamente polarizada*. A rotação óptica da polarização (birrefringência) e o dicroísmo circular (absorção dependente da polarização) são caracterizados pela grandeza complexa: $\Phi_T + i\Theta_T = (k_L - k_R)h/2$, onde Φ_T e Θ_T satisfazem as relações de Kramers-Kronig e representam, respectivamente, o ângulo de rotação óptica e a mudança de elipticidade [162].

6.2.2 Campos de Beltrami

Brevemente, a fim de determinarmos as expressões exatas do campo eletromagnético interno e coeficientes de Lorenz-Mie no caso *magnético*, revisitamos o método de solução do Bohren [162] para esferas quirais. As equações de Maxwell macroscópicas para ondas harmônicas na representação de DBF são: $(\nabla^2 + \mathcal{K}^2)(\mathbf{E}_1, \mathbf{H}_1)^T = (\mathbf{0}, \mathbf{0})^T$, $\nabla \times (\mathbf{E}_1, \mathbf{H}_1)^T = \mathcal{K}(\mathbf{E}_1, \mathbf{H}_1)^T$, $\nabla \cdot (\mathbf{E}_1, \mathbf{H}_1)^T = (0, 0)^T$, onde o “tensor de número de onda” é

$$\mathcal{K} = \frac{i\omega}{\zeta} \begin{pmatrix} -i\alpha\varepsilon_1^{(\text{DBF})}\mu_1^{(\text{DBF})} & \mu_1^{(\text{DBF})} \\ -\varepsilon_1^{(\text{DBF})} & -i\alpha\varepsilon_1^{(\text{DBF})}\mu_1^{(\text{DBF})} \end{pmatrix}.$$

Para diagonalizar $\mathcal{K}$ e simplificar o sistema de equações, podemos usar uma transformação linear que leva os campos eletromagnéticos aos *campos de Beltrami*

solenoidais [162, 181]: $(\mathbf{E}_1, \mathbf{H}_1)^T = \mathcal{A}(\mathbf{Q}_L, \mathbf{Q}_R)^T$, com $\mathcal{A}^{-1}\mathcal{K}\mathcal{A} = \begin{pmatrix} k_L & 0 \\ 0 & -k_R \end{pmatrix}$,

onde $\mathcal{A} = \begin{pmatrix} 1 & \alpha_R \\ \alpha_L & 1 \end{pmatrix}$, $\alpha_R = -i\sqrt{\mu_1^{(\text{DBF})}/\varepsilon_1^{(\text{DBF})}}$ e $\alpha_L = -1/\alpha_R$. As ondas

eletromagnéticas $\mathbf{Q}_L$ (levógira) e $\mathbf{Q}_R$ (dextrógira) são a base vetorial para a técnica de decomposição de Bohren e satisfazem independentemente a equação de Helmholtz vetorial: $(\nabla^2 + k^2)\mathbf{Q} = \mathbf{0}$, com $\nabla \times \mathbf{Q} = k\mathbf{Q}$ (condição de Beltrami) e $\nabla \cdot \mathbf{Q} = 0$ (campo solenoidal), onde $k = k_L$ para $\mathbf{Q} = \mathbf{Q}_L$ e $k = -k_R$ para $\mathbf{Q} = \mathbf{Q}_R$. Em coordenadas esféricas (r, θ, ϕ) , resolvendo a equação de Helmholtz vetorial pelo método dos harmônicos esféricos vetoriais (Seção 2.3), as componentes dos campos transformados $\mathbf{Q}_L = \mathbf{Q}_-$ e $\mathbf{Q}_R = \mathbf{Q}_+$ são:

$$\begin{aligned} \mathcal{Q}_{r,\pm} &= \pm \sum_{n=1}^{\infty} \frac{E_n}{\rho_q^2} \sin \theta \psi_n(\rho) n(n+1) \pi_n [f_{on} \sin \phi + f_{en} \cos \phi], \\ \mathcal{Q}_{\theta,\pm} &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{E_n}{\rho_q} \left\{ \cos \phi [f_{on} \pi_n \psi_n(\rho_q) \pm f_{en} \tau_n \psi'_n(\rho_q)] \right. \\ &\quad \left. + \sin \phi [\pm f_{on} \tau_n \psi'_n(\rho_q) - f_{en} \pi_n \psi_n(\rho_q)] \right\}, \\ \mathcal{Q}_{\phi,\pm} &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{E_n}{\rho_q} \left\{ \cos \phi [\pm f_{on} \pi_n \psi'_n(\rho_q) - f_{en} \tau_n \psi_n(\rho_q)] \right. \end{aligned}$$

$$+ \sin \phi [-f_{on} \tau_n \psi_n(\rho_q) \mp f_{en} \pi_n \psi'_n(\rho_q)] \Big\} ,$$

onde $E_n = E_0 i^n (2n+1)/[n(n+1)]$, $\rho_q = k_q r$ (com $q = \{L, R\}$) e E_0 é a amplitude elétrica da onda incidente. Os índices o e e indicam se os coeficientes internos f_n e g_n , obtidos via condições de contorno, ponderam harmônicos esféricos vetoriais com dependência angular ímpar (*odd*, $\sin \theta$) ou par (*even*, $\cos \theta$), respectivamente. As funções radiais $\psi_n(\rho_q)$ e $\xi_n(\rho_q)$ são funções de Riccati-Bessel e Riccati-Hankel, respectivamente, e π_n e τ_n são funções angulares (Apêndice D.1). As componentes do campo interno original $(\mathbf{E}_1, \mathbf{H}_1)^T$, calculadas pelas transformações $\mathbf{E}_1 = \mathbf{Q}_L + \alpha_R \mathbf{Q}_R$ e $\mathbf{H}_1 = \alpha_L \mathbf{Q}_L + \mathbf{Q}_R$, encontram-se explicitadas no Apêndice D.1.2 em conjunto com os campos espalhados.

6.2.3 Seções de choque e coeficientes de Lorenz-Mie

Uma vez calculados os campos eletromagnéticos, as propriedades do espalhamento podem ser analisadas via seções de choque. As eficiências de espalhamento, extinção e absorção (que são as respectivas seções de choque divididas por πa^2) são calculadas, respectivamente [1]:

$$Q_{\text{sca}, \pm} = \frac{2}{x^2} \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1) \{ |a_n|^2 + |b_n|^2 + 2|c_n|^2 \pm 2\text{Im}[(a_n + b_n) c_n^*] \} , \quad (6.18)$$

$$Q_{\text{ext}, \pm} = \frac{2}{x^2} \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1) \text{Re}(a_n + b_n \pm 2ic_n) , \quad (6.19)$$

$$Q_{\text{abs}, \pm} = Q_{\text{ext}, \pm} - Q_{\text{sca}, \pm} , \quad (6.20)$$

onde o sinal “+” é escolhido para ondas RCP e “−” para ondas LCP, de modo que as eficiências médias são dadas pela média aritmética: $Q_{\text{sca}} = (Q_{\text{sca},L} + Q_{\text{sca},R})/2$ e assim por diante. Os coeficientes de Lorenz-Mie de espalhamento (a_n , b_n , c_n e d_n) e internos (f_{on} , f_{en} , g_{on} e g_{en}), calculados via condições de contorno, são:

$$a_n = \frac{V_n^{(R)} A_n^{(L)} + V_n^{(L)} A_n^{(R)}}{W_n^{(L)} V_n^{(R)} + W_n^{(R)} V_n^{(L)}} , \quad (6.21)$$

$$b_n = \frac{W_n^{(R)} B_n^{(L)} + W_n^{(L)} B_n^{(R)}}{W_n^{(L)} V_n^{(R)} + W_n^{(R)} V_n^{(L)}} , \quad (6.22)$$

$$c_n = i \frac{W_n^{(R)} A_n^{(L)} - W_n^{(L)} A_n^{(R)}}{W_n^{(L)} V_n^{(R)} + W_n^{(R)} V_n^{(L)}} , \quad (6.23)$$

$$d_n = -c_n , \quad (6.24)$$

$$f_{on} = \frac{im_L W_n^{(R)}}{W_n^{(L)} V_n^{(R)} + W_n^{(R)} V_n^{(L)}} , \quad (6.25)$$

$$f_{en} = \frac{m_L V_n^{(R)}}{W_n^{(L)} V_n^{(R)} + W_n^{(R)} V_n^{(L)}} , \quad (6.26)$$

$$g_{on} = \frac{-im_R W_n^{(L)} \alpha_L}{W_n^{(L)} V_n^{(R)} + W_n^{(R)} V_n^{(L)}} , \quad (6.27)$$

$$g_{en} = \frac{m_R V_n^{(L)} \alpha_L}{W_n^{(L)} V_n^{(R)} + W_n^{(R)} V_n^{(L)}} , \quad (6.28)$$

onde as funções auxiliares são

$$A_n^{(q)} = \tilde{m} \psi_n(m_q x) \psi'_n(x) - \psi_n(x) \psi'_n(m_q x) , \quad (6.29)$$

$$B_n^{(q)} = \psi_n(m_q x) \psi'_n(x) - \tilde{m} \psi_n(x) \psi'_n(m_q x) , \quad (6.30)$$

$$V_n^{(q)} = \psi_n(m_q x) \xi'_n(x) - \tilde{m} \xi_n(x) \psi'_n(m_q x) , \quad (6.31)$$

$$W_n^{(q)} = \tilde{m} \psi_n(m_q x) \xi'_n(x) - \xi_n(x) \psi'_n(m_q x) , \quad (6.32)$$

com $x = ka$ sendo o parâmetro de tamanho. O índice de impedância *efetivo* $\tilde{m}$ é dado por

$$\tilde{m} = \sqrt{\frac{\mu_0 \varepsilon_1^{(\text{DBF})}}{\varepsilon_0 \mu_1^{(\text{DBF})}}} = \frac{\mu_0}{\mu_1^{(\text{DBF})}} \left[\frac{1}{2} \left(\frac{1}{m_R} + \frac{1}{m_L} \right) \right]^{-1} , \quad (6.33)$$

onde $m = \tilde{m} \mu_1^{(\text{DBF})} / \mu_0$ é o índice de refração efetivo associado ao meio quiral $[\varepsilon_1^{(\text{DBF})}, \mu_1^{(\text{DBF})}, \beta]$. Em particular, se o meio é não magnético $[\mu_1^{(\text{DBF})} = \mu_0]$, temos $m = \tilde{m}$ [1]. Note que, devido à decomposição dos campos internos em campos de Beltrami, os coeficientes internos g_{on} e g_{en} têm dimensões de α_L ; é esperado, portanto, que apareçam no cálculo de intensidades os produtos $\alpha_R g_{on}$ e $\alpha_R g_{en}$.

6.3 Energia eletromagnética interna

Nesta Seção, calculamos a média temporal da energia eletromagnética no interior de uma esfera quiral. Diferentemente da solução do Bohren para o espalhamento, em que as eficiências e os campos eletromagnéticos são descritos de maneira mais simples na representação de DBF $[\varepsilon_1^{(\text{DBF})}, \mu_1^{(\text{DBF})}, \beta]$, que é a mais

adequada para a construção dos campos de Beltrami, o cálculo da energia interna, entretanto, é melhor descrito na representação de Condon $(\varepsilon_1, \mu_1, \gamma)$, como pode ser verificado pelos coeficientes de energia da Eq. (6.6). A representação mais simples da energia interna em esferas quirais nos leva à coexistência de dois conjuntos de parâmetros: as intensidades são calculadas na representação de DBF e os parâmetros materiais que ponderam essas intensidades devem encontrar-se na representação de Condon.

Para calcularmos a energia armazenada dentro de uma partícula esférica, seguimos o mesmo procedimento do Capítulo 3 [106–108, 115], o qual consiste em integrar a densidade de energia no volume do centro espalhador, Eq. (6.10). Por simplicidade, definimos as contribuições parciais à energia W , uma vez que essa grandeza pode ser escrita como uma soma dos termos *elétrico*, *magnético* e de *acoplamento magneto-elétrico*:

$$W = W_E + W_H + W_{EH} , \quad (6.34)$$

onde $W_E = \varepsilon_{\text{eff}} \int_{\mathcal{V}} d^3r |\mathbf{E}_1|^2/4$, $W_H = \mu_{\text{eff}} \int_{\mathcal{V}} d^3r |\mathbf{H}_1|^2/4$ e $W_{EH} = \int_{\mathcal{V}} d^3r \text{Re}(\sigma_{\text{eff}} \mathbf{H}_1 \cdot \mathbf{E}_1^*)/2c$, com a região de integração $\mathcal{V}$ sendo o volume da esfera quiral. Para uma esfera de raio a , tendo as mesmas propriedades ópticas que o meio circundante (ε_0, μ_0) , a energia armazenada é $W_0 = 2\pi a^3 \varepsilon_0 |E_0|^2/3$ [106, 115], o que está de acordo com a Eq. (3.12) do Capítulo 3. Em particular, considere as contribuições radial, polar e azimutal à energia elétrica: $W_E = W_{Er} + W_{E\theta} + W_{E\phi}$. Explicitamente, a contribuição radial é

$$\begin{aligned} W_{Er} &= \frac{\varepsilon_{\text{eff}}}{4} \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^1 d(\cos \theta) \int_0^a dr r^2 |E_{1r}|^2 \\ &= \frac{3}{4a^3} W_0 \frac{\varepsilon_{\text{eff}}}{\varepsilon_0} \sum_{n=1}^{\infty} n(n+1)(2n+1) \int_0^a dr \left\{ (|f_{on}|^2 + |f_{en}|^2) \frac{|j_n(\rho_L)|^2}{|k_L|^2} \right. \\ &\quad \left. + |\alpha_R|^2 (|g_{on}|^2 + |g_{en}|^2) \frac{|j_n(\rho_R)|^2}{|k_R|^2} - 2\text{Re} \left[\alpha_R^* (f_{on} g_{on}^* + f_{en} g_{en}^*) \frac{j_n(\rho_L) j_n(\rho_R^*)}{k_L k_R^*} \right] \right\} , \end{aligned} \quad (6.35)$$

onde usamos $(2n+1) \int_{-1}^1 d(\cos \theta) \pi_n \pi_{n'} \sin^2 \theta = 2n(n+1) \delta_{n,n'}$ para simplificar essa expressão [1, 115]. Para que as integrais das funções radiais tenham solução analítica, é conveniente agruparmos as contribuições das componentes polar e azimutal [115]:

$W_{E\theta} + W_{E\phi} = \varepsilon_{\text{eff}} \int_V d^3r (|E_{1\theta}|^2 + |E_{1\phi}|^2)/4$, de forma que

$$\begin{aligned}
 W_{E\theta} + W_{E\phi} = & \frac{3}{4a^3} W_0 \frac{\varepsilon_{\text{eff}}}{\varepsilon_0} \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1) \int_0^a dr \left\{ (|f_{on}|^2 + |f_{en}|^2) \frac{|\psi_n(\rho_L)|^2 + |\psi'_n(\rho_L)|^2}{|k_L|^2} \right. \\
 & + |\alpha_R|^2 (|g_{on}|^2 + |g_{en}|^2) \frac{|\psi_n(\rho_R)|^2 + |\psi'_n(\rho_R)|^2}{|k_R|^2} \\
 & \left. - 2\text{Re} \left[\alpha_R^* (f_{on}g_{on}^* + f_{en}g_{en}^*) \frac{\psi'_n(\rho_L)\psi'_n(\rho_R^*) - \psi_n(\rho_L)\psi_n(\rho_R^*)}{k_L k_R^*} \right] \right\}, \quad (6.36)
 \end{aligned}$$

onde usamos as seguintes relações [115]: $(2n+1) \int_{-1}^1 d(\cos\theta) (\pi_n \pi_{n'} + \tau_n \tau_{n'}) = 2n^2(n+1)^2 \delta_{n,n'}$ e $\int_{-1}^1 d(\cos\theta) (\pi_n \tau_{n'} + \tau_n \pi_{n'}) = 0$.

Das relações de recorrência envolvendo funções esféricas de Bessel, $(2n+1)j_n(\rho) = \rho[j_{n-1}(\rho) + j_{n+1}(\rho)]$ e $(2n+1)j'_n(\rho) = nj_{n-1}(\rho) - (n+1)j_{n+1}(\rho)$ [100, 114], obtemos

$$\begin{aligned}
 \frac{(2n+1)}{\rho_A \rho_B^*} [n(n+1)j_n(\rho_A)j_n(\rho_B^*) + \psi'_n(\rho_A)\psi'_n(\rho_B^*)] &= nj_{n+1}(\rho_A)j_{n+1}(\rho_B^*) \\
 &+ (n+1)j_{n-1}(\rho_A)j_{n-1}(\rho_B^*), \quad (6.37)
 \end{aligned}$$

onde A e B podem ser tanto L quanto R. Note que o lado esquerdo da Eq. (6.37) aparece quando calculamos a média da energia elétrica W_E como a soma das Eqs. (6.35) e (6.36). De fato, o lado direito da Eq. (6.37) é usado para simplificar os cálculos, uma vez que temos a solução analítica da integral [114, 115]

$$\int_0^a dr r^2 j_n(\rho_A)j_n(\rho_B^*) = a^3 \frac{[y_B^* j_n(y_A)j'_n(y_B^*) - y_A j_n(y_B^*)j'_n(y_A)]}{y_A^2 - y_B^{*2}}, \quad (6.38)$$

com $y_A = m_A x$, $y_B = m_B x$, se supomos $m_A \neq \pm m_B^*$. Para $m_A = \pm m_B^*$, a regra de L'Hospital fornece [114, 115]

$$\lim_{m_A \rightarrow \pm m_B^*} \int_0^a dr r^2 j_n(m_A k r)j_n(m_B^* k r) = \frac{a^3 i^{(-1 \pm 1)n}}{2} [j_n^2(y_A) - j_{n-1}(y_A)j_{n+1}(y_A)]. \quad (6.39)$$

Portanto, definindo as funções adimensionais

$$\mathcal{I}_n^{(\text{AB})} = \frac{1}{a^3} \int_0^a dr \, r^2 j_n(m_A k r) j_n(m_B^* k r) , \quad (6.40)$$

$$\mathcal{F}_{n,\pm}^{(\text{AB})} = n \mathcal{I}_{n+1}^{(\text{AB})} + (n+1) \mathcal{I}_{n-1}^{(\text{AB})} \pm (2n+1) \mathcal{I}_n^{(\text{AB})} , \quad (6.41)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{S}^{(\pm)} = \sum_{n=1}^{\infty} \Bigg\{ & (|f_{on}|^2 + |f_{en}|^2) \mathcal{F}_{n,+}^{(\text{LL})} + |\alpha_R|^2 (|g_{on}|^2 + |g_{en}|^2) \mathcal{F}_{n,+}^{(\text{RR})} \\ & \pm 2\text{Re} \left[\alpha_R^* (f_{on} g_{on}^* + f_{en} g_{en}^*) \mathcal{F}_{n,-}^{(\text{LR})} \right] \Bigg\} , \end{aligned} \quad (6.42)$$

e somando $W_E = W_{Er} + W_{E\theta} + W_{E\phi}$, a partir das Eqs. (6.35) e (6.36), e usando a Eq. (6.37), obtemos finalmente

$$\frac{W_E}{W_0} = \frac{3}{4} \frac{\varepsilon_{\text{eff}}}{\varepsilon_0} \mathcal{S}_E, \quad (6.43)$$

onde $\mathcal{S}_E = \mathcal{S}^{(-)}$ é um somatório infinito associado à integral de volume de $|\mathbf{E}_1|^2$. Analogamente, dos cálculos de $W_H = W_{Hr} + W_{H\theta} + W_{H\phi}$ e $W_{EH} = W_{E Hr} + W_{E H\theta} + W_{E H\phi}$, obtemos os termos magnético e de acoplamento magneto-elétrico:

$$\frac{W_H}{W_0} = \frac{3}{4} |\tilde{m}|^2 \frac{\mu_{\text{eff}}}{\mu_0} \mathcal{S}_H, \quad (6.44)$$

$$\frac{W_{EH}}{W_0} = \frac{3}{2} \text{Im} (\tilde{m} \kappa_{\text{eff}} \mathcal{S}_{EH}) , \quad (6.45)$$

onde $\mathcal{S}_H = \mathcal{S}^{(+)}$ e

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_{EH} = \sum_{n=1}^{\infty} \Bigg\{ & (|f_{on}|^2 + |f_{en}|^2) \mathcal{F}_{n,+}^{(\text{LL})} - |\alpha_R|^2 (|g_{on}|^2 + |g_{en}|^2) \mathcal{F}_{n,+}^{(\text{RR})} \\ & - 2i \text{Im} \left[\alpha_R^* (f_{on} g_{on}^* + f_{en} g_{en}^*) \mathcal{F}_{n,-}^{(\text{LR})} \right] \Bigg\} \end{aligned} \quad (6.46)$$

são relacionadas às integrais de volume de $|\mathbf{H}_1|^2$ e $(\mathbf{E}_1^* \cdot \mathbf{H}_1)$, respectivamente. Na Eq. (6.46), consideramos o fato de que $\sqrt{\mu_0/\varepsilon_0} = i\tilde{m}\alpha_R$. As Eqs. (6.43)–(6.45) são os principais resultados analíticos deste Capítulo. Juntas com as relações constitutivas e parâmetros associadas a um CMM de ressonância simples, Eqs. (6.1)–(6.5) e Eqs. (6.7)–(6.9), e as relações de transformação desse sistema de parâmetros para a abordagem de DBF, Eqs. (6.13)–(6.15), podemos prontamente calcular a média temporal da energia eletromagnética W dentro de uma esfera de CMM. Em particular, podemos também obter a média temporal da potência dissipada

$\langle P \rangle_t / \langle P_0 \rangle_t$ a partir da energia interna W/W_0 mediante as seguintes substituições nas Eqs. (6.43)–(6.45) [172]:

$$\frac{\varepsilon_{\text{eff}}}{2} \rightarrow \omega \varepsilon_1''(\omega) = \varepsilon_0 \left[\frac{\Gamma \omega^2 \omega_p^2}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \Gamma^2 \omega^2} \right], \quad (6.47)$$

$$\frac{\mu_{\text{eff}}}{2} \rightarrow \omega \mu_1''(\omega) = \mu_0 \left[\frac{\Gamma F \omega^4}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \Gamma^2 \omega^2} \right], \quad (6.48)$$

$$\frac{\kappa_{\text{eff}}}{2} \rightarrow \omega \kappa''(\omega) = \frac{-i \Gamma A \omega^3}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \Gamma^2 \omega^2}, \quad (6.49)$$

onde $(\varepsilon_1'', \mu_1'', \kappa'') = \text{Im}(\varepsilon_1, \mu_1, \kappa)$, isto é, a parte imaginária das grandezas constitutivas.

De acordo com as Refs. [108, 116], a potência dissipada $\langle P \rangle_t$ é proporcional a Q_{abs} , e, por conseguinte, depende de S_E , S_H e S_{EH} calculados acima. Usando esse fato, e definindo a eficiência de absorção média devida às ondas RCP e LCP como sendo $Q_{\text{abs}} \equiv (Q_{\text{abs,L}} + Q_{\text{abs,R}})/2$, obtemos uma *relação analítica exata* entre os campos internos e a eficiência de absorção:

$$\begin{aligned} Q_{\text{abs}} &= \frac{8x}{3} \left[\frac{\varepsilon_1''}{\varepsilon_{\text{eff}}} \frac{W_E}{W_0} + \frac{\mu_1''}{\mu_{\text{eff}}} \frac{W_H}{W_0} + \frac{3}{2} \text{Re}(\tilde{m} \kappa'' S_{EH}) \right] \\ &= 2x \left[\frac{\varepsilon_1''}{\varepsilon_0} S_E + |\tilde{m}|^2 \frac{\mu_1''}{\mu_0} S_H + 2 \text{Re}(\tilde{m} \kappa'' S_{EH}) \right], \end{aligned} \quad (6.50)$$

onde $x = ka$ é o parâmetro de tamanho. Para esferas fracamente absorptivas com índice de refração positivo $m = m' + im''$ ($m'' \ll m'$), é bem conhecido que $W/W_0 \approx (8/3)m'x(Q_{\text{abs}}/m'')$ [106, 115]. Portanto, no regime de fraca absorção, podemos calcular o comportamento da energia interna W a partir de Q_{abs} .

6.4 Cálculo numérico das eficiências e energia interna

Apresentamos aqui os cálculos numéricos auferidos a partir de um código que escrevemos para o *software* livre *Scilab* 5.4.1. De acordo com Zhao *et al.* [173], escolhemos parâmetros realistas para a esfera de CMM na faixa espectral de Terahertz: $\omega_0 = \omega_p = 2$ THz and $\Gamma = 0,05\omega_0$. A aplicação dos parâmetros constitutivos *efetivos* $(\varepsilon_1, \mu_1, \kappa)$ é válida para parâmetros de tamanho $x = ka \ll 1$. Para $\omega \sim 10^{12}$ Hz, a condição $ka < 1$ é satisfeita para $a \sim 10^{-4}$ m. Como resultado,

Figura 6.2 – Espalhamento eletromagnético por uma esfera de metamaterial quiral (CMM) de raio $a = 5 \times 10^{-5}$ m, $\omega_0 = \omega_p = 2$ THz e $\Gamma = 0,05\omega_0$, em função da frequência ω . (a) A parte real do índice de refração LCP (m_L) para três parâmetros de quiralidade $\kappa(\omega)$ com $F = 0,1; 0,5; 0,9$. (b) A eficiência de extinção LCP ($Q_{\text{ext,L}}$) correspondente. Não há índices de refração negativos para esses parâmetros.

para assegurarmos a aplicabilidade dos parâmetros efetivos do CMM, restringimos todos os cálculos numéricos a esse intervalo de parâmetros, com $a = 5 \times 10^{-5}$ m e $1,25 \text{ THz} < \omega < 3,75 \text{ THz}$, os quais correspondem a $0,2 < ka < 0,7$.

Figura 6.3 – Esfera de metamaterial quiral (CMM) de raio $a = 5 \times 10^{-5}$ m, $\omega_0 = \omega_p = 2 \text{ THz}$ e $\Gamma = 0,05\omega_0$. (a) A parte real do índice de refração RCP (m_R) para três parâmetros de quiralidade $\kappa(\omega)$ com $F = 0,1; 0,5; 0,9$. (b) A eficiência de extinção RCP ($Q_{\text{ext,R}}$) correspondente. Índices de refração negativos para ondas RCP ocorrem nas frequências $\omega > \omega_0$.

Nas Figs. 6.2 e 6.3, mostramos as eficiências de extinção e índices de refração associados para ondas LCP e RCP, respectivamente, correspondentes ao espalhamento eletromagnético por uma esfera de CMM com parâmetros efetivos descritos pelas Eqs (6.3)–(6.5). Três valores de parâmetros de preenchimento F são aqui considerados: $F = 0,1; 0,5; 0,9$. No gráfico da Fig. 6.2(a), note que a parte real de m_L não assume valores negativos e decresce com o parâmetro de preenchimento F para frequências $\omega < \omega_0$ e aumenta para frequências $\omega > \omega_0$, aproximadamente. Como pode ser notado na Fig. 6.2(b), $Q_{\text{ext,L}}$ decresce com o aumento do parâmetro de quiralidade $|\kappa| \propto F^{1/2}$ e basicamente segue o gráfico da Fig. 6.2(a). Um comportamento oposto às ondas LCP pode ser confirmado na Fig. 6.3. Para frequências $\omega > \omega_0$, a parte real de m_R é negativa e $|m_R|$ aumenta com o parâmetro de quiralidade κ , como pode ser visto na Fig. 6.3(a). Isso leva a um aumento em $Q_{\text{ext,R}}$, Fig. 6.3(b), onde o pico de ressonância para $\text{Re}(m_R) < 0$ é deslocado para altas frequências ($\omega > \omega_0$).

Um resultado interessante é obtido quando calculamos a energia interna no interior de uma esfera de CMM, Fig. 6.4(a). Note que, na Fig. 6.4(b), embora a eficiência de extinção média $Q_{\text{ext}} = (Q_{\text{ext,L}} + Q_{\text{ext,R}})/2$ aumente com o parâmetro de quiralidade κ para $\omega > \omega_0$ e $\text{Re}(m_R) < 0$, a energia interna decresce simultaneamente. Para parâmetros de quiralidade suficientemente grandes, as ondas LCP tendem a ser suprimidas, como pode ser visto na Fig. 6.2(b). De forma equivalente, a forte quiralidade favorece as reflexões de ondas RCP na interface entre a esfera de CMM e o meio circundante. Uma vez que Q_{ext} é uma função crescente de κ para $\text{Re}(m_R) < 0$, concluímos que, nesse regime de frequência, as ondas incidentes são fortemente refletidas pela superfície da esfera e, por esta razão, contribuem pouco para a energia interna. Em particular, o platô de ressonância na Fig. 6.4(a), centrado em $\omega = \omega_0$, é claramente dependente dos parâmetros de absorção, uma vez que $\text{Re}[m_R(\omega_0)] \approx 0$ [veja Fig. 6.3(a)]. Ademais, esse platô também depende da quiralidade (ele aumenta em função de F), o que sugere uma relação entre a formação dessa ressonância e a interferência entre as ondas LCP e RCP dentro da esfera de CMM.

Na Fig. 6.5, usamos os mesmos parâmetros do início desta Seção, assumindo agora $F = 0,9$ (“forte” quiralidade) como função do coeficiente de absorção $\Gamma = G\omega_0$,

Figura 6.4 – Esfera de metamaterial quiral (CMM) de raio $a = 5 \times 10^{-5}$ m, $\omega_0 = \omega_p = 2$ THz, e $\Gamma = 0,05\omega_0$. (a) Média temporal da energia W dentro da esfera de CMM para $F = 0, 1; 0,5; 0,9$. (b) Eficiência média de extinção Q_{ext} correspondente. O decréscimo em W para $\omega > \omega_0$ coincide com o aumento de Q_{ext} .

Figura 6.5 – Esfera de metamaterial quiral (CMM) de raio $a = 5 \times 10^{-5}$ m, fator de preenchimento $F = 0,9$ e $\omega_0 = \omega_p = 2$ THz para alguns valores de parâmetros de absorção $\Gamma = G\omega_0$: $G = 0,01$; $0,05$; $0,09$. (a) A eficiência média de absorção Q_{abs} . (b) A eficiência média de extinção Q_{ext} . O *inset* mostra a eficiência de espalhamento Q_{sca} para $G = 0,01$. (c) A energia total W . Para $\omega \approx \omega_0$, um decréscimo em Q_{abs} e Q_{ext} não necessariamente coincide com um decréscimo em W .

com $G = 0,01; 0,05; 0,09$. Aqui, notamos algumas regiões onde a fraca absorção ($Q_{\text{abs}} < 1$) leva a uma fraca extinção ($Q_{\text{ext}} < 1$), e o aumento simultâneo da quantidade de energia armazenada na esfera de CMM ($W/W_0 \gg 1$). Esse efeito ocorre na vizinhança de $\omega = \omega_0$ para $G = 0,01$, veja Figs. 6.5(a), 6.5(b) e 6.5(c). Devido ao termo de interferência $\mathcal{S}_{EH}$ nas Eqs. (6.45) e (6.50), há picos de ressonância em W e Q_{abs} em torno de $\omega = \omega_0$ que não correspondem a um pico na eficiência de espalhamento em $Q_{\text{sca}} = (Q_{\text{sca,L}} + Q_{\text{sca,R}})/2$. Esse comportamento, que é confirmado comparando-se as Figs. 6.5(b) e 6.5(c), indica a existência de um possível aumento de intensidade de campo dentro da esfera de CMM fora da ressonância de espalhamento para $\omega \approx \omega_0$ induzida pela baixa absorção.

Os picos de ressonância em W (campo próximo) que não necessariamente correspondem a ressonâncias em Q_{sca} ou Q_{ext} (campo distante) estão associados aos então chamados “estados escuros” (*dark states*), que discutimos nos Capítulos 3 e 6. Esse aumento de intensidade de campo fora da ressonância foi reportado para esferas concêntricas e resulta do efeito Fano no espalhamento eletromagnético [67, 83]. A presença desses “estados escuros” pode ser inferida também pela análise da densidade de energia eletromagnética [108]. Aqui, as ressonâncias de Fano convencionais estão relacionadas às interferências entre dois coeficientes de Lorenz-Mie diferentes [55], tais como $f_n g_n^*$ em W , Eqs. (6.42) e (6.46), e $a_n c_n^*$ em Q_{sca} , Eq. (6.18). A análise da Fig. 6.5 não apenas revela que o aumento de campo interno fora da ressonância ocorre para esferas de CMM, mas também mostra que uma forte quiralidade e fraca absorção favorecem a emergência de “estados escuros” no limite de pequenas partículas.

6.5 Conclusões

Calculamos analiticamente a média temporal da energia eletromagnética no interior de uma esfera de metamaterial quiral (CMM) usando um conjunto de parâmetros dispersivos realistas provenientes de uma teoria de meios efetivos. A partir da decomposição do campo eletromagnético em ondas esféricas circularmente polarizadas à esquerda e à direita (campos de Beltrami), obtivemos os campos internos para o caso magnético e os respectivos coeficientes de Lorenz-Mie na

representação de Drude-Born-Fedorov. Uma vez que a densidade de energia em meios quirais isotrópicos é comumente calculada tomando como base as relações constitutivas da representação de Condon, uma transformação de parâmetros foi aplicada a fim de obtermos uma expressão exata para a energia interna. Em particular, expressamos a eficiência de absorção em termos da energia interna e parâmetros constitutivos. Embora a energia interna decresça com o parâmetro de quiralidade na região de refração negativa para ondas RCP, a eficiência de extinção média aumenta à medida que o parâmetro de quiralidade cresce. Nossos resultados revelam que, no limite de pequenas partículas, o aumento de campo fora da ressonância ocorre para esferas fracamente absorptivas e com forte quiralidade. Mostramos que este efeito é devido a interferências entre diferentes momentos de multipolo, que levam a ressonâncias de Fano no espalhamento eletromagnético. Acreditamos que os resultados deste Capítulo possam ser explorados em aplicações envolvendo espalhadores de CMM em combinação com revestimentos metálicos, o que possibilitaria mais graus de liberdade para controlar as ressonâncias assimétricas e “estados escuros”.

Cilindros revestidos sob incidência oblíqua de radiação

A pesquisa em espalhamento eletromagnético por cilindros circulares tem uma longa história [2, 182, 183]. Atualmente, ela encontra diversas aplicações importantes em fotônica⁴¹, tais como os *mantos plasmônicos* [185, 186], por exemplo, com aplicações envolvendo *metamateriais compósitos* [126] e *ressonâncias de Fano* em nanotecnologia [187]. Historicamente, a primeira solução analítica para o caso geral de um cilindro homogêneo infinito sob incidência oblíqua de radiação foi calculada por Wait em 1955 [188]. Uma década mais tarde, essa solução foi analisada numérica e experimentalmente por Lind e Greenberg [189], que estudaram a influência do *ângulo de incidência* e do tamanho *finito* no caso de um cilindro real. Para a incidência normal de radiação, Kerker e Matijevic em 1961 [190] abordaram o espalhamento por *cilindros concêntricos*, cuja solução analítica foi generalizada por Shah em 1970 [191] para um ângulo de incidência arbitrário.

Neste Capítulo, calculamos uma solução completa para o espalhamento de ondas eletromagnéticas por cilindros concêntricos (ou revestidos), infinitamente longos, sob incidência oblíqua de ondas planas. Nosso objetivo, como nos Capítulos anteriores, é analisar as ressonâncias dos campos internos em relação às seções de choque totais e diferenciais via energia armazenada no centro espalhador. A energia eletromagnética dentro de uma partícula espalhadora, como discutimos nos Capítulos 3 e 6, é uma observável que relaciona as ressonâncias do campo

⁴¹ Os principais resultados deste Capítulo encontram-se, em grande parte, publicados no *Journal of the Optical Society of America A* (2014) sob o título: “*Electromagnetic energy within coated cylinders at oblique incidence and applications to graphene coatings*” [184].

próximo às ressonâncias de espalhamento no campo distante [106, 115, 192] – com aplicações, por exemplo, no cálculo da velocidade de transporte de energia em meios desordenados [90, 107, 193]. De fato, a energia interna pode ser escrita em termos da seção de choque de absorção [108, 116, 160], tornando possível a investigação das correlações entre grandezas no campo próximo e distante. Usualmente, ressonâncias dentro de centros espalhadores homogêneos são analisadas via seções de choque de espalhamento e extinção, que são proporcionais às intensidades dos campos eletromagnéticos espalhados [1, 2], como discutido na Seção 2.4. No entanto, para partículas estratificadas ou revestidas, foi demonstrado que ressonâncias no *campo próximo* não necessariamente se acoplam às ressonâncias no *campo distante* [67], um fenômeno explicado em termos do efeito Fano [83, 134, 149, 187], como demonstramos no Capítulo 4. Assim, para se entender completamente o espalhamento eletromagnético por partículas revestidas, é portanto importante o conhecimento de grandezas que relacionam os campos espalhados aos campos internos em cada uma das estruturas que compõem o centro espalhador.

A fim de obtermos um funcional de energia, calculamos analiticamente os campos eletromagnéticos dentro de dois cilindros concêntricos usando a mesma notação de *Bohren & Huffman* [1]. Estudamos numericamente os efeitos de ressonância dos revestimentos plasmônicos em cilindros dielétricos em função do ângulo de incidência, que são geometrias importantes para dispositivos fotônicos [194, 195]. Para isso, aplicamos nossos resultados a uma situação experimental realista, consistindo de um cilindro com uma alta constante dielétrica revestido por uma camada de meio efetivo composta de uma folha de grafeno crescida *epitaxialmente*⁴² em uma camada de carbetto de silício (SiC) [198]. A ideia é investigar, na estrutura cilíndrica, ressonâncias localizadas de plásmons que ocorrem em materiais baseados em grafeno [199].

7.1 Eficiências para cilindros concêntricos

Das geometrias não esféricas de centros espalhadores, a geometria cilíndrica é uma das mais simples para se tratar analiticamente – principalmente para a

⁴² A *epitaxia* é uma técnica bastante utilizada em nanotecnologia [196, 197] e refere-se ao crescimento ou deposição de filmes cristalinos sobre um substrato.

incidência normal de radiação, onde ela pode ser encarada como o caso *bidimensional* do espalhamento de Lorenz-Mie [2]. Para nosso tratamento analítico, no entanto, consideramos o caso mais geral de um *ângulo arbitrário de incidência*. Como ilustra a Fig. 7.1, consideramos um centro espalhador consistindo de dois cilindros circulares concêntricos, retos e infinitamente longos⁴³, com raios interno a e externo b arbitrários. Ambos os materiais do cilindro interior e da camada cilíndrica são lineares, homogêneos e isotrópicos, com parâmetros materiais (ε_1, μ_1) para o cilindro interior ($0 \leq r \leq a$), (ε_2, μ_2) para a camada cilíndrica ($a \leq r \leq b$) e (ε_0, μ_0) para o meio circundante ($r \geq b$), que é assumido como sendo o espaço livre. Diferentemente

Figura 7.1 – Geometria do centro espalhador: um cilindro (ε_1, μ_1) de raio a revestido por uma camada cilíndrica (ε_2, μ_2) de espessura $d = b - a$ imerso no meio (ε_0, μ_0) . (a) Uma onda plana propagando-se no plano xz é incidente ao cilindro e faz um ângulo ζ com o eixo z . (b) Uma seção transversal do cilindro revestido no plano xy .

⁴³ O modelo de cilindro *infinito* corresponde a uma boa aproximação para situações reais em que o comprimento de onda incidente é muito menor que o comprimento axial do cilindro. Em particular, no espalhamento por uma coleção de partículas, a aproximação de “partícula isolada” vale para a incidência normal de radiação em cilindros paralelos (meio desordenado bidimensional), uma vez que um cilindro infinito nunca será isolado.

do caso esférico, em que apenas um estado de polarização é suficiente para se resolver o espalhamento para todas as polarizações possíveis, a geometria cilíndrica impõe no mínimo dois estados ortogonais para que o espalhamento seja descrito de modo completo. Dessa forma, é imperativo que analisemos duas configurações distintas (e *linearmente independentes*) de campos harmônicos interagindo com o cilindro – tendo, por exemplo, o eixo de simetria do sistema como a referência. De acordo com a Fig. 7.1, fixamos o vetor de onda incidente no plano xz do sistema de coordenadas retangulares: $\mathbf{k} = -k(\hat{\mathbf{x}} \sin \zeta + \hat{\mathbf{z}} \cos \zeta)$, onde ζ é o ângulo entre a direção de incidência da onda ($\hat{\mathbf{k}}$) e o eixo z (eixo do cilindro), com $k = \omega\sqrt{\varepsilon_0\mu_0}$. Podemos, assim, diferenciar dois *estados ortogonais*: o caso I ou modo TM (magnético transversal), em que $\mathbf{H}_i \perp \hat{\mathbf{z}}$; e o caso II ou modo TE (elétrico transversal)⁴⁴, em que $\mathbf{E}_i \perp \hat{\mathbf{z}}$ [1,2]. Por conveniência dos casos limites e consistência em relação aos Capítulos anteriores, os campos incidentes e a notação que usamos são as mesmas de *Bohren & Huffman* [1] no caso de um cilindro homogêneo. O método usado para resolver o problema de espalhamento é o mesmo descrito na Seção 2.3. Os campos eletromagnéticos em cada uma das regiões delimitadas na Fig. 7.1, bem como as condições de contorno dos mesmos, encontram-se no Apêndice D.2.

Na teoria de Lorenz-Mie, as propriedades de espalhamento são usualmente analisadas via *seções de choque* [1,2]. Todavia, como consideramos um cilindro infinito e as grandezas físicas devem permanecer *finitas*, as seções de choque são necessariamente calculadas por unidade de comprimento do cilindro. Para espalhadores cilíndricos sob incidência oblíqua, as eficiências de espalhamento, extinção e absorção (que são as respectivas seções de choque em unidades da seção de choque geométrica, ambas por unidade de comprimento) são, respectivamente [1]:

$$Q_{\text{sca}} = \frac{2}{y} \sum_{n=-\infty}^{\infty} (|a_n|^2 + |b_n|^2) , \quad (7.1)$$

$$Q_{\text{ext}} = \frac{2}{y} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \text{Re}(a_n + b_n) , \quad (7.2)$$

$$Q_{\text{abs}} = Q_{\text{ext}} - Q_{\text{sca}} . \quad (7.3)$$

⁴⁴ Uma outra convenção, no caso da incidência normal, define os modos TM e TE usando como referência o *versor radial* $\hat{\mathbf{r}}$ (raio do cilindro) e não o *versor axial* $\hat{\mathbf{z}}$ (eixo do cilindro), de forma que as polarizações TM e TE são dadas, respectivamente, pelos casos II ($H_r = 0$) e I ($E_r = 0$) deste Capítulo. Veja, *e.g.*, as Refs. [187, 200, 201].

Por conveniência, escrevemos as eficiências em uma forma funcional bastante parecida com as do espalhamento por esferas concêntricas, definidas na Seção 3.1. Essa forma de se escrever as eficiências para o cilindro, sem diferenciar as polarizações TM e TE, e com a eficiência de extinção (Q_{ext}) contendo os dois coeficientes de espalhamento (a_n e b_n), não é a mais usual [1, 2, 191]. Como ficará evidente ao longo deste Capítulo, esse formalismo nos permite escrever as grandezas de espalhamento de maneira *compacta*, onde a dependência da polarização aparece tão-somente na troca dos índices (I) por (II), os quais designam os modos TM e TE, respectivamente. Em particular, as eficiências de retroespalhamento (radar) e espalhamento para frente, oriundas das seções de choque *diferenciais* (Seção 2.4), são, respectivamente:

$$Q_{\text{back}} = \frac{2}{\pi y} \left| \sum_{n=-\infty}^{\infty} (-1)^n (a_n - b_n) \right|^2, \quad (7.4)$$

$$Q_{\text{foward}} = \frac{2}{\pi y} \left| \sum_{n=-\infty}^{\infty} (a_n + b_n) \right|^2. \quad (7.5)$$

Definidas as principais eficiências totais e diferenciais, os coeficientes para os modos TM (caso I) e TE (caso II), obtidos via condições de contorno (Apêndice D.2.1), são expressos por:

$$a_n^{(\text{I})} = \frac{\imath}{\mu_2} \frac{\eta_2 J_n(\eta_2 y)}{\eta_0 H_n^{(1)}(\eta_0 y)} \frac{[\bar{\mathcal{V}}_n \mathcal{P}_n^{(\text{I})} + \bar{\mathcal{C}}_n \mathcal{Q}_n^{(\text{I})}] \gamma_n}{\bar{\mathcal{V}}_n \mathcal{R}_n^{(\text{I})}}, \quad (7.6)$$

$$b_n^{(\text{I})} = \frac{1}{m_2} \frac{\eta_2 J_n(\eta_2 y)}{\eta_0 H_n^{(1)}(\eta_0 y)} \frac{[\bar{\mathcal{A}}_n \mathcal{P}_n^{(\text{I})} + \mathcal{Q}_n^{(\text{I})}]}{\bar{\mathcal{V}}_n \mathcal{R}_n^{(\text{I})}} + \frac{J_n(\eta_0 y)}{H_n^{(1)}(\eta_0 y)}; \quad (7.7)$$

$$a_n^{(\text{II})} = \frac{1}{\mu_2} \frac{\eta_2 J_n(\eta_2 y)}{\eta_0 H_n^{(1)}(\eta_0 y)} \frac{[\bar{\mathcal{B}}_n \mathcal{P}_n^{(\text{II})} + \mathcal{Q}_n^{(\text{II})}]}{\bar{\mathcal{W}}_n \mathcal{R}_n^{(\text{II})}} + \frac{J_n(\eta_0 y)}{H_n^{(1)}(\eta_0 y)}, \quad (7.8)$$

$$b_n^{(\text{II})} = -\frac{\imath}{m_2} \frac{\eta_2 J_n(\eta_2 y)}{\eta_0 H_n^{(1)}(\eta_0 y)} \frac{[\bar{\mathcal{W}}_n \mathcal{P}_n^{(\text{II})} + \bar{\mathcal{D}}_n \mathcal{Q}_n^{(\text{II})}] \gamma_n}{\bar{\mathcal{W}}_n \mathcal{R}_n^{(\text{II})}}, \quad (7.9)$$

onde J_n e $H_n^{(1)}$ são as funções esféricas de Bessel e Hankel de primeiro tipo. A dependência com o ângulo de incidência⁴⁵ encontra-se nas funções $\gamma_n \equiv n \cos \zeta$ e $\eta_q \equiv$

⁴⁵ Em óptica, o *ângulo de incidência* é definido como sendo o ângulo formado entre o feixe incidente e a normal à superfície de incidência. Aqui, por brevidade, chamamos o ângulo ζ de “ângulo de incidência”, quando, em realidade, ele é o ângulo complementar – veja Fig. 7.1. Essa escolha está vinculada à consistência da notação: enquanto a variável angular natural do espalhamento por esferas é $\cos \theta$, aqui, para a incidência oblíqua, a variável natural é $\cos \zeta$.

$\sqrt{m_q^2 - \cos^2 \zeta}$, com $m_q = \sqrt{\varepsilon_q/\varepsilon_0} \sqrt{\mu_q/\mu_0}$ sendo o índice de refração relativo do meio $q = \{0, 1, 2\}$, Fig. 7.1, com respeito ao meio circundante (ε_0, μ_0) [108]. A impedância relativa é $\tilde{m}_q = m_q \mu_0 / \mu_q$ [19, 110]. Uma vez que a parte real de m_q pode ser negativa, é conveniente escrevermos $\eta_q = \sqrt{m_q - \cos \zeta} \sqrt{m_q + \cos \zeta}$, de modo que na ausência de absorção e incidência normal ($\zeta = 90^\circ$), temos $\eta_q = -|m_q|$ [108]. Os parâmetros de tamanho são $x = ka$ (cilindro interior) e $y = kb$ (cilindro exterior). Para não prejudicarmos a continuidade do texto, as demais funções auxiliares que entram nas Eqs. (7.6)–(7.9), com expressões analíticas bastante complicadas, são definidas no Apêndice D.2. Em particular, os coeficientes calculados para a incidência oblíqua de radiação são simplificados para $\zeta = 90^\circ$ (incidência normal). Neste ângulo de incidência, obtemos $a_n^{(I)} = b_n^{(II)} = 0$ para todo $n \in \mathbb{Z}$, permanecendo os coeficientes:

$$a_n = a_n^{(II)} = \frac{\tilde{m}_2 J'_n(y) [J_n(m_2 y) - \mathcal{A}_n Y_n(m_2 y)] - J_n(y) [J'_n(m_2 y) - \mathcal{A}_n Y'_n(m_2 y)]}{\tilde{m}_2 H_n^{(1)}(y) [J_n(m_2 y) - \mathcal{A}_n Y_n(m_2 y)] - H_n^{(1)}(y) [J'_n(m_2 y) - \mathcal{A}_n Y'_n(m_2 y)]},$$

$$b_n = b_n^{(I)} = \frac{J'_n(y) [J_n(m_2 y) - \mathcal{B}_n Y_n(m_2 y)] - \tilde{m}_2 J_n(y) [J'_n(m_2 y) - \mathcal{B}_n Y'_n(m_2 y)]}{H_n^{(1)}(y) [J_n(m_2 y) - \mathcal{B}_n Y_n(m_2 y)] - \tilde{m}_2 H_n^{(1)}(y) [J'_n(m_2 y) - \mathcal{B}_n Y'_n(m_2 y)]},$$

com funções auxiliares

$$\mathcal{A}_n = \frac{\tilde{m}_1 J_n(m_1 x) J'_n(m_2 x) - \tilde{m}_2 J'_n(m_1 x) J_n(m_2 x)}{\tilde{m}_1 J_n(m_1 x) Y'_n(m_2 x) - \tilde{m}_2 J'_n(m_1 x) Y_n(m_2 x)}, \quad (7.10)$$

$$\mathcal{B}_n = \frac{\tilde{m}_2 J_n(m_1 x) J'_n(m_2 x) - \tilde{m}_1 J'_n(m_1 x) J_n(m_2 x)}{\tilde{m}_2 J_n(m_1 x) Y'_n(m_2 x) - \tilde{m}_1 J'_n(m_1 x) Y_n(m_2 x)}. \quad (7.11)$$

Essas expressões para a incidência normal são bem conhecidas [190] e funcionam, no regime de *espalhamento múltiplo*, como o caso *bidimensional* do espalhamento de Lorenz-Mie [193]. Graças à notação adequada, a forma dos coeficientes a_n e b_n aqui definidos é idêntica à dos coeficientes de espalhamento elétrico (a_n) e magnético (b_n) para esferas concêntricas, respectivamente. De fato, fazendo-se a substituição (ψ_n, χ_n, ξ_n) por (J_n, Y_n, H_n) nas Eqs. (3.6) e (3.7) do Capítulo 3, reobtemos os coeficientes TE e TM para incidência normal em um cilindro revestido infinito.

7.2 Energia eletromagnética interna

Ressonâncias dentro dos centros espalhadores são diretamente calculadas via intensidades dos campos internos ou por grandezas que delas dependam, tais como a energia eletromagnética armazenada. Para um campo eletromagnético $(\mathbf{E}_q, \mathbf{H}_q)$

confinado em um meio não opticamente ativo ($\varepsilon_q = \varepsilon'_q + i\varepsilon''_q, \mu_q = \mu'_q + i\mu''_q$), a média temporal da densidade de energia é $\langle u_q \rangle_t = (1/4)[\varepsilon_q^{(\text{eff})}|\mathbf{E}_q|^2 + \mu_q^{(\text{eff})}|\mathbf{H}_q|^2]$, onde $[\varepsilon_q^{(\text{eff})}, \mu_q^{(\text{eff})}]$ são os coeficientes de energia associados ao meio $q = \{1, 2\}$. Considerando o sistema de coordenadas cilíndricas (r, ϕ, z) e usando a mesma notação da Seção 3.2, a energia eletromagnética no segmento L de uma casca cilíndrica finita $l_1 \leq r \leq l_2$ é dada por:

$$W_q(l_1, l_2) = \int_{-L/2}^{L/2} dz \int_0^{2\pi} d\phi \int_{l_1}^{l_2} dr r \langle u_q \rangle_t . \quad (7.12)$$

A Eq. (7.12) fornece, portanto, para $l_1 = 0, l_2 = a$ e $q = 1$, a energia eletromagnética no interior do segmento L do “caroço” cilíndrico $0 \leq r \leq a$ da Fig. 7.1. Similarmente, para $l_1 = a, l_2 = b$ e $q = 2$, calculamos a energia armazenada no segmento L da camada cilíndrica $a \leq r \leq b$. Se a região $l_1 \leq r \leq l_2$ tem as mesmas propriedades ópticas do meio circundante (ε_0, μ_0) , segue que [107, 115]:

$$W_0(l_1, l_2) = \frac{\varepsilon_0}{2} |E_0|^2 \pi (l_2^2 - l_1^2) L . \quad (7.13)$$

Para o cálculo analítico da energia interna são necessárias algumas relações envolvendo funções de Bessel cilíndricas e suas derivadas. Mediante as relações de recorrência $nZ_n(\rho) = \rho Z_{n-1}(\rho) - \rho Z'_n(\rho)$ e $\rho Z'_n(\rho) = nZ_n(\rho) - \rho Z_{n+1}(\rho)$, para quaisquer funções cilíndricas de Bessel ou Neumann Z_n [114], obtemos:

$$\begin{aligned} & 2 \left| An \frac{J_n(\rho)}{\rho} - B J'_n(\rho) + Cn \frac{Y_n(\rho)}{\rho} - D Y'_n(\rho) \right|^2 \\ & + 2 \left| A J'_n(\rho) - Bn \frac{J_n(\rho)}{\rho} + C Y'_n(\rho) - Dn \frac{Y_n(\rho)}{\rho} \right|^2 \\ & = |(A - B) J_{n-1}(\rho) + (C - D) Y_{n-1}(\rho)|^2 + |(A + B) J_{n+1}(\rho) + (C + D) Y_{n+1}(\rho)|^2 . \end{aligned} \quad (7.14)$$

Seguindo as Refs. [108, 160], definimos, para $m_q \neq m_q^*$ ($q = \{1, 2\}$), a função

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_{q,n}^{(Z\bar{Z})}(l_1, l_2) &= \frac{1}{(l_2^2 - l_1^2)} \int_{l_1}^{l_2} dr r Z_n(\rho_q) \bar{Z}_n(\rho_q^*) \\ &= r^2 \frac{[\rho_q^* Z_n(\rho_q) \bar{Z}'_n(\rho_q^*) - \rho_q Z'_n(\rho_q) \bar{Z}_n(\rho_q^*)]}{(l_2^2 - l_1^2) (\rho_q^2 - \rho_q^{*2})} \Bigg|_{r=l_1}^{r=l_2} , \end{aligned} \quad (7.15)$$

onde Z_n e $\bar{Z}_n$ são quaisquer funções cilíndricas de Bessel ou Neumann, e $l_1, l_2 \in \mathbb{R}$ são os limites de integração. Se $m_q = \pm m_q^*$, a Eq. (7.15) pode ser reescrita como

$$\mathcal{I}_{q,n}^{(Z\bar{Z})}(l_1, l_2) = \frac{\varrho_{\pm,n}^{(Z\bar{Z})}}{(l_2^2 - l_1^2)} \frac{r^2}{4} \left[2Z_n(\rho_q) \bar{Z}_n(\rho_q) - Z_{n-1}(\rho_q) \bar{Z}_{n+1}(\rho_q) - Z_{n+1}(\rho_q) \bar{Z}_{n-1}(\rho_q) \right] \Big|_{r=l_1}^{r=l_2}, \quad (7.16)$$

onde temos necessariamente $\varrho_{+,n}^{(Z\bar{Z})} = 1$ para $m_q = m_q^*$ [i.e., $\text{Im}(m_q) = 0$]. Para $m_q = -m_q^*$ [$\text{Re}(m_q) = 0$], de acordo com a Eq. (7.15), temos as seguintes combinações: $\varrho_{-,n}^{(JJ)} = \varrho_{-,n}^{(YY)} = (-1)^n$ e $\varrho_{-,n}^{(JY)} = \varrho_{-,n}^{(YJ)} = (-1)^{n+1}$, uma vez que $J_n(-\rho) = (-1)^n J_n(\rho)$ e $Y_n(-\rho) = (-1)^{n+1} Y_n(\rho)$ [114].

As Eqs. (7.14)–(7.16) são bastante úteis quando consideramos, em separado, as componentes polares (r, ϕ) e z dos campos internos. Explicitamente, definimos as contribuições das componentes (r, ϕ) e z para a energia interna como sendo $W_{Fqr\phi} = \int_V d^3r (|F_{qr}|^2 + |F_{q\phi}|^2)$ e $W_{Fqz} = \int_V d^3r |F_{qz}|^2$, onde $V = \pi b^2 L$ e $\mathbf{F}$ pode ser tanto o campo $\mathbf{E}$ quanto $\mathbf{H}$.

7.2.1 Cilindro interior

Usando as componentes dos campos internos [Eqs. (D.53)–(D.55)] e a Eq. (7.14) para $A = c_n \cos \zeta / m_1$, $B = d_n$ e $C = D = 0$, obtemos

$$\frac{W_{E1r\phi}(a)}{W_0(0, a)} = \frac{\varepsilon_1^{(\text{eff})}}{2\varepsilon_0} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left[\left| c_n \frac{\cos \zeta}{m_1} - d_n \right|^2 \mathcal{I}_{1,n-1}^{(JJ)}(0, a) + \left| c_n \frac{\cos \zeta}{m_1} + d_n \right|^2 \mathcal{I}_{1,n+1}^{(JJ)}(0, a) \right], \quad (7.17)$$

$$\frac{W_{E1z}(a)}{W_0(0, a)} = \frac{\varepsilon_1^{(\text{eff})}}{\varepsilon_0} \left| \frac{\eta_1}{m_1} \right|^2 \sum_{n=-\infty}^{\infty} |c_n|^2 \mathcal{I}_{1,n}^{(JJ)}(0, a), \quad (7.18)$$

de modo que a energia elétrica dentro do caroço cilíndrico (ε_1, μ_1) é $W_{E1} = W_{E1r\phi} + W_{E1z}$. A energia magnética correspondente ($W_{H1} = W_{H1r\phi} + W_{H1z}$) segue das Eqs. (7.17) e (7.18) pelas substituições de $\varepsilon_1^{(\text{eff})}/\varepsilon_0$ por $|\tilde{m}_1|^2 \mu_1^{(\text{eff})}/\mu_0$ e (c_n, d_n) por (d_n, c_n) . Os coeficientes internos para as polarizações TM (I) e TE (II) são,

respectivamente:

$$c_n^{(I)} = -\frac{m_1 \eta_2 J_n(\eta_2 x)}{m_2 \eta_1 J_n(\eta_1 x)} \frac{[\mathcal{A}_n \mathcal{P}_n^{(I)} + \mathcal{Q}_n^{(I)}]}{\mathcal{V}_n \mathcal{R}_n^{(I)}} , \quad (7.19)$$

$$d_n^{(I)} = \frac{\mu_1 \eta_2 J_n(\eta_2 x)}{\mu_2 \eta_1 J_n(\eta_1 x)} \frac{[\mathcal{V}_n \mathcal{P}_n^{(I)} + \mathcal{C}_n \mathcal{Q}_n^{(I)}] \gamma_n}{\mathcal{V}_n \mathcal{R}_n^{(I)}} ; \quad (7.20)$$

$$c_n^{(II)} = \frac{m_1 \eta_2 J_n(\eta_2 x)}{m_2 \eta_1 J_n(\eta_1 x)} \frac{[\mathcal{W}_n \mathcal{P}_n^{(II)} + \mathcal{D}_n \mathcal{Q}_n^{(II)}] \gamma_n}{\mathcal{W}_n \mathcal{R}_n^{(II)}} , \quad (7.21)$$

$$d_n^{(II)} = -\frac{\mu_1 \eta_2 J_n(\eta_2 x)}{\mu_2 \eta_1 J_n(\eta_1 x)} \frac{[\mathcal{B}_n \mathcal{P}_n^{(II)} + \mathcal{Q}_n^{(II)}]}{\mathcal{W}_n \mathcal{R}_n^{(II)}} . \quad (7.22)$$

Em particular, em razão das definições dos modos TM e TE, devemos ter *necessariamente* $W_{H1z}^{(I)} = W_{E1z}^{(II)} = 0$ para todos os ângulos de incidência ζ . Disso, obtemos duas séries convergentes:

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} |d_n^{(I)}|^2 \mathcal{I}_{1,n}^{(JJ)}(0, a) = 0 ,$$

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} |c_n^{(II)}|^2 \mathcal{I}_{1,n}^{(JJ)}(0, a) = 0 .$$

7.2.2 Camada cilíndrica

O procedimento para o cálculo da energia interna à camada cilíndrica é análogo ao do cilindro interior. Usando as componentes dos campos internos à camada [Eqs. (D.56)–(D.58)] e considerando $A = f_n \cos \zeta / m_2$, $B = g_n$, $C = v_n \cos \zeta / m_2$ e $D = w_n$ na Eq. (7.14), obtemos prontamente

$$\begin{aligned} \frac{W_{E2r\phi}(a, b)}{W_0(a, b)} &= \frac{\varepsilon_2^{(\text{eff})}}{2\varepsilon_0} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left\{ \left| f_n \frac{\cos \zeta}{m_2} - g_n \right|^2 \mathcal{I}_{2,n-1}^{(JJ)}(a, b) + \left| f_n \frac{\cos \zeta}{m_2} + g_n \right|^2 \mathcal{I}_{2,n+1}^{(JJ)}(a, b) \right. \\ &\quad + \left| v_n \frac{\cos \zeta}{m_2} - w_n \right|^2 \mathcal{I}_{2,n-1}^{(YY)}(a, b) + \left| v_n \frac{\cos \zeta}{m_2} + w_n \right|^2 \mathcal{I}_{2,n+1}^{(YY)}(a, b) \\ &\quad + 2\text{Re} \left[\left(\frac{f_n \cos \zeta}{m_2} - g_n \right) \left(\frac{v_n^* \cos \zeta}{m_2^*} - w_n^* \right) \mathcal{I}_{2,n-1}^{(JY)}(a, b) \right] \\ &\quad \left. + 2\text{Re} \left[\left(\frac{f_n \cos \zeta}{m_2} + g_n \right) \left(\frac{v_n^* \cos \zeta}{m_2^*} + w_n^* \right) \mathcal{I}_{2,n+1}^{(JY)}(a, b) \right] \right\} , \quad (7.23) \end{aligned}$$

$$\frac{W_{E2z}(a, b)}{W_0(a, b)} = \frac{\varepsilon_2^{(\text{eff})}}{\varepsilon_0} \left| \frac{\eta_2}{m_2} \right|^2 \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left\{ |f_n|^2 \mathcal{I}_{2,n}^{(JJ)}(a, b) \right.$$

$$+ |v_n|^2 \mathcal{I}_{2,n}^{(YY)}(a, b) + 2\text{Re} \left[f_n v_n^* \mathcal{I}_{2,n}^{(JY)}(a, b) \right] \Big\} , \quad (7.24)$$

de maneira que a energia elétrica dentro da camada cilíndrica (ε_2, μ_2) é $W_{E2} = W_{E2r\phi} + W_{E2z}$. A energia magnética correspondente segue das Eqs. (7.23) e (7.24) pela troca de $\varepsilon_2^{(\text{eff})}/\varepsilon_0$ com $|\tilde{m}_2|^2 \mu_2^{(\text{eff})}/\mu_0$, (f_n, g_n) com (g_n, f_n) e (v_n, w_n) com (w_n, v_n) . As polarizações TM (I) e TE (II) são diferenciadas pelos coeficientes

$$f_n^{(\text{I})} = - \frac{(\mathcal{A}_n - \gamma_n^2 \mathcal{C}_n \mathcal{W}_n) \mathcal{P}_n^{(\text{I})} + (1 - \gamma_n^2 \mathcal{C}_n \mathcal{D}_n) \mathcal{Q}_n^{(\text{I})}}{\mathcal{R}_n^{(\text{I})} (\mathcal{V}_n - \mathcal{B}_n \mathcal{C}_n)} , \quad (7.25)$$

$$g_n^{(\text{I})} = \gamma_n \frac{\mathcal{P}_n^{(\text{I})}}{\mathcal{R}_n^{(\text{I})}} , \quad (7.26)$$

$$v_n^{(\text{I})} = \frac{(\mathcal{A}_n \mathcal{B}_n - \gamma_n^2 \mathcal{V}_n \mathcal{W}_n) \mathcal{P}_n^{(\text{I})} + (\mathcal{B}_n - \gamma_n^2 \mathcal{V}_n \mathcal{D}_n) \mathcal{Q}_n^{(\text{I})}}{\mathcal{R}_n^{(\text{I})} (\mathcal{V}_n - \mathcal{B}_n \mathcal{C}_n)} , \quad (7.27)$$

$$w_n^{(\text{I})} = \gamma_n \frac{\mathcal{Q}_n^{(\text{I})}}{\mathcal{R}_n^{(\text{I})}} ; \quad (7.28)$$

$$f_n^{(\text{II})} = \gamma_n \frac{\mathcal{P}_n^{(\text{II})}}{\mathcal{R}_n^{(\text{II})}} , \quad (7.29)$$

$$g_n^{(\text{II})} = - \frac{(\mathcal{B}_n - \gamma_n^2 \mathcal{V}_n \mathcal{D}_n) \mathcal{P}_n^{(\text{II})} + (1 - \gamma_n^2 \mathcal{C}_n \mathcal{D}_n) \mathcal{Q}_n^{(\text{II})}}{\mathcal{R}_n^{(\text{II})} (\mathcal{W}_n - \mathcal{A}_n \mathcal{D}_n)} , \quad (7.30)$$

$$v_n^{(\text{II})} = \gamma_n \frac{\mathcal{Q}_n^{(\text{II})}}{\mathcal{R}_n^{(\text{II})}} , \quad (7.31)$$

$$w_n^{(\text{II})} = \frac{(\mathcal{A}_n \mathcal{B}_n - \gamma_n^2 \mathcal{V}_n \mathcal{W}_n) \mathcal{P}_n^{(\text{II})} + (\mathcal{A}_n - \gamma_n^2 \mathcal{C}_n \mathcal{W}_n) \mathcal{Q}_n^{(\text{II})}}{\mathcal{R}_n^{(\text{II})} (\mathcal{W}_n - \mathcal{A}_n \mathcal{D}_n)} . \quad (7.32)$$

Em particular, devemos ter *necessariamente* $W_{H2z}^{(\text{I})} = W_{E2z}^{(\text{II})} = 0$ para todos os ângulos de incidência ζ . Dessa forma, obtemos as séries convergentes:

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} \left\{ |g_n^{(\text{I})}|^2 \mathcal{I}_{2,n}^{(JJ)}(a, b) + |w_n^{(\text{I})}|^2 \mathcal{I}_{2,n}^{(YY)}(a, b) + 2\text{Re} \left[g_n^{(\text{I})} w_n^{(\text{I})*} \mathcal{I}_{2,n}^{(JY)}(a, b) \right] \right\} = 0 ,$$

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} \left\{ |f_n^{(\text{II})}|^2 \mathcal{I}_{2,n}^{(JJ)}(a, b) + |v_n^{(\text{II})}|^2 \mathcal{I}_{2,n}^{(YY)}(a, b) + 2\text{Re} \left[f_n^{(\text{II})} v_n^{(\text{II})*} \mathcal{I}_{2,n}^{(JY)}(a, b) \right] \right\} = 0 .$$

7.2.3 Energia total

Finalmente, das Eqs. (7.17), (7.18), (7.23) e (7.24), definimos a energia eletromagnética normalizada dentro do cilindro revestido:

$$\frac{W_{1,2}(a, b)}{W_0(0, b)} = S^2 \frac{W_1(0, a)}{W_0(0, a)} + (1 - S^2) \frac{W_2(a, b)}{W_0(a, b)} , \quad (7.33)$$

onde $W_q = W_{Eq} + W_{Hq}$, com $q = \{1, 2\}$, e W_0 encontra-se definida na Eq. (7.13). Note que as energias W_1 e W_2 associadas ao caroço e à camada, respectivamente, são ponderadas pelas correspondentes razões das áreas transversais: S^2 e $(1 - S^2)$. Em especial, usando a proporcionalidade entre a potência dissipada no meio e a eficiência de absorção (Apêndice C.2) como uma função das intensidades dos campos internos [83, 108, 116], obtemos

$$Q_{\text{abs}} = \pi y \left\{ \left[\frac{\varepsilon_1''}{\varepsilon_1^{(\text{eff})}} \frac{W_{1E}(0, a)}{W_0(0, a)} + \frac{\mu_1''}{\mu_1^{(\text{eff})}} \frac{W_{1H}(0, a)}{W_0(0, a)} \right] S^2 + \left[\frac{\varepsilon_2''}{\varepsilon_2^{(\text{eff})}} \frac{W_{2E}(a, b)}{W_0(a, b)} + \frac{\mu_2''}{\mu_2^{(\text{eff})}} \frac{W_{2H}(a, b)}{W_0(a, b)} \right] (1 - S^2) \right\}, \quad (7.34)$$

um resultado que é similar ao obtido para esferas revestidas [108], Eq. (3.31) do Capítulo 3). De fato, a Eq. (7.34) pode ser usada para validar as expressões analíticas desta Seção para ambas as polarizações TM e TE sob um ângulo de incidência de radiação arbitrário.

Em particular, para incidência normal ($\zeta = 90^\circ$), temos $c_n^{(\text{II})} = d_n^{(\text{I})} = f_n^{(\text{II})} = g_n^{(\text{I})} = v_n^{(\text{II})} = w_n^{(\text{I})} = 0$, de maneira que os coeficientes não nulos são:

$$\begin{aligned} c_n &= c_n^{(\text{I})} = \frac{f_n^{(\text{I})} [J_n(m_2 x) - \mathcal{B}_n Y_n(m_2 x)]}{J_n(m_1 x)}, \\ d_n &= d_n^{(\text{II})} = \frac{\tilde{m}_2 g_n^{(\text{II})} [J_n(m_2 x) - \mathcal{A}_n Y_n(m_2 x)]}{\tilde{m}_1 J_n(m_1 x)}, \\ f_n &= f_n^{(\text{I})} = \frac{2i/\pi y}{H_n^{(1)}(y) [J_n(m_2 y) - \mathcal{B}_n Y_n(m_2 y)] - \tilde{m}_2 H_n^{(1)}(y) [J'_n(m_2 y) - \mathcal{B}_n Y'_n(m_2 y)]}, \\ g_n &= g_n^{(\text{II})} = \frac{2i/\pi y}{\tilde{m}_2 H_n^{(1)}(y) [J_n(m_2 y) - \mathcal{A}_n Y_n(m_2 y)] - H_n^{(1)}(y) [J'_n(m_2 y) - \mathcal{A}_n Y'_n(m_2 y)]}, \\ v_n &= v_n^{(\text{I})} = -\mathcal{B}_n f_n^{(\text{I})}, \\ w_n &= w_n^{(\text{II})} = -\mathcal{A}_n g_n^{(\text{II})}, \end{aligned}$$

onde usamos o Wronskiano $H_n^{(1)}(y)J_n(y) - H_n^{(1)}(y)J'_n(y) = 2i/\pi y$ para simplificar os coeficientes internos f_n e g_n , e as funções auxiliares estão definidas nas Eqs. (7.10) e (7.11). Note que a escolha adequada de notação dos coeficientes nos permite mapear a incidência normal em cilindros concêntricos aos coeficientes de Aden-Kerker para esferas concêntricas [Eqs. (3.16)–(3.21), (3.22) e (3.23), respectivamente], Capítulo 3. A relação entre os coeficientes nas geometrias esférica e cilíndrica é evidenciada por

meio das substituições das funções cilíndricas de Bessel, Neumann e Hankel pelas funções de Riccati-Bessel, Riccati-Neumann e Riccati-Henkel, respectivamente. As expressões simplificadas para a energia interna sob incidência normal podem ser obtidas trivialmente das Eqs. (7.17)–(7.24), visto que $\cos(90^\circ) = 0$.

7.3 Cálculo numérico das eficiências e energia interna

Esta Seção é dedicada ao cálculo numérico da energia no interior de cilindros revestidos, bem como de suas eficiências de espalhamento. Uma vez mais, elaboramos um código computacional para ser utilizado no *software* livre *Scilab* 5.4.1. Note que em todas as expressões analíticas das Seções 7.1 e 7.2, os somatórios dos termos de n -ésima ordem associados às funções especiais cilíndricas são calculados para todos os inteiros, isto é, de $-\infty$ a ∞ . Para contornarmos essa dificuldade e levarmos os cálculos numéricos para ordens inteiras não negativas ($n \geq 0$), as séries infinitas são simplificadas a partir das seguintes *relações de paridade* para os coeficientes TM e TE, respectivamente:

$$a_{-n}^{(\text{I})} = -a_n^{(\text{I})}, \quad a_{-n}^{(\text{II})} = a_n^{(\text{II})}, \quad (7.35)$$

$$b_{-n}^{(\text{I})} = b_n^{(\text{I})}, \quad b_{-n}^{(\text{II})} = -b_n^{(\text{II})}, \quad (7.36)$$

$$c_{-n}^{(\text{I})} = c_n^{(\text{I})}, \quad c_{-n}^{(\text{II})} = -c_n^{(\text{II})}, \quad (7.37)$$

$$d_{-n}^{(\text{I})} = -d_n^{(\text{I})}, \quad d_{-n}^{(\text{II})} = d_n^{(\text{II})}, \quad (7.38)$$

$$f_{-n}^{(\text{I})} = f_n^{(\text{I})}, \quad f_{-n}^{(\text{II})} = -f_n^{(\text{II})}, \quad (7.39)$$

$$g_{-n}^{(\text{I})} = -g_n^{(\text{I})}, \quad g_{-n}^{(\text{II})} = g_n^{(\text{II})}, \quad (7.40)$$

$$v_{-n}^{(\text{I})} = v_n^{(\text{I})}, \quad v_{-n}^{(\text{II})} = -v_n^{(\text{II})}, \quad (7.41)$$

$$w_{-n}^{(\text{I})} = -w_n^{(\text{I})}, \quad w_{-n}^{(\text{II})} = w_n^{(\text{II})}, \quad (7.42)$$

onde usamos $J_{-n} = (-1)^n J_n$ e $Y_{-n} = (-1)^n Y_n$ [114]. Consequentemente, temos $a_0^{(\text{I})} = b_0^{(\text{II})} = c_0^{(\text{II})} = d_0^{(\text{I})} = f_0^{(\text{II})} = g_0^{(\text{I})} = v_0^{(\text{II})} = w_0^{(\text{I})} = 0$. Embora não seja óbvio, podemos demonstrar que $a_n^{(\text{I})} = -b_n^{(\text{II})}$, o que está de acordo com a Ref. [1] no caso homogêneo ($a = b$). Uma vez que $Z_{-n}\bar{Z}_{-n} = Z_n\bar{Z}_n$ na Eq. (7.15), obtemos prontamente $\mathcal{I}_{q,-n}^{(Z\bar{Z})} = \mathcal{I}_{q,n}^{(Z\bar{Z})}$. Usando essas relações, para quaisquer coeficientes

internos $s_{-n} = \pm s_n$, podemos escrever

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} |s_n|^2 \mathcal{I}_{q,n}^{(Z\bar{Z})} = |s_0|^2 \mathcal{I}_{q,0}^{(Z\bar{Z})} + 2 \sum_{n=1}^{\infty} |s_n|^2 \mathcal{I}_{q,n}^{(Z\bar{Z})} . \quad (7.43)$$

Como é usual, os somatórios $\Sigma_{n=1}^{\infty}$ são aproximados por $\Sigma_{n=1}^N$, onde a ordem de truncamento é $N = \max(N_{\text{Mie}}, |\eta_1|x, |\eta_2|y) + \sqrt{101+y}$, que é uma expressão que adaptamos das Refs. [1, 33], com $N_{\text{Mie}} = y + 4,05y^{1/3} + 2$. A adaptação do truncamento N foi feita no sentido de deixar o código o mais geral possível, contemplando situações em que $|\eta_1|x \gg 1$ ou $|\eta_2|y \gg 1$ mesmo quando $y \ll 1$.

Para os cálculos numéricos, no intuito de estudarmos um modelo de interesse tecnológico, escolhemos uma folha de grafeno crescida epitaxialmente em carbeto de silício (SiC). Basicamente, é um modelo de Drude-Lorentz com certas peculiaridades. A escolha se deveu, entre os outros motivos, pelo fato de que os plásmons de superfície no grafeno são mais localizados espacialmente e possuem um tempo de vida maior que em um metal comum, o que nos permite explorar configurações de aumento de campo próximo que não obteríamos em sistemas metálicos usuais [198, 199].

7.3.1 Grafeno crescido em carbeto de silício

A fim de aplicarmos os resultados analíticos a uma situação com parâmetros realistas, consideramos um cilindro de silício (Si), com $\varepsilon_1/\varepsilon_0 = 11,7 + 0,01i$, revestido por um *meio efetivo* consistindo de uma camada de grafeno epitaxialmente crescida em carbeto de silício (SiC), de espessura d . O objetivo é estudarmos as relações entre ressonâncias no campo próximo e distante em um sistema exibindo plásmons fortemente localizados, tais como o grafeno. Para o *meio efetivo* grafeno-SiC, o modelo de Drude-Lorentz modificado descreve a *condutividade bidimensional* na ausência de um campo magnético externo [198]:

$$\sigma(\omega) = \frac{2\mathcal{D}}{\pi} \left(\frac{i}{\omega + i\Gamma - \omega_0^2/\omega} \right) + \sigma_b , \quad (7.44)$$

onde $\mathcal{D}$ é o peso espectral do plasma, Γ é a taxa de espalhamento de elétron e “buracos” por fônons da rede (dissipação), ω_0 é a frequência de plásmon a campo magnético nulo e $\sigma_b = 3,5\sigma_0$, com $\sigma_0 = e^2/(4\hbar)$ sendo a condutividade

Figura 7.2 – Permissividade elétrica $\varepsilon_2 = \varepsilon_{\text{gra}}(\omega)$ para o meio efetivo composto de uma folha de grafeno crescida epitaxialmente em SiC [Eq. (7.45)] em função da frequência $f = \omega/2\pi$. Note que $\varepsilon'_2 < 0$ para $1,6 \text{ THz} < f < 9,4 \text{ THz}$ e $0 < \varepsilon'_2/\varepsilon_0 < 1$ para $9,4 \text{ THz} < f < 15 \text{ THz}$.

universal [198]. A condutividade média de fundo (*background*) σ_b está associada às interações de altas ordens dos plásmons na superfície do grafeno e aos defeitos epitaxiais que, em média, surgem na construção do compósito grafeno-SiC [198, 202, 203]. Usando essas considerações, definimos a permissividade *volumétrica* do grafeno-SiC [199]:

$$\frac{\varepsilon_{\text{gra}}(\omega)}{\varepsilon_0} = 1 + i \frac{\sigma(\omega)}{\omega \varepsilon_0 d}. \quad (7.45)$$

De acordo com a Ref. [198], os parâmetros materiais para o caso de *isotropia* (situação de campo externo nulo) são $\hbar D/\sigma_0 = 0,52 \text{ meV}$, $\hbar\omega_0 = 6,5 \text{ meV}$ e $\hbar\Gamma = 5,5 \text{ meV}$. A espessura do grafeno-SiC é necessariamente $d = 1 \text{ }\mu\text{m}$ para esse *valor experimental* de frequência de plásmon ω_0 [198]. De fato, essas grandezas são vinculadas [198]: $\omega_0^2 \propto 1/d$. Na Fig. 7.2, mostramos o perfil de $\varepsilon_2 = \varepsilon_{\text{gra}}(\omega)$ para esses parâmetros materiais no intervalo de energia $1 \text{ meV} < \hbar\omega < 60 \text{ meV}$, o qual corresponde ao intervalo de frequência: $0,2 \text{ THz} < f < 14,5 \text{ THz}$.

7.3.2 Cilindros revestidos por grafeno

Os coeficientes efetivos de energia elétrica e magnética ($\varepsilon_2^{(\text{eff})}$, $\mu_2^{(\text{eff})}$) para meios dispersivos e altamente absorptivos são calculados usando o método do Loudon [86, 87], que generaliza os coeficientes de energia válidos apenas para meios fracamente absorptivos da Ref. [93]. Usando essa generalização, sendo $\varepsilon_2(\omega) = \varepsilon_{\text{gra}}(\omega)$ e $\mu_2 = \mu_2^{(\text{eff})} = \mu_0$, segue que

$$\varepsilon_2^{(\text{eff})}(\omega) = \varepsilon_2'(\omega) + \frac{2\omega}{\Gamma} \varepsilon_2''(\omega) , \quad (7.46)$$

onde $\varepsilon_2' = \text{Re}(\varepsilon_2)$ e $\varepsilon_2'' = \text{Im}(\varepsilon_2)$. Para o cilindro interior (ε_1, μ_1), temos $\varepsilon_1^{(\text{eff})} = 11,7\varepsilon_0$ e $\mu_1^{(\text{eff})} = \mu_0$. A pequena absorção em ε_1 tem a propriedade de suavizar as curvas [81] quando $\varepsilon_1' \gg \varepsilon_1''$.

Como discutido na Ref. [198], a aproximação isotrópica na Eq. (7.45) é válida apenas na ausência de um campo magnético externo ao longo do grafeno-SiC – no caso, perpendicular a ele. A fim de estudarmos as excitações de plásmons (elétricos), é conveniente considerarmos a polarização TM ou caso I, de forma que o campo magnético incidente seja ortogonal ao eixo do cilindro para qualquer ângulo arbitrário de incidência ($H_z = 0$). Assim, podemos variar a inclinação do campo elétrico com relação ao eixo do cilindro, obtendo excitações paralelas e perpendiculares à superfície cilíndrica. A polarização TE ou caso II, no caso de cilindros finos ($y \ll 1$) e não magnéticos, é análoga à excitação TM a $\zeta \approx 0$ ($E_z = 0$). Com relação ao cilindro interior (Si) (ε_1, μ_1), fixamos $a = 5 \mu\text{m}$. Uma vez que $d = 1 \mu\text{m}$ já está fixado (d e ω_0 estão vinculados [198]), temos $b = 6 \mu\text{m}$ para o raio do cilindro exterior, o que leva a $S = 5/6 \approx 0,83$. Essa razão de aspecto $S \approx 1$ nos permite estudar o efeito do revestimento de grafeno-SiC [$\varepsilon_2(\omega), \mu_2(\omega)$] em cilindros dielétricos não dispersivos (ε_1, μ_1).

Na Fig. 7.3, plotamos $Q_{\text{ext}}^{(\text{I})}$, $Q_{\text{abs}}^{(\text{I})}$ e $W_{1,2}^{(\text{I})}$ em função da frequência $f = \omega/2\pi$ para diversos ângulos de incidência. Para o intervalo de frequência $0,24 \text{ THz} < f < 14,5 \text{ THz}$, temos os parâmetros de tamanho no intervalo $0,03 < kb < 1,83$, de modo que o limite de Rayleigh ($kb \ll 1$) se aplica para baixas frequências. Uma vez que a frequência de plásmom para o grafeno-SiC é $f_0 \approx 1,6 \text{ THz}$, a absorção domina sobre o espalhamento na vizinhança de f_0 para ângulos $\zeta \approx 90^\circ$, como pode ser visto nas Figs. 7.3(a), 7.3(b) e 7.3(c). Isso ocorre porque a configuração com $\mathbf{E}_i^{(\text{I})} \parallel \hat{\mathbf{z}}$ excita

Figura 7.3 – Cilindro dielétrico infinito ($\varepsilon_1/\varepsilon_0 = 11,7 + 0,01i$; $\mu_1 = \mu_0$), de raio $a = 5 \mu\text{m}$, revestido por uma camada de grafeno-SiC [$\varepsilon_2 = \varepsilon_{\text{gra}}(\omega)$; $\mu_2 = \mu_0$] [Eq. (7.45)], de espessura $d = 1 \mu\text{m}$, interagindo com uma onda plana no modo TM ($H_z = 0$). (a) Eficiência de extinção $Q_{\text{ext}}^{(1)}$, (b) eficiência de absorção $Q_{\text{abs}}^{(1)}$ e (c) energia interna $W_{1,2}^{(1)}/W_0$ em função da frequência $f = \omega/2\pi$ para alguns ângulos ζ entre a onda incidente e o eixo do cilindro. A ressonância de plásmom ($f \approx 1,2 \text{ THz}$) nas grandezas de espalhamento não coincide com a ressonância na energia interna ($f \approx 1,0 \text{ THz}$).

Figura 7.4 – Cilindro dielétrico infinito ($\varepsilon_1/\varepsilon_0 = 11,7 + 0,01i$; $\mu_1 = \mu_0$), de raio $a = 5 \mu\text{m}$, revestido por uma camada de grafeno-SiC [$\varepsilon_2 = \varepsilon_{\text{gra}}(\omega)$; $\mu_2 = \mu_0$] [Eq. (7.45)], de espessura $d = 1 \mu\text{m}$, interagindo com uma onda plana no modo TE ($E_z = 0$). (a) Eficiência de extinção $Q_{\text{ext}}^{(\text{II})}$, (b) eficiência de absorção $Q_{\text{abs}}^{(\text{II})}$ e (c) energia interna $W_{1,2}^{(\text{II})}/W_0$ em função da frequência $f = \omega/2\pi$ para alguns ângulos ζ entre a onda incidente e o eixo do cilindro. A ressonância de plásmon do grafeno-SiC ($f_0 \approx 1,6 \text{ THz}$) não é excitada nesta configuração, uma vez que $\mathbf{E}_i \perp \hat{\mathbf{z}}$ para todo ζ . O aumento de intensidade do campo fora da ressonância encontra-se em $f \approx 4,3 \text{ THz}$.

ressonâncias plasmônicas no *bulk* ($\varepsilon'_2 = 0$) no limite de Rayleigh [2], o que leva a um máximo de absorção a $\zeta = 90^\circ$. Devido ao caroço dielétrico, esta ressonância de plásmom volumétrica associada ao modelo dispersivo da Fig. 7.2 é deslocada para $f \approx 1,2$ THz. Por outro lado, para ângulos $\zeta \approx 0$, o campo incidente $\mathbf{E}_i^{(I)} \perp \hat{\mathbf{z}}$ excita ressonâncias de plásmos de superfície ($\varepsilon'_2 = -\varepsilon_0$) com baixa absorção. Isso é mostrado em $f \approx 5,3$ THz para $\zeta = 9^\circ$ na Fig. 7.3(b). De 9° a 90° , há uma transição entre essas duas ressonâncias plasmônicas.

A ressonância de plásmom volumétrico em $Q_{\text{ext}}^{(I)}$ e $Q_{\text{abs}}^{(I)}$ ($f \approx 1,2$ THz) não coincide com a ressonância de plásmom em $W_{1,2}^{(I)}$ ($f \approx 1,0$ THz), como mostrado na Fig. 7.3(b). De fato, como predito na Eq. (7.34), ambas ressonâncias em Q_{abs} e $W_{1,2}$ dependem das intensidades dos campos internos $|\mathbf{F}_q|^2$ mas são ponderadas diferentemente pelos parâmetros de absorção e propagação, respectivamente. Neste caso em particular, a região com $\varepsilon'_2(\omega) \approx 0$ corresponde a $\varepsilon''_2(\omega) \gg \varepsilon_0$ (veja Fig. 7.2). Uma vez que $S \approx 1$ (limite de pequena espessura), obtemos um aumento de campo interno fora da ressonância em $f \approx 1,0$ THz via interação entre modos eletromagnéticos dentro da camada. Em outras palavras, o máximo de intensidade do campo dentro do cilindro não corresponde ao máximo de espalhamento ou absorção. Este efeito é explicado em termos de ressonâncias de Fano não convencionais em sistemas plasmônicos via interação entre modos eletromagnéticos dentro da camada [83]. Esses modos são excitados nas interfaces cilindro-camada e camada-meio externo em razão da pequena espessura de grafeno-SiC em relação ao comprimento de onda ($kd \ll 1$).

As grandezas correspondentes à Fig 7.3 no caso II (modo TE) são plotadas na Fig. 7.4. Um aumento de intensidade de campo fora da ressonância de espalhamento [Fig. 7.4(a)] é verificado tanto na absorção [Fig. (7.4(b))] quanto na energia armazenada [Fig. 7.4] na ressonância de dipolo $\varepsilon'_2 \approx -\varepsilon_0$ (plásmom de superfície). Esse resultado está de acordo com a discussão realizada no final do Seção 4.3.1 do Capítulo 4: para a ressonância de dipolo, podemos usar a absorção para identificarmos os possíveis “estados escuros”. Ainda, uma vez que a direção do campo elétrico é fixa ($\mathbf{E}_i^{(II)} \perp \hat{\mathbf{z}}$ para todo ζ), apenas os plásmos de superfície são excitados nesta configuração. As demais ressonâncias acima de $f = 5$ THz estão além do limite de Rayleigh ($kb > 1$) e estão associadas aos máximos das amplitudes

Figura 7.5 – Cilindro dielétrico infinito ($\varepsilon_1/\varepsilon_0 = 3,4 + 0,01i$; $\mu_1 = \mu_0$), de raio $a = 5 \mu\text{m}$, com (linha sólida) e sem (linha tracejada) uma camada de grafeno-SiC [$\varepsilon_2 = \varepsilon_{\text{gra}}(\omega)$; $\mu_2 = \mu_0$] [Eq. (7.45)], de espessura $d = 1 \mu\text{m}$, em polarização TM ($H_z = 0$). (a) Eficiência de absorção e espalhamento para incidência normal ($\zeta = 90^\circ$), mostrando uma grande absorção na ressonância de plásmen do grafeno-SiC. Os picos para o cilindro homogêneo Si correspondem a ressonâncias de Lorenz-Mie de monopolo ($n = 0$), dipolo ($n = 1$), quadrupolo ($n = 2$) e octopolo ($n = 3$). (b) Energia interna para incidência normal. Há um aumento de campo (intensidade) fora da ressonância de espalhamento devido ao revestimento por grafeno-SiC em $f \approx 1,0 \text{ THz}$.

das ondas cilíndricas parciais em função do parâmetro de tamanho – chamadas de ressonâncias de Lorenz-Mie ou ressonâncias dependentes da morfologia (MDR, do inglês *morphology-dependent resonance* [204]). Visto que nesta configuração não excitamos o plásmon volumétrico na região de $f_0 \approx 1,6$ THz [$\varepsilon'_2(\omega_0) \approx 0$], daqui para a frente nos restringimos à análise apenas do modo TM ou caso II.

Na Fig. 7.5, a eficiência de extinção é calculada como uma função da frequência para ambos cilindros revestidos e não revestidos sob incidência normal ($\zeta = 90^\circ$) em polarização TM. Esta configuração tem um máximo de absorção na ressonância de plásmon volumétrico associada à camada de grafeno-SiC, como já mostrado na Fig. 7.3. Em particular, a eficiência de absorção para a cilindro homogêneo (Si) é muito pequena [$Q_{\text{abs}}^{(I)} < 0,2$] e não é mostrada na Fig. 7.5(a). Da Eq. (7.34) pode ser visto que os picos em $Q_{\text{abs}}^{(I)}$ para o cilindro homogêneo de Si coincidem com os picos em $W_{1,2}^{(I)}$ na Fig. 7.5(b) (linha tracejada). Ainda, as ressonâncias de espalhamento para o cilindro homogêneo (não dispersivo) são devidas às variações do parâmetro de tamanho, de forma que os picos de ressonância são modos de cavidade ou ressonâncias dependentes da morfologia (MDRs) [linha tracejada na Fig. 7.5(a)]. A camada de grafeno-SiC, entretanto, introduz uma ressonância de plásmon na vizinhança de $f \approx 1,2$ THz para o cilindro revestido.

Comparando as Figs. 7.5(a) e 7.5(b), notamos que o valor máximo de $Q_{\text{ext}}^{(I)}$ associado com o coeficiente $b_0^{(I)}$ (amplitude de monopolo) para o cilindro homogêneo de Si ($f \approx 3,0$ THz) não coincide com o valor máximo correspondente em $W_{1,2}^{(I)}$ ($f \approx 2,2$ THz). Esse efeito pode estar vinculado às peculiaridades da ressonância em $n = 0$ (que depende fortemente de ε_1'' [1]) e ao fato da energia interna em meios não dispersivos não levar em conta a absorção no cálculo dos coeficientes de energia. Devido à ressonância de plásmon volumétrico fornecido pela camada de grafeno-SiC, este aumento de campo fora da ressonância no interior do espalhador é “quebrado” em dois picos. O primeiro pico em $f \approx 1,2$ THz, para o cilindro revestido [linha sólida na Fig. 7.5(a)], é associado a uma ressonância de Fano não convencional [149], resultando do termo de interferência $|b_0^{(I)}|^2$ para ε'_2 indo a zero. O segundo pico, que ocorre em $f \approx 3,7$ THz na Fig. 7.5(a) (linha sólida), é uma ressonância de Lorenz-Mie que se mantém do espalhamento por um cilindro homogêneo de Si. Em adição, como pode ser visto a partir da Fig. 7.5(b), todos os picos na energia

Figura 7.6 – Espalhamento eletromagnético por um cilindro dielétrico ($\varepsilon_1/\varepsilon_0 = 3,4 + 0,01i$; $\mu_1 = \mu_0$), de raio $a = 5 \mu\text{m}$, com (linha sólida) e sem (linha tracejada) uma camada de grafeno-SiC ($\varepsilon_2 = \varepsilon_{\text{gra}}(\omega)$; $\mu_2 = \mu_0$) [Eq. (7.45)], de espessura $d = 1 \mu\text{m}$, em polarização TM. (a) Eficiência de retroespalhamento $Q_{\text{back}}^{(1)}$. (b) As energias elétrica $W_{E1}^{(1)}$ e magnética $W_{H1}^{(1)}$ no interior do cilindro dielétrico. (c) As energias elétrica $W_{E2}^{(1)}$ e magnética $W_{H2}^{(1)}$ no interior da camada de grafeno-SiC. As ressonâncias de Fano são devidas às interferências de dipolo-quadrupolo ($f \approx 10,2 \text{ THz}$) e quadrupolo-octopolo ($f \approx 14,0 \text{ THz}$) e correspondem a grandes quantidades de energia no interior do cilindro dielétrico.

interna $W_{1,2}^{(1)}$ para cilindros concêntricos (linha sólida) têm um correspondente na mesma frequência em Q_{abs} or Q_{ext} na Fig. 7.5(a), exceto para a ressonância de plásmon volumétrico. Mesmo assim, o aumento de campo fora da ressonância em $f \approx 1,0$ THz corresponde a uma grande absorção ($Q_{\text{abs}} \approx 2,5$).

É interessante notar a presença de ressonâncias de Fano (convencionais) para ambos cilindros revestido e não revestido na Fig. 7.5(a) para altas frequências. De fato, essas ressonâncias se manifestam na seção de choque de retroespalhamento $Q_{\text{back}}^{(1)} = 2 \left| \sum_{n=-\infty}^{\infty} (-1)^n b_n^{(1)} \right|^2 / (\pi y)$, mostrada na Fig. 7.6(a), e são associadas com os termos de interferência entre $b_1^{(1)}$ e $b_2^{(1)}$ (*i.e.*, interferência dipolo-quadrupolo em $f \approx 10,2$ THz), e $b_2^{(1)}$ e $b_3^{(1)}$ (*i.e.*, interferência quadrupolo-octopolo em $f \approx 14,0$ THz) [55, 134]. Essas interferências correspondem a grandes intensidades de campos no interior do cilindro dielétrico, Fig. 7.6(b). De fato, estas intensidades dos campos internos são grandes mesmo na antirressonância de Fano, *i.e.*, $Q_{\text{back}}^{(1)} \approx 0$ ($f \approx 11,0$ THz e $f \approx 13,8$ THz). Essas ressonâncias estão também presentes na energia elétrica dentro da camada de grafeno-SiC [Fig. 7.6(c)], embora elas sejam muito menores do que as ressonâncias do plásmon do *bulk* em $f \approx 1,0$ THz.

Para finalizarmos nossa análise, fornecemos uma aplicação simples da energia armazenada calculada neste Capítulo no caso de uma coleção de cilindros idênticos e paralelos, distribuídos aleatória e uniformemente no espaço. Na incidência normal de radiação, temos o espalhamento por um meio desordenado bidimensional. Se a densidade de cilindros for pequena no meio (no caso, $f_{\text{pack}} \leq 0,36$ [89, 90]), podemos estimar a velocidade de transporte de energia de acordo com a Eq. (2.14) do Capítulo 2 para ambas polarizações TM e TE: $v_E \approx c/[1 + f_{\text{pack}}(W/W_0 - 1)]$. Embora a teoria desenvolvida na Ref. [89], na aproximação de fraca desordem da equação de Bethe-Salpeter, seja válida apenas para partículas esféricas idênticas, é discutido na Ref. [205] que há boa concordância entre essa fórmula e a velocidade de transporte calculada especificamente para meios bidimensionais [193]. De fato, como demonstraremos no Capítulo 10, essa forma heurística de calcular v_E é independente do formato do centro espalhador. No caso de cilindros infinitos, a aplicação desse resultado é mais simples do ponto de vista experimental, uma vez que não necessitamos de uma matriz rígida para fixarmos os cilindros no espaço.

Figura 7.7 – Velocidade de transporte de energia para os modos TM ($v_E^{(I)}$) e TE ($v_E^{(II)}$) para um meio desordenado bidimensional composto por cilindros de silício (Si) ($\varepsilon_1/\varepsilon_0 = 3,4 + 0,01i$; $\mu_1 = \mu_0$), de raio $a = 5 \mu\text{m}$, revestidos por uma camada de grafeno-SiC ($\varepsilon_2 = \varepsilon_{\text{gra}}(\omega)$; $\mu_2 = \mu_0$) [Eq. (7.45)], de espessura $d = 1 \mu\text{m}$, com $\zeta = 90^\circ$ (incidência normal). A fração de espalhadores no meio é $f_{\text{pack}} = 1/3$ (regime de percolação) e a velocidade de transporte é calculada em relação à velocidade da radiação no meio externo: $c = 1/\sqrt{\varepsilon_0\mu_0}$.

Eles podem ser dispostos no espaço livre, com a base de apoio distante da região de incidência do feixe. Essa é a razão pela qual, ao longo dos Capítulos, não calculamos v_E para partículas esféricas: precisaríamos, antes disso, fixar os centros espalhadores em uma matriz rígida, de forma a evitarmos o espalhamento por flutuações locais de densidade (como ocorre no caso de partículas embebidas em um fluido de baixa viscosidade, por exemplo). A consideração de um meio circundante rígido ou com alta viscosidade afetaria as propriedades dos materiais compósitos que aqui consideramos.

Na Fig. 7.7, calculamos v_E para as polarizações TM e TE no espalhador por cilindros paralelos (meio desordenado bidimensional) usando os mesmos parâmetros dos gráficos precedentes, supondo incidência normal ($\zeta = 90^\circ$) e fração de espalhadores $f_{\text{pack}} = 1/3$ (regime de percolação). Note que o modo TM fornece uma

variação maior de $v_E^{(I)}$ no intervalo de frequência que consideramos, apresentando alternância entre máximos ($v_E^{(I)}/c \approx 0,5$ ou $0,6$) e mínimos ($v_E^{(I)}/c \approx 0,1$) a cada 3 THz, aproximadamente. A grande diferença de velocidades dos modos TM e TE para $f < 6$ THz se deve à excitação de plásmons volumétricos no modo TM, o que resulta em um maior tempo de permanência da radiação no interior dos centros espalhadores e, por conseguinte, em uma menor velocidade de transporte de energia. Para $f < 3$ THz, podemos controlar o transporte de energia no meio desordenado apenas alterando a polarização da onda incidente: $v_E^{(II)} \approx c$ para o modo TE e $v_E^{(I)}/c \approx 0,1$ para o modo TM.

7.4 Conclusões

Sob incidência oblíqua de radiação, obtivemos expressões gerais para os campos eletromagnéticos internos dentro de dois cilindros magnéticos concêntricos de raios arbitrários. As energias eletromagnéticas armazenadas no interior do caroço cilíndrico e da camada foram calculadas separadamente, o que nos fornece informações precisas das ressonâncias devidas aos campos eletromagnéticos em ambos materiais que constituem o centro espalhador. À semelhança do Capítulo 3, uma expressão vinculando a energia interna a uma grandeza (mensurável) de espalhamento (Q_{abs}) foi obtida. Na ausência de um campo magnético externo para as polarizações TM e TE, calculamos numericamente a energia armazenada em um cilindro com uma grande constante dielétrica revestido para uma camada isotrópica de grafeno-SiC. Concluimos que a ressonância de plásmon volumétrica na camada de grafeno-SiC leva a um aumento de campo fora da ressonância, que é máximo sob incidência normal e está associado a um grande valor de absorção ($Q_{\text{abs}} \approx 2,5$). Tal constatação leva, na aproximação de fraca desordem e cilindros idênticos compondo um meio desordenado bidimensional, a uma velocidade de transporte $v_E^{(I)}/c \approx 0,1$ para a polarização TM, em contraste com $v_E^{(II)} \approx c$ para a polarização TE.

Absorção omnidirecional em cilindros finos revestidos

Neste Capítulo, discutimos uma aplicação do sistema envolvendo cilindros dielétricos revestidos por materiais plasmônicos como absorvedores de radiação [206]. Este é um tópico de pesquisa bastante atual e que se beneficiou dos progressos em nanotecnologia [207, 208] e do advento dos metamateriais ópticos [209–213]. Desde o trabalho pioneiro de Salisbury [214], que patenteou um dispositivo absorvedor de micro-ondas (composto de uma fina camada absorvente sobre uma superfície refletora de radiação), muitas propostas foram desenvolvidas. A maioria dessas propostas se valem, atualmente, das ressonâncias de plásmons em estruturas metálicas abaixo do comprimento de onda, tais como nanopartículas [215], grades [216, 217] e fendas [218]. No entanto, essas abordagens são usualmente limitadas a bandas estreitas de frequência ou dependem fortemente do ângulo de incidência e/ou polarização da onda eletromagnética, restringindo, assim, suas aplicações práticas [207, 208].

Nosso intuito neste Capítulo é demonstrar que no limite de longos comprimentos de onda em relação ao raio do cilindro (limite de Rayleigh), os cilindros revestidos podem ser usados para o aumento e o controle da absorção de ondas eletromagnéticas. Como material de revestimento, usamos uma folha de grafeno [219, 220] epitaxialmente crescida em carbetto de silício (SiC). A vantagem de se utilizar esse material reside no fato de que o grafeno, além de ser opticamente modulável via *dopagem* eletrostática, pode hospedar fortes ressonâncias de plásmons localizados e com longos tempos de vida [198]. É sabido, entretanto,

que uma única folha de grafeno é fracamente absorviva (aproximadamente 2,3% absorvente) [221], o que tem motivado propostas alternativas para aumentar o máximo de absorção [199, 222–226]. Aqui, usando o meio efetivo grafeno-SiC, mostramos que é possível obter-se valores elevados de absorção eletromagnética para uma banda larga de frequência no regime de THz (infravermelho distante) e para uma grande variação angular. Além disso, mostramos que o efeito de absorção omnidirecional ocorre nas vizinhanças de uma frequência em particular, a qual não corresponde a uma ressonância de espalhamento. Essa frequência, no entanto, está relacionada a um forte aumento de intensidade de campo elétrico dentro do centro espalhador. Este aumento de intensidade fora da ressonância é interpretado em termos das ressonâncias de Fano que ocorrem devido às propriedades ópticas não usuais do meio efetivo grafeno-SiC.

8.1 Limite de Rayleigh para cilindros revestidos

Dando continuidade aos estudos do Capítulo 7, consideramos um cilindro circular infinito de raio a revestido por uma camada cilíndrica concêntrica de raio b , como ilustrado na Fig. 7.1. O sistema composto pelo cilindro e sua “casca” envoltória tem parâmetros materiais (ε_1, μ_1) e (ε_2, μ_2) , respectivamente, e está embebido no espaço livre (ε_0, μ_0) , onde ε é a permissividade elétrica e μ é a permeabilidade magnética. As eficiências de espalhamento (Q_{sca}), extinção (Q_{ext}) e absorção (Q_{abs}) estão definidas nas Eqs. (7.1)–(7.3) do Capítulo 7.

Aqui, consideramos o caso não magnético, de forma que $\mu_1 = \mu_2 = \mu_0$, e que os comprimentos de onda sejam muito maiores que o raio do cilindro como um todo ($kb \ll 1$). Essas considerações fazem com que o modo TM ($\mathbf{H}_i^{(I)} \perp \hat{\mathbf{z}}$ para todo ζ) seja o mais importante para a nossa análise. Uma vez que apenas os modos elétricos são excitados nessa configuração, a variação do ângulo de incidência ζ corresponde a variar o ângulo entre o campo elétrico incidente $\mathbf{E}_i^{(I)}$ e o eixo do cilindro. No modo TE (caso II), entretanto, o campo elétrico incidente é fixo ($\mathbf{E}_i^{(II)} \perp \hat{\mathbf{z}}$ para todo ζ), de maneira que só podemos ter um único tipo de excitação elétrica.

8.1.1 Eficiências em termos de polarizabilidades

Na aproximação dipolar não magnética, obtemos os coeficientes de espalhamento para o modo TM:

$$b_0^{(I)} \approx -i \frac{\pi}{4} y^2 \left(\frac{\varepsilon_{\text{eff}}^{\parallel} - \varepsilon_0}{\varepsilon_0} \right) \sin^2 \zeta + \mathcal{O}(y^4), \quad (8.1)$$

$$b_1^{(I)} \approx -i \frac{\pi}{4} y^2 \left(\frac{\varepsilon_{\text{eff}}^{\perp} - \varepsilon_0}{\varepsilon_{\text{eff}}^{\perp} + \varepsilon_0} \right) \cos^2 \zeta + \mathcal{O}(y^4), \quad (8.2)$$

$$a_1^{(I)} \approx \frac{\pi}{4} y^2 \left(\frac{\varepsilon_{\text{eff}}^{\perp} - \varepsilon_0}{\varepsilon_{\text{eff}}^{\perp} + \varepsilon_0} \right) \cos \zeta + \mathcal{O}(y^4) \approx i b_1^{(I)} \sec \zeta, \quad (8.3)$$

onde definimos as *permissividades elétricas efetivas*

$$\varepsilon_{\text{eff}}^{\parallel} = S^2 \varepsilon_1 + (1 - S^2) \varepsilon_2, \quad (8.4)$$

$$\varepsilon_{\text{eff}}^{\perp} = \frac{\varepsilon_2 [(1 + S^2) \varepsilon_1 + (1 - S^2) \varepsilon_2]}{(1 - S^2) \varepsilon_1 + (1 + S^2) \varepsilon_2}, \quad (8.5)$$

com $S = a/b$ sendo a razão de aspecto, e $a_0^{(I)} = 0$. Os parâmetros efetivos $\varepsilon_{\text{eff}}^{\parallel}$ e $\varepsilon_{\text{eff}}^{\perp}$, calculados de acordo com a teoria de Maxwell Garnett [112], estão associados às ressonâncias de espalhamento nas polarizações elétricas paralela ($\mathbf{E}_i^{(I)} \parallel \hat{\mathbf{z}}$ para $\zeta = 90^\circ$) e perpendicular ($\mathbf{E}_i^{(I)} \perp \hat{\mathbf{z}}$ para $\zeta = 0$) ao eixo do cilindro, respectivamente. Em particular, como no modo TE o campo elétrico incidente é ortogonal ao eixo do cilindro para todo ζ (polarização perpendicular), não se tem $\varepsilon_{\text{eff}}^{\parallel}$. Assim, no limite de Rayleigh, obtemos os seguintes coeficientes de espalhamento no modo TE:

$$a_1^{(II)} \approx -i \frac{\pi}{4} y^2 \left(\frac{\varepsilon_{\text{eff}}^{\perp} - \varepsilon_0}{\varepsilon_{\text{eff}}^{\perp} + \varepsilon_0} \right) + \mathcal{O}(y^4), \quad (8.6)$$

$$b_1^{(II)} \approx -\frac{\pi}{4} y^2 \left(\frac{\varepsilon_{\text{eff}}^{\perp} - \varepsilon_0}{\varepsilon_{\text{eff}}^{\perp} + \varepsilon_0} \right) \cos \zeta + \mathcal{O}(y^4) \approx -a_1^{(I)}, \quad (8.7)$$

sendo $a_0^{(II)} \approx \mathcal{O}(y^4)$ e $b_0^{(II)} = 0$.

As Eqs. (8.1)–(8.3), (8.6) e (8.7) fornecem as amplitudes de monopolo (b_0) e dipolares (a_1 e b_1) do caso não magnético. Como se nota, a incidência oblíqua de radiação favorece as excitações de dipolo e monopolo magnéticos mesmo para $\mu_1 = \mu_2 = \mu_0$. As ressonâncias de espalhamento, no presente caso, ocorrem nas frequências em que $\text{Re}(\varepsilon_{\text{eff}}^{\parallel}) = 0$ e $\text{Im}(\varepsilon_{\text{eff}}^{\parallel}) \gg \varepsilon_0$ (plásmons volumétricos) e $\text{Re}(\varepsilon_{\text{eff}}^{\perp}) = -\varepsilon_0$ e $\text{Im}(\varepsilon_{\text{eff}}^{\perp}) \ll \varepsilon_0$ (plásmons localizados de superfície) [1], onde essas excitações são ortogonais entre si, como mostram as Eqs. (8.1) e (8.2).

Considere as polarizabilidades paralela e perpendicular α (por unidade de volume) definidas na Ref. [2] para incidência normal:

$$\alpha_{||} = \frac{\varepsilon_{\text{eff}}^{\parallel} - \varepsilon_0}{\varepsilon_0} , \quad (8.8)$$

$$\alpha_{\perp} = \frac{2(\varepsilon_{\text{eff}}^{\perp} - \varepsilon_0)}{\varepsilon_{\text{eff}}^{\perp} + \varepsilon_0} . \quad (8.9)$$

Usando as Eqs. (8.1)–(8.7), calculamos as eficiências de extinção e espalhamento na aproximação dipolar para ambos os modos TM e TE, respectivamente:

$$Q_{\text{ext}}^{(\text{I})} \approx \frac{\pi}{2} y \text{Im}(\alpha_{||} \sin^2 \zeta + \alpha_{\perp} \cos^2 \zeta) , \quad (8.10)$$

$$Q_{\text{sca}}^{(\text{I})} \approx \frac{\pi^2}{8} y^3 \left[|\alpha_{||}|^2 \sin^4 \zeta + \frac{1}{2} |\alpha_{\perp}|^2 (1 + \cos^2 \zeta) \cos^2 \zeta \right] , \quad (8.11)$$

$$Q_{\text{ext}}^{(\text{II})} \approx \frac{\pi}{2} y \text{Im}(\alpha_{\perp}) , \quad (8.12)$$

$$Q_{\text{sca}}^{(\text{II})} \approx \frac{\pi^2}{16} y^3 |\alpha_{\perp}|^2 (1 + \cos^2 \zeta) . \quad (8.13)$$

Para uma onda plana incidente de polarização arbitrária ou despolarizada, temos $Q_{\text{ext}} = [Q_{\text{ext}}^{(\text{I})} + Q_{\text{ext}}^{(\text{II})}]/2$ e $Q_{\text{sca}} = [Q_{\text{sca}}^{(\text{I})} + Q_{\text{sca}}^{(\text{II})}]/2$, sendo a eficiência de absorção dada por $Q_{\text{abs}} = Q_{\text{ext}} - Q_{\text{sca}}$. Nas Eqs. (8.10)–(8.13), observe que $Q_{\text{ext}} \propto y$ e $Q_{\text{sca}} \propto y^3$, o que implica $Q_{\text{abs}} \approx Q_{\text{ext}}$ no limite de Rayleigh (cilindros “finos”). Em outras palavras, a absorção *domina* sobre o espalhamento.

8.1.2 Absorção omnidirecional

O máximo de absorção, portanto, deve ocorrer para ângulos ζ em que espalhamento é mínimo. No modo TE, dado pela Eq. (8.13), é trivial: o espalhamento é mínimo para $\zeta = 90^\circ$. No entanto, para o modo TM, é preciso avaliar as amplitudes $|\alpha_{\perp}|$ e $|\alpha_{||}|$ para saber qual delas favorece mais o espalhamento. De modo geral, considerando $\partial Q_{\text{sca}}^{(\text{II})}(\omega, \zeta)/\partial \zeta = 0$, obtemos uma condição para o mínimo de espalhamento em função do ângulo de incidência ($0 < \zeta \leq 90^\circ$):

$$\left| \frac{\alpha_{||}}{\alpha_{\perp}} \right| = \frac{1}{2} \sqrt{1 + 3 \cot^2 \zeta} . \quad (8.14)$$

A condição para o mínimo de espalhamento (ou absorção máxima) no limite de Rayleigh, Eq. (8.14), pode ser usada para determinar uma condição para o máximo de absorção para o modo TM.

As condições para o espalhamento mínimo nos modos TM e TE são fortemente dependentes do ângulo de incidência ζ . Contudo, no limite de Rayleigh, podemos sempre escolher $y = kb$ tal que $Q_{\text{abs}} \gg Q_{\text{sca}}$, de forma que o cilindro se comporta como um absorvedor perfeito. Ainda há, todavia, a dependência com o ângulo de incidência ζ . Note que a Eq. (8.12) é independente do ângulo de incidência, fornecendo, portanto, uma mesma absorção $Q_{\text{abs}}^{(\text{II})} \approx Q_{\text{ext}}^{(\text{II})}$ para todo ζ . No caso do modo TM, Eq. (8.10), fica evidente que a absorção independe de ζ apenas para

$$\text{Im}(\alpha_{\parallel}) = \text{Im}(\alpha_{\perp}) , \quad (8.15)$$

de modo que temos, para uma onda não polarizada, $Q_{\text{abs}} \approx (\pi y/2)\text{Im}(\alpha_{\parallel})$. Em outras palavras: a geometria cilíndrica possui pelo menos um valor de frequência em que a absorção *independe* da polarização e do ângulo de incidência. A Eq. (8.15), portanto, fornece uma condição de *omnidirecionalidade* para absorção. Metamateriais satisfazendo essa propriedade de *absorção omnidirecional* para uma banda de frequência poderiam ser usados como *absorvedores perfeitos*.

Em termos das permissividades efetivas, a condição de absorção omnidirecional, dada pela Eq. (8.15), leva a:

$$\text{Im}(\varepsilon_{\text{eff}}^{\parallel}) = \frac{4\varepsilon_0^2}{|\varepsilon_{\text{eff}}^{\perp} + \varepsilon_0|^2} \text{Im}(\varepsilon_{\text{eff}}^{\perp}) . \quad (8.16)$$

A vantagem dos parâmetros efetivos, nesse caso, reside no fato de que podemos escolher combinações distintas de razão de aspecto S e de materiais no caroço cilíndrico (ε_1, μ_1) e na camada (ε_2, μ_2) de maneira que a Eq. (8.16) seja satisfeita para várias frequências sem violar as relações de Kramers-Kronig [1]. Em um cilindro homogêneo, isso não seria possível. De fato, considerando um cilindro homogêneo (ε, μ) (isto é, $S \rightarrow 0, 1$ ou $\varepsilon_1 = \varepsilon_2$), tem-se $\varepsilon_{\text{eff}}^{\parallel} = \varepsilon_{\text{eff}}^{\perp} = \varepsilon$, e a Eq. (8.16) conduz a $\text{Re}(\varepsilon) = -\varepsilon_0 \pm \sqrt{4\varepsilon_0^2 - [\text{Im}(\varepsilon)]^2}$. Esta relação entre as partes real e imaginária de ε indica apenas dois pontos de absorção omnidirecional (um entre as ressonâncias de plásmons volumétricos e de superfícies) e impõe um limite superior para a absorção nestes pontos: $\text{Im}(\varepsilon) \leq 2\varepsilon_0$, levando a $Q_{\text{abs}} \leq \pi y$. Neste caso particular, pode-se demonstrar que não é possível construir um material em que essa relação seja satisfeita para uma banda de frequência, uma vez que as relações de Kramers-Kronig seriam violadas. Além disso, para cilindros homogêneos, pode-se

verificar da Eq. (8.14) que o mínimo de espalhamento nestes dois valores de ε ocorre apenas para $\zeta = 45^\circ$ visto que $|\alpha_{||}| = |\alpha_{\perp}|$.

8.2 Resultados numéricos para o grafeno

Nesta Seção, damos continuidade às análises numéricas realizadas na Seção 7.3 do Capítulo 7. Consideramos novamente um cilindro de silício (Si) com permissividade elétrica $\varepsilon_1/\varepsilon_0 = 11,7 + 0,01i$ e um raio 10 vezes menor que no Capítulo anterior: $a = 0,5 \mu\text{ m}$. O material de revestimento é constituído por uma folha de grafeno crescida epitaxialmente em carbetto de silício (SiC). A escolha desse meio efetivo se deve às propriedades únicas do grafeno, dentre as quais o fato de suportar plásmons de superfície fortemente confinados e com um tempo de vida longo comparado aos materiais plasmônicos usuais [198, 199]. As propriedades ópticas do meio efetivo grafeno-SiC foram bem descritas recentemente por um modelo de Drude-Lorentz [198]. Na ausência de um campo magnético externo, a condutividade elétrica 2D (σ_{2D}) deste meio efetivo está definida na Eq. (7.44) [198].

Usamos aqui os mesmos parâmetros materiais da Seção 7.3 [198]: $\hbar\mathcal{D}/\sigma_0 = 0,52 \text{ meV}$, $\hbar\omega_0 = 6,5 \text{ meV}$ ($\omega_0 \approx 2\pi \times 1,6 \text{ THz}$) e $\hbar\Gamma = 5,5 \text{ meV}$, onde $\mathcal{D}$ é o peso espectral de plásmon, Γ é o coeficiente de dissipação, ω_0 é a frequência de plásmon e $\sigma_b = 3,5\sigma_0$, com $\sigma_0 = e^2/(4\hbar)$ sendo a condutividade universal. A espessura da camada é $d = b - a = 1 \mu\text{ m}$, de modo que a permissividade do meio grafeno-SiC é $\varepsilon_{\text{gra}}(\omega) = \varepsilon_0 + i\sigma_{2D}(\omega)/(\omega d)$ – Fig. 7.2 do Capítulo 7. O conjunto de parâmetros escolhidos asseguram a validade do limite de Rayleigh [Eqs. (8.1)-(8.11)]. De fato, nos restringimos ao intervalo de frequência $1,0 \text{ meV} \leq \hbar\omega \leq 60 \text{ meV}$, que corresponde a $7,6 \times 10^{-3} < y < 0,46$ para $b = 1,5 \mu\text{ m}$ ($S = 1/3$). No entanto, para os cálculos numéricos e discussões, aplicamos a solução *exata* do espalhamento por cilindros concêntricos [184], construída no Capítulo 7.

Na Fig. 8.1(a), calculamos a eficiência de absorção média Q_{abs} (onda despolarizada) para um cilindro de Si revestido pelo meio efetivo de grafeno-SiC para cinco diferentes ângulos de incidência. As ressonâncias nas polarizabilidades paralela e perpendicular ocorrem em $f \approx 1,5 \text{ THz}$ (plásmons volumétricos) e $f \approx 7,1 \text{ THz}$ (plásmons de superfície), respectivamente. Para esta configuração, a absorção

Figura 8.1 – Eficiência de absorção média $Q_{\text{abs}} = [Q_{\text{abs}}^{(\text{I})} + Q_{\text{abs}}^{(\text{II})}]/2$ (onda despolarizada) para um cilindro de silício (Si) ($\varepsilon_1/\varepsilon_0 = 11,7 + 0,01i$), de raio $a = 0,5 \mu\text{m}$, revestido por um meio efetivo composto de uma folha de grafeno epitaxialmente crescida em carbetto de silício (SiC) [$\varepsilon_2 = \varepsilon_{\text{gra}}(\omega)$], dado pela Eq. (7.45), de espessura $d = 1 \mu\text{m}$ no limite de Rayleigh. (a) Q_{abs} em função da frequência $f = \omega/2\pi$ e do ângulo ζ entre o cilindro e a onda incidente. A absorção omnidirecional ocorre para $f \approx 5,2 \text{ THz}$. (b) Razão $Q_{\text{abs}}/Q_{\text{ext}}$, onde $Q_{\text{ext}} = [Q_{\text{ext}}^{(\text{I})} + Q_{\text{ext}}^{(\text{II})}]/2$ é a eficiência de extinção média, para o mesmo conjunto de parâmetros, mostrando que $Q_{\text{abs}}/Q_{\text{ext}} \geq 0,85$ neste intervalo de frequência para todos os ângulos ζ .

omnidirecional ocorre em $f \approx 5,2$ THz, que funciona como ponto de equilíbrio entre as ressonâncias de plásmons volumétricos ($\varepsilon'_2 = 0$) e de superfície ($\varepsilon'_2 = -\varepsilon_0$). Nesta região de frequência, os valores de absorção dominam o espalhamento para todos os ângulos de incidência ($Q_{\text{abs}}/Q_{\text{ext}} \geq 0,85$). Como discutimos, essa é uma característica do limite de Rayleigh ($kb \ll 1$), de forma que, para valores menores de b , poderíamos obter facilmente $Q_{\text{abs}}/Q_{\text{ext}} > 0,9$. No entanto, como $Q_{\text{abs}} \propto kb$ nesse limite, o valor de absorção como um todo também seria menor. A vantagem de nossa abordagem reside na liberdade de escolha para materiais do “caroço” cilíndrico e da camada envoltória. Em nosso exemplo, a fim estudar apenas a absorção da camada de grafeno-SiC, optamos por um caroço de Si, que é um material fracamente absoritivo em terahertz. É possível, portanto, explorando o material do caroço e os parâmetros de tamanho, obtermos por meio de revestimentos de grafeno-SiC uma região de parâmetros em que a absorção omnidirecional seja máxima para um intervalo de frequência da ordem de 10 THz.

A configuração que apresentamos na Fig. 8.1(a) é apenas ilustrativa do efeito de absorção omnidirecional, uma vez que os parâmetros do sistema não estão otimizados para a máxima absorção. Há, portanto, uma dependência grande dos parâmetros dispersivos dos materiais que compõem o centro espalhador. Na Ref. [198], é discutido que a presença da condutividade de fundo σ_b introduz ressonâncias de Fano no sistema, de forma que o meio efetivo grafeno-SiC apresenta ressonâncias assimétricas intrinsecamente. Para comprovar isso, escolhemos a ressonância de dipolo em $f \approx 7,1$ THz, a qual está presente em ambos os modos TM e TE e é devida às componentes de campo elétrico perpendiculares ao cilindro. Como se observa na Fig. 8.2, a ausência de uma condutividade de fundo leva a ressonância assimétrica de plásmom de superfície para uma função simétrica (Lorentziana). A presença de $\sigma_b \neq 0$ é responsável por uma diminuição sensível da absorção na ressonância. Tal constatação, uma vez mais, reforça a dependência dos parâmetros materiais do sistema para a obtenção de uma absorção omnidirecional máxima.

Como discutimos no Capítulo 4, ressonâncias de Fano nas seções de choque totais são esperadas ocorrer para centros espalhadores revestidos – por exemplo, esferas de caroços dielétricos e camadas plasmônicas para $S \approx 1$ no limite de Rayleigh [55, 156]. Estas ressonâncias assimétricas, para revestimentos

Figura 8.2 – Eficiência de absorção média $Q_{\text{abs}} = [Q_{\text{abs}}^{(\text{I})} + Q_{\text{abs}}^{(\text{II})}]/2$ (onda não polarizada) para um cilindro de silício (Si) ($\varepsilon_1/\varepsilon_0 = 11,7 + 0,01i$), de raio $a = 0,5 \mu\text{m}$, revestido por um meio efetivo composto de uma folha de grafeno epitaxialmente crescida em carbetto de silício (SiC), $\varepsilon_2 = \varepsilon_{\text{gra}}(\omega)$, de espessura $d = 1 \mu\text{m}$. O ângulo $\zeta = 1^\circ$ impõe que o campo elétrico da onda incidente seja aproximadamente ortogonal ao eixo do cilindro mesmo no modo TM, excitando apenas plásmons de superfície. Para $\sigma_b = 3,5\sigma_0$, temos uma curva assimétrica (do tipo Fano); para $\sigma_b = 0$, temos uma Lorentziana.

plasmônicos, são resultado da hibridização de plásmons nas interfaces caroço-casca e casca-exterior para d menor que o comprimento de penetração (*skin depth*) [156]. Tais ressonâncias estão na origem do aumento de intensidade de campo elétrico interno em regiões de frequência fora da ressonância de espalhamento [67, 83, 156]. Nesse contexto, a presença de σ_b poderia ser interpretada como uma “reminiscência” do fato de que temos o carbetto de silício (um semiconductor) revestido por um material plasmônico: a folha de grafeno. A própria composição do sistema levaria, portanto, a um aumento de intensidade no campo próximo que não se acopla às seções de choque.

No intuito de investigar o aumento de intensidade de campo no interior do cilindro revestido, calculamos a média angular de campo elétrico no interior do

Figura 8.3 – Média angular da intensidade de campo elétrico $\langle |\mathbf{E}^{(1)}|/E_0|^2 \rangle_{\Omega}$ no interior de um cilindro de silício (Si) ($\varepsilon_1/\varepsilon_0 = 11,7 + 0,01i$), de raio $a = 0,5 \mu\text{m}$, revestido por uma camada de meio efetivo grafeno-SiC $\varepsilon_2 = \varepsilon_{\text{gra}}(\omega)$, de espessura $d = 1 \mu\text{m}$, em função da distância radial para $\zeta = 60^\circ$. A onda incidente encontra-se na polarização TM ($\mathbf{H}_i \perp \hat{\mathbf{z}}$ para todo ζ). As frequências analisadas são: $f = 1,5 \text{ THz}$ (plásmon volumétrico, $\alpha_{||}$), $f = 5,2 \text{ THz}$ (absorção omnidirecional) e $f = 7,1 \text{ THz}$ (plásmon de superfície, $\alpha_{\perp}$).

cilindro em função da distância radial: $\langle |\mathbf{E}|^2 \rangle_{\Omega} = \int_0^{2\pi} d\phi |\mathbf{E}|^2 / 2\pi$. Assim, usando as expressões para a energia interna, Eqs. (7.17), (7.18), (7.23) e (7.24), obtemos [184]:

$$\frac{\langle |\mathbf{E}_{1r\phi}|^2 \rangle_{\Omega}}{|E_0|^2} = \frac{1}{2} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left[\left| c_n \frac{\cos \zeta}{m_1} - d_n \right|^2 |J_{n-1}(\rho_1)|^2 + \left| c_n \frac{\cos \zeta}{m_1} + d_n \right|^2 |J_{n+1}(\rho_1)|^2 \right], \quad (8.17)$$

$$\frac{\langle |\mathbf{E}_{1z}|^2 \rangle_{\Omega}}{|E_0|^2} = \left| \frac{\eta_1}{m_1} \right|^2 \sum_{n=-\infty}^{\infty} |c_n|^2 |J_n(\rho_1)|^2, \quad (8.18)$$

$$\begin{aligned} \frac{\langle |\mathbf{E}_{2r\phi}|^2 \rangle_{\Omega}}{|E_0|^2} = & \frac{1}{2} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left\{ \left| f_n \frac{\cos \zeta}{m_2} - g_n \right|^2 |J_{n-1}(\rho_2)|^2 + \left| f_n \frac{\cos \zeta}{m_2} + g_n \right|^2 |J_{n+1}(\rho_2)|^2 \right. \\ & \left. + \left| v_n \frac{\cos \zeta}{m_2} - w_n \right|^2 |Y_{n-1}(\rho_2)|^2 + \left| v_n \frac{\cos \zeta}{m_2} + w_n \right|^2 |Y_{n+1}(\rho_2)|^2 \right\} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + 2\text{Re} \left[\left(f_n \frac{\cos \zeta}{m_2} - g_n \right) \left(v_n^* \frac{\cos \zeta}{m_2^*} - w_n^* \right) J_{n-1}(\rho_2) Y_{n-1}(\rho_2^*) \right] \\
& + 2\text{Re} \left[\left(f_n \frac{\cos \zeta}{m_2} + g_n \right) \left(v_n^* \frac{\cos \zeta}{m_2^*} + w_n^* \right) J_{n+1}(\rho_2) Y_{n+1}(\rho_2^*) \right] \Bigg\}, \quad (8.19)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\langle |\mathbf{E}_{2z}|^2 \rangle_\Omega}{|E_0|^2} &= \left| \frac{\eta_2}{m_2} \right|^2 \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left\{ |f_n|^2 |J_n(\rho_2)|^2 + |v_n|^2 |Y_n(\rho_2)|^2 \right. \\
&\quad \left. + 2\text{Re} [f_n v_n^* J_n(\rho_2) Y_n(\rho_2^*)] \right\}, \quad (8.20)
\end{aligned}$$

onde todos os coeficientes e funções estão definidos no Capítulo 7 para os modos TM e TE. Em particular, as médias angulares para as intensidades dos campos magnéticos são obtidas por meio das substituições: $(\mathbf{E}, E_0)$ por $(\mathbf{H}, H_0)$, (c_n, d_n) por $(\tilde{m}_1 d_n, \tilde{m}_1 c_n)$, (f_n, g_n) por $(\tilde{m}_2 g_n, \tilde{m}_2 f_n)$ e (v_n, w_n) por $(\tilde{m}_2 w_n, \tilde{m}_2 v_n)$. Devido à geometria cilíndrica, note que a média angular não é realizada no *ângulo sólido*, mas sim no ângulo $\Omega = 2\pi$ (sistema “bidimensional”).

Na Fig. 8.3, para o modo TM ($\mathbf{H}_i^{(1)} \perp \hat{\mathbf{z}}$ para todo ζ), plotamos a média angular do campo elétrico dentro do cilindro revestido como função da distância radial ao seu centro. Escolhemos a polarização TM por ela apresentar as ressonâncias de plásmos volumétricos e de superfície. Como a ideia é estudarmos configurações de máxima absorção, consideramos $\zeta = 60^\circ$, que é um valor intermediário entre os máximos de ressonância a $\zeta \approx 0$ ($\alpha_\perp$) e $\zeta = 90^\circ$ ($\alpha_\parallel$) [veja a Fig. 8.1(b)], e satisfaz a Eq. (8.14) para o mínimo espalhamento em 5,2 THz (absorção omnidirecional, com $Q_{\text{abs}}/Q_{\text{ext}} \approx 0,92$). Como se nota na Fig. 8.3, a ressonância de plásmom volumétrica em $f \approx 1,5$ THz corresponde, aproximadamente, a um campo elétrico estático dentro do sistema caroço-casca devido à forte absorção de radiação na camada de grapheno-SiC ($\varepsilon'_2 \approx 0$). Por outro lado, para $f = 5,2$ THz, que é o valor de frequência para o qual a absorção omnidirecional ocorre e não corresponde a uma ressonância de espalhamento, a intensidade do campo elétrico dentro do sistema é significativamente maior do que na ressonância de plásmom volumétrico (*estado escuro*). De fato, verificamos numericamente que, na ressonância de plásmom volumétrico, $\langle |\mathbf{E}^{(1)}/E_0|^2 \rangle_\Omega \approx \sin^2 \zeta$ para todos os valores de distância radial r/a . Por conseguinte, da média angular da intensidade, apenas a componente elétrica paralela ao eixo do cilindro ($E_0 \sin \zeta$) existe no interior do cilindro revestido em $f = 1,5$ THz.

Isso é corroborado na Fig. 8.3, onde se percebe que a intensidade de campo elétrico é contínua na interface entre os materiais que compõem o centro espalhador.

Todavia, o mesmo não pode ser dito com relação à ressonância de plásmon de superfície, que ocorre em $f = 7,1$ THz. O valor de campo interno, nas proximidades dessa ressonância, é maior do que para outras frequências, mostrando que há acoplamento com o campo distante. Em outras palavras, a presença de $\sigma_b \neq 0$, que induz uma ressonância assimétrica como a da Fig. 8.2 para $\zeta \approx 0$, não leva a um aumento de intensidade de campo elétrico fora da ressonância de espalhamento. Porém, a ressonância de plásmon volumétrico em Q_{abs} não se acopla ao campo próximo, como demonstrado na Fig. 8.3. Esse efeito pode estar associado à ausência de *campo evanescente* nesta ressonância ($\epsilon'_2 \approx 0$). Isso faz com que o sistema, em função da frequência, alterne continuamente entre duas ressonâncias com características distintas no campo próximo, cujo “ponto de equilíbrio” corresponde à *absorção omnidirecional*.

8.3 Conclusões

No limite de Rayleigh ou de cilindros finos (*i.e.*, longos comprimentos de onda com relação ao raio), investigamos configurações em que a absorção de radiação pelo sistema independe da direção de incidência e da polarização da onda plana. Obtivemos critérios analíticos para avaliar a absorção omnidirecional de um material cilíndrico e aplicamos nossos resultados a um cilindro dielétrico revestido por uma folha de grafeno epitaxialmente crescida em carbetto de silício (SiC). Demonstramos que, mesmo para um sistema não otimizado, o limite de Rayleigh em cilindros faz com que a absorção supere o espalhamento no espectro de extinção para todos os ângulos de incidência em uma banda larga de frequência em terahertz. Além disso, o fato da absorção omnidirecional estar localizada, em frequência, entre duas ressonâncias com características de campo próximo distintas (plásmons localizados de superfície e plásmons do *bulk*), a torna interessante para o desenvolvimento de materiais absorvedores de radiação, uma vez que ela representa um “equilíbrio” entre campos evanescentes e propagantes no material plasmônico.

Cilindros magneto-ópticos

Problemas de espalhamento em que a partícula é composta de um material *anisotrópico* são geralmente intratáveis do ponto de vista analítico [1]. Dentre as poucas exceções, com solução analítica *exata*, tem-se um cilindro infinito sob incidência normal de radiação. Neste caso particular, o cilindro deve ser composto de um material anisotrópico *uniaxial*, onde o eixo do cilindro deve coincidir com o eixo óptico do material [1, 227]. Sistemas com esse tipo de geometria são o assunto deste Capítulo, onde estudamos o espalhamento por cilindros girotrópicos (magneto-ópticos) sob incidência normal de radiação no modo TE – isto é, a polarização da onda incidente é perpendicular ao eixo do cilindro.

Meios magneto-ópticos têm grande relevância tanto no espalhamento simples de Lorenz-Mie [228] quanto no espalhamento múltiplo [229]. Estudos envolvendo a técnica de *cancelamento de espalhamento*, por exemplo, usando cilindros revestidos por um material magneto-óptico, foram recentemente reportados [186, 201]. Em aplicações desse tipo, a vantagem de se utilizar materiais magneto-ópticos reside no fato de que – via um *campo magnético externo* – é possível *sintonizar* a região de frequência na qual o espalhamento é nulo, construindo-se, assim, “mantos de invisibilidade” sintonizáveis. Em particular, a análise da Ref. [201] baseia-se em um *meio efetivo* constituído por uma folha de grafeno epitaxialmente crescida em carbetto de silício (SiC) [198]. Esse meio efetivo à base de grafeno é o mesmo que usamos, nos Capítulos 7 e 8, na análise da energia interna e absorção em função do ângulo de incidência no caso isotrópico ($\mathbf{B} = \mathbf{0}$). Os autores da Ref. [201], no entanto, consideraram o meio grafeno-SiC no caso mais geral, analisando o comportamento

da absorção (no modo TE e incidência normal) em cilindros revestidos em função do campo $\mathbf{B}$ aplicado⁴⁶.

O estudo que aqui nos propomos, dando continuidade à nossa abordagem da energia interna, lida apenas com os campos eletromagnéticos no interior de um cilindro magneto-óptico *sem revestimento algum*. Uma vez mais, empregamos o meio efetivo grafeno-SiC, de forma que o presente estudo complementa os Capítulos 7 e 8 para $\mathbf{B} \neq \mathbf{0}$ e cilindro homogêneo. Aplicações como a técnica de cancelamento de espalhamento (*cloaking*) e ressonâncias de Fano induzidas por camadas plasmônicas estão, em parte, descartadas deste Capítulo. Contudo, apesar de não considerarmos explicitamente um cilindro revestido como nos Capítulos anteriores, o meio efetivo grafeno-SiC traz, implícita e intrinsecamente, o revestimento do carbeto de silício por uma folha de grafeno.

Nas Seções a seguir, desenvolvemos brevemente a teoria de Lorenz-Mie para essa geometria usando a mesma notação de *Bohren & Huffman*. O objetivo é determinarmos uma expressão exata para a energia eletromagnética armazenada em um cilindro girotrópico arbitrário e calcularmos as propriedades de transporte de energia em um meio desordenado bidimensional (de grafeno-SiC) em função do campo magnético externo.

9.1 Densidade de energia em meios girotrópicos

Em um meio linear anisotrópico há relações entre $\mathbf{B}$ e $\mathbf{H}$ e entre $\mathbf{D}$ e $\mathbf{E}$, mas os campos vetoriais não estão alinhados como no caso isotrópico. Eles são, em realidade, transformados por uma matriz ou tensor que representa os parâmetros materiais do meio [95, 96]. Explicitamente, podemos escrever

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}, t) = \overleftrightarrow{\epsilon} \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) , \quad (9.1)$$

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = \overleftrightarrow{\mu} \cdot \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) , \quad (9.2)$$

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}, t) = \overleftrightarrow{\sigma} \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) , \quad (9.3)$$

onde $\overleftrightarrow{\epsilon}$ é a permissividade diádica ou *tensor de permissividade*, $\overleftrightarrow{\mu}$ é o *tensor de permeabilidade*, e $\overleftrightarrow{\sigma}$ é o *tensor de condutividade*.

⁴⁶ Agradecemos a W. J. M. Kort-Kamp pelas frutíferas discussões atinentes a cilindros girotrópicos e grafeno [201].

Muitos tipos diferentes de materiais demonstram comportamento anisotrópico, incluindo cristais ópticos, plasmas magnetizados e ferritas. Plasmas e ferritas, em particular, são exemplos de meios *girotrópicos* [230]. Para esse tipo especial de anisotropia, escolhendo adequadamente o sistema de coordenadas, os tensores de permissividade e permeabilidade no domínio da frequência podem ser representados na forma matricial [96]:

$$\overleftrightarrow{\varepsilon} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} & \varepsilon_{xy} & 0 \\ -\varepsilon_{xy} & \varepsilon_{xx} & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{zz} \end{pmatrix}, \quad \overleftrightarrow{\mu} = \begin{pmatrix} \mu_{xx} & \mu_{xy} & 0 \\ -\mu_{xy} & \mu_{xx} & 0 \\ 0 & 0 & \mu_{zz} \end{pmatrix}, \quad (9.4)$$

onde $\varepsilon_{yx} = -\varepsilon_{xy}$, $\varepsilon_{yy} = \varepsilon_{xx}$, $\mu_{yx} = -\mu_{xy}$ e $\mu_{yy} = \mu_{xx}$. Cada uma das entradas dessas matrizes pode ser complexa. Para o caso especial de um material girotrópico não absoritivo, as matrizes tornam-se *hermitianas*, onde os termos diagonais são reais e os termos fora da diagonal são imaginários puros. No sistema de coordenadas retangulares (x, y, z) , a densidade de energia em um meio girotrópico não magnético e com baixa absorção pode ser calculada por [231]

$$\begin{aligned} \langle u \rangle_t &= \frac{1}{4} \left[\mu |\mathbf{H}|^2 + \frac{\partial(\omega \varepsilon_{xx})}{\partial \omega} |E_x|^2 + \frac{\partial(\omega \varepsilon_{yy})}{\partial \omega} |E_y|^2 + \frac{\partial(\omega \varepsilon_{xy})}{\partial \omega} E_x^* E_y + \frac{\partial(\omega \varepsilon_{yx})}{\partial \omega} E_y^* E_x \right] \\ &= \frac{1}{4} \left\{ \mu |\mathbf{H}|^2 + \frac{\partial(\omega \varepsilon_{xx})}{\partial \omega} (|E_x|^2 + |E_y|^2) + 2\text{Re} \left[\frac{\partial(\omega \varepsilon_{xy})}{\partial \omega} E_x^* E_y \right] \right\}, \end{aligned} \quad (9.5)$$

onde consideramos que os termos não diagonais são imaginários puros: $\varepsilon_{xy} = \varepsilon_{yx}^*$. Note que essa condição é necessária para tornar a densidade de energia uma grandeza real, visto que, usando-se apenas $\varepsilon_{xy} = -\varepsilon_{yx}$, o último termo entre colchetes torna-se: $i[\partial(\omega \varepsilon_{xy})/\partial \omega] 2\text{Im}(E_x^* E_y)$.

9.2 Espalhamento por cilindros magneto-ópticos

A fim de tratarmos o caso mais simples de meio girotrópico, consideramos um cilindro homogêneo magneto-óptico de raio a e permeabilidade magnética escalar: $\overleftrightarrow{\mu}_1 = \mu_1 \overleftrightarrow{I}$, onde $\overleftrightarrow{I}$ é o tensor unitário (matriz identidade) e $\mu_1 = \mu'_1 + i\mu''_1$. A

Figura 9.1 – Geometria de espalhamento: um cilindro magneto-óptico infinito, com propriedades ópticas $(\vec{\epsilon}_1, \vec{\mu}_1)$ e raio a , é submetido a um campo magnético uniforme $\mathbf{B}$ ao longo de seu eixo. Uma onda plana $(\mathbf{E}_i^{(\text{II})}, \mathbf{H}_i^{(\text{II})})$ – no modo TE ($\mathbf{E}_i^{(\text{II})} \perp \hat{\mathbf{z}}$) –, propagando-se no meio (ϵ_0, μ_0) , interage com este cilindro em incidência normal. A amplitude do campo magnético incidente é muito menor que a do campo $\mathbf{B}$.

anisotropia do material é então descrita pelo tensor dielétrico

$$\vec{\epsilon}_1 = \begin{pmatrix} \epsilon_1 & \imath\gamma_1 & 0 \\ -\imath\gamma_1 & \epsilon_1 & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon_1 \end{pmatrix} = \epsilon_1 \begin{pmatrix} 1 & \imath\beta & 0 \\ -\imath\beta & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (9.6)$$

onde $\epsilon_1 = \epsilon'_1 + \imath\epsilon''_1$, $\gamma_1 = \gamma'_1 + \imath\gamma''_1$ e $\beta = \gamma_1/\epsilon_1$, sendo (ϵ_0, μ_0) as propriedades materiais do meio circundante. A geometria do sistema encontra-se ilustrada na Fig. 9.1.

9.2.1 Eficiências

Tirante os coeficientes de Lorenz-Mie, as eficiências para um cilindro girotrópico infinito sob incidência normal de radiação no modo TE possuem a mesma forma analítica das eficiências de um cilindro revestido submetido às mesmas condições de incidência. De fato, a solução do problema de espalhamento segue o procedimento apresentando na Seção 2.3, onde a componente H_{1z} dentro do cilindro deve satisfazer a equação de Helmholtz escalar [201]: $(\nabla^2 + k_1^2)H_{1z} = 0$, onde $k_1^2 = \omega^2 \varepsilon_1 (1 - \beta^2) \mu_1$. Com um *ansatz* e uma notação diferente, essa solução pode ser encontrada em detalhes na Ref. [201] para o caso de cilindros concêntricos. Para o caso homogêneo, usando a notação de *Bohren & Huffman* [1], as componentes dos campos eletromagnéticos, bem como as condições de contorno dos campos, encontram-se no Apêndice D.2.2. Dessa forma, para $B = 0$, reobtemos as soluções do Capítulo 7 para o modo TE sob incidência normal e $a = b$.

Uma vez que as relações de paridade dos coeficientes não são válidas no caso anisotrópico (resultado esse que verificamos *a posteriori*), para ordens positivas definidas de multipolos, temos as eficiências totais

$$Q_{\text{sca}} = \frac{2}{x} \left[|a_0|^2 + \sum_{n=1}^{\infty} (|a_{-n}|^2 + |a_n|^2) \right], \quad (9.7)$$

$$Q_{\text{ext}} = \frac{2}{x} \text{Re} \left\{ a_0 + \sum_{n=1}^{\infty} (a_{-n} + a_n) \right\}, \quad (9.8)$$

$$Q_{\text{abs}} = Q_{\text{ext}} - Q_{\text{sca}}; \quad (9.9)$$

e eficiências diferenciais

$$Q_{\text{back}} = \frac{2}{\pi x} \left| a_0 + \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n (a_{-n} + a_n) \right|^2, \quad (9.10)$$

$$Q_{\text{forward}} = \frac{2}{\pi x} \left| a_0 + \sum_{n=1}^{\infty} (a_{-n} + a_n) \right|^2. \quad (9.11)$$

O coeficiente de espalhamento TE, obtido via condições de contorno (Apêndice D.2.2), é:

$$a_n = \frac{\tilde{m} J'_n(x) J_n(m_1 x) - J_n(x) F_n(m_1 x, \beta)}{\tilde{m} H_n^{(1)}(x) J_n(m_1 x) - H_n^{(1)}(x) F_n(m_1 x, \beta)}, \quad (9.12)$$

onde definimos a função auxiliar

$$F_n(m_1x, \beta) = J'_n(m_1x) + \beta n \frac{J_n(m_1x)}{m_1x} . \quad (9.13)$$

Uma vez mais, $x = ka$ é o parâmetro de tamanho do cilindro e definimos

$$m_1 \equiv \frac{k_1}{k} = \sqrt{\frac{\varepsilon_1(1 - \beta^2)\mu_1}{\varepsilon_0\mu_0}} , \quad (9.14)$$

$$\tilde{m}_1 \equiv \sqrt{\frac{\varepsilon_1(1 - \beta^2)\mu_0}{\varepsilon_0\mu_1}} , \quad (9.15)$$

que são, respectivamente, os índices de refração e impedância *efetivos* do cilindro magneto-óptico, de maneira que $m_1 = \tilde{m}_1$ se $\mu_1 = \mu_0$. Em particular, temos $a_{-n} = a_n$ apenas se $\beta = 0$. Note da Eq. (9.14) que podemos definir uma permissividade elétrica *efetiva* para o cilindro magneto-óptico:

$$\varepsilon_B \equiv \varepsilon_1(1 - \beta^2) . \quad (9.16)$$

9.2.2 Energia interna

Das Eqs. (9.5) e (9.6), em coordenadas cilíndricas (r, ϕ, z) , obtemos a densidade de energia no interior do cilindro magneto-óptico cujo campo interno é $(\mathbf{E}_1, \mathbf{H}_1)$:

$$\langle u \rangle_t = \frac{1}{4} \left[\varepsilon_1^{(\text{eff})} (|E_{1r}|^2 + |E_{1\phi}|^2) + \mu_1^{(\text{eff})} |H_{1z}|^2 + 2\text{Im} \left(\gamma_1^{(\text{eff})} E_{1r} E_{1\phi}^* \right) \right] , \quad (9.17)$$

onde $\varepsilon_1^{(\text{eff})} = \partial(\omega\varepsilon'_1)/\partial\omega$, $\mu_1^{(\text{eff})} = \partial(\omega\mu'_1)/\partial\omega$, e $\gamma_1^{(\text{eff})} = \partial(\omega\gamma'_1)/\partial\omega$ são os coeficientes de energia associados ao meio $(\varepsilon_1, \gamma_1, \mu_1)$. Note que usamos o fato de que $|E_{1x}|^2 + |E_{1y}|^2 = |E_{1r}|^2 + |E_{1\phi}|^2$ e $E_{1x}E_{1y}^* = E_{1r}E_{1\phi}^*$. Assim, a energia armazenada em um segmento L de um cilindro circular de raio a é

$$W = \int_{-L/2}^{L/2} dz \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^a dr \, r \langle u \rangle_t . \quad (9.18)$$

Se o cilindro tem as mesmas propriedades ópticas do meio circundante (ε_0, μ_0) , como vimos no Capítulo 7, obtemos

$$W_0 = \frac{\varepsilon_0}{2} |E_0|^2 \pi a^2 L , \quad (9.19)$$

onde E_0 é a amplitude do campo elétrico incidente.

Por simplicidade, definimos, para $k_1 \neq k_1^*$, a função adimensional

$$\mathcal{I}_n = \frac{1}{a^2} \int_0^a dr \, r J_n(k_1 r) J_n(k_1^* r) = \frac{k_1^* a J_n(k_1 a) J_n'(k_1^* a) - k_1 a J_n'(k_1 a) J_n(k_1^* a)}{(k_1 a)^2 - (k_1^* a)^2} ; \quad (9.20)$$

se $k_1 = k_1^*$, a Eq. (7.15) pode ser reescrita, usando L'Hospital, como

$$\mathcal{I}_n = \frac{1}{2} [J_n(k_1 a)^2 - J_{n-1}(k_1 a) J_{n+1}(k_1 a)] . \quad (9.21)$$

A função definida na Eq. (9.20) [ou Eq. (9.21)] é uma simplificação da função que definimos na Eq. (7.15) [ou Eq. (7.16)] no Capítulo 7.

Considere as contribuições parciais para a energia interna: $W_\varepsilon = \int d^3r \varepsilon_1^{(\text{eff})} (|E_{1r}|^2 + |E_{1\phi}|^2)/4$, $W_\mu = \int d^3r \mu_1^{(\text{eff})} |H_{1z}|^2/4$ e $W_\gamma = \int d^3r \text{Im}(\gamma_1^{(\text{eff})} E_{1r} E_{1\phi}^*)/2$. É conveniente, a partir dos campos eletromagnéticos internos do Apêndice D.2.2, Eqs. (D.79)–(D.81), definirmos a função de intensidade

$$\begin{aligned} \mathcal{S}^{(\pm)} = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \left[(|d_{-n}|^2 |1 + \beta|^2 \pm |d_n|^2 |1 - \beta|^2) \mathcal{I}_{n+1} \right. \\ \left. + (|d_n|^2 |1 + \beta|^2 \pm |d_{-n}|^2 |1 - \beta|^2) \mathcal{I}_{n-1} \right] , \end{aligned} \quad (9.22)$$

onde o coeficiente interno de Lorenz-Mie, obtido via condições de contorno [e simplificado pelo Wronskiano $H_n^{(1)}(x) J_n'(x) - H_n'^{(1)}(x) J_n(x) = -2i/(\pi x)$], é

$$d_n = \frac{2i/(\pi x)}{\tilde{m}_1 H_n'^{(1)}(x) J_n(m_1 x) - H_n^{(1)}(x) F_n(m_1 x, \beta)} . \quad (9.23)$$

Note que $d_{-n} = d_n$ apenas se $\beta = 0$.

Usando essas definições, obtemos finalmente

$$\begin{aligned} \frac{W_\varepsilon}{W_0} &= \frac{\varepsilon_1^{(\text{eff})}}{2\varepsilon_0} \sum_{n=-\infty}^{\infty} |d_n|^2 [|1 + \beta|^2 \mathcal{I}_{n-1} + |1 - \beta|^2 \mathcal{I}_{n+1}] \\ &= \frac{\varepsilon_1^{(\text{eff})}}{\varepsilon_0} [|d_0|^2 (1 + |\beta|^2) \mathcal{I}_1 + \mathcal{S}^{(+)}] , \end{aligned} \quad (9.24)$$

$$\begin{aligned} \frac{W_\gamma}{W_0} &= -\frac{\gamma_1^{(\text{eff})}}{2\varepsilon_0} \sum_{n=-\infty}^{\infty} |d_n|^2 [|1 + \beta|^2 \mathcal{I}_{n-1} - |1 - \beta|^2 \mathcal{I}_{n+1}] \\ &= -\frac{\gamma_1^{(\text{eff})}}{\varepsilon_0} [2|d_0|^2 \text{Re}(\beta) \mathcal{I}_1 + \mathcal{S}^{(-)}] , \end{aligned} \quad (9.25)$$

$$\begin{aligned}
\frac{W_\mu}{W_0} &= \frac{\mu_1^{(\text{eff})}}{\mu_0} |\tilde{m}_1|^2 \sum_{n=-\infty}^{\infty} |d_n|^2 \mathcal{I}_n \\
&= \frac{\mu_1^{(\text{eff})}}{\mu_0} |\tilde{m}_1|^2 \left[|d_0|^2 \mathcal{I}_0 + \sum_{n=1}^{\infty} (|d_{-n}|^2 + |d_n|^2) \mathcal{I}_n \right], \quad (9.26)
\end{aligned}$$

de forma que a energia interna é $W = W_\varepsilon + W_\gamma + W_\mu$.

Uma vez que as intensidades dos campos internos são proporcionais à potência absorvida no centro espalhador, podemos escrever a eficiência de absorção Q_{abs} em termos das contribuições parciais de energia:

$$Q_{\text{abs}} = \pi x \left[\frac{\varepsilon_1''}{\varepsilon_1^{(\text{eff})}} \frac{W_\varepsilon}{W_0} + \frac{\gamma_1''}{\gamma_1^{(\text{eff})}} \frac{W_\gamma}{W_0} + \frac{\mu_1''}{\mu_1^{(\text{eff})}} \frac{W_\mu}{W_0} \right]. \quad (9.27)$$

Essa expressão *analítica exata*, à semelhança do que fizemos no Capítulo 6, Eq. (6.50), foi determinada numericamente a partir de nossa experiência com o cálculo de energia interna e seção de choque de absorção. De fato, a Eq. (9.27) pode ser usada para conferir os cálculos numéricos de energia e de seções de choque.

9.3 Cálculo numérico das eficiências e energia interna

Para a realização dos cálculos numéricos, à semelhança dos Capítulos anteriores, escrevemos um código computacional para execução no *software* livre *Scilab* 5.4.1. O valor de truncamento das séries infinitas é $N = \max(N_{\text{Mie}}, |m_1|x) + \sqrt{101+x}$, onde $N_{\text{Mie}} = x + 4,05x^{1/3} + 2$ [33]. Como material dispersivo para o cilindro magneto-óptico, usamos a folha de grafeno epitaxialmente crescida em carbetto de silício (SiC). Diferentemente dos Capítulos 7 e 8, em que consideramos um meio efetivo isotrópico ($\mathbf{B} = \mathbf{0}$), a presença de um campo magnético externo na direção axial do cilindro ($\mathbf{B} = B\hat{\mathbf{z}}$) é aqui considerada, tornando o meio material girotrópico.

9.3.1 Grafeno crescido em carbetto de silício

De acordo com a Ref. [198], a condutividade 2D do grafeno-SiC, na presença de um campo magnético estático, é bem descrita por um modelo do tipo

Figura 9.2 – Permissividade elétrica efetiva $\epsilon_B = \epsilon_1(1 - \beta^2)$ de um cilindro magneto-óptico homogêneo, de raio $a = 1 \mu\text{m}$, consistindo de uma folha de grafeno crescida epitaxialmente em SiC, cuja condutividade bidimensional é dada na Eq. (9.28), em função da frequência $f = \omega/2\pi$ para alguns valores de amplitude de campo B ao longo do eixo do cilindro. (a) Parte real de ϵ_B/ϵ_0 . Há mudança de sinal para $f_0 \approx 1,6$ THz. O *inset* mostra os valores de frequência em que $\text{Re}(\epsilon_B) = -\epsilon_0$ (ressonância “dipolar”). (b) Parte imaginária de ϵ_B/ϵ_0 .

Drude-Lorentz acrescido de uma condutividade de fundo σ_b :

$$\sigma_{\pm}^{2D}(\omega, B) = \frac{2\mathcal{D}}{\pi} \left[\frac{i}{\omega \mp \omega_c(B) + i\Gamma - \omega_0^2/\omega} \right] + \sigma_b, \quad (9.28)$$

onde ω_0 é a frequência de plasma e $\omega_c(B) \propto B$ é a *frequência de ciclotron* dos elétrons na superfície da folha de grafeno. Uma vez mais, usamos os parâmetros experimentais da Ref. [198]: $\hbar\omega_0 = 6,5$ meV ($f_0 \approx 1,6$ THz), $\hbar\omega_c = 2,1B$ meV/T, $a = 1$ μm , $\hbar\mathcal{D}/\sigma_0 = 0,52$ eV, $\hbar\Gamma = 5,5$ meV, $\sigma_0 = e^2/4\hbar$. É importante mencionarmos que esse modelo foi construído experimentalmente na *geometria de Faraday* (ambos campo magnético e radiação incidente são normais à superfície da amostra de grafeno-SiC) [198]. Nossos cálculos numéricos, portanto, embora se utilizem de parâmetros experimentais *realistas*, devem ser analisados do ponto de vista da *teoria de meios efetivos*, onde ignoramos a geometria experimental (aqui, $\mathbf{B}$ não é ortogonal à superfície do grafeno e sim paralelo, Fig. 9.1) e consideramos o meio grafeno-SiC como um *bulk* (metamaterial compósito).

A partir de $\sigma_{\pm}^{2D}$, calculamos os parâmetros volumétricos do material que descrevem a permissividade diádica $\overleftrightarrow{\epsilon}_1$ [Eq. (9.6)] para um cilindro de grafeno-SiC de raio a :

$$\epsilon_1(\omega, B) = \epsilon_0 + i \frac{\sigma_{xx}^{2D}(\omega, B)}{\omega a}, \quad (9.29)$$

$$\gamma_1(\omega, B) = \frac{\sigma_{xy}^{2D}(\omega, B)}{\omega a}, \quad (9.30)$$

onde definimos [198, 201] as condutividades 2D

$$\sigma_{xx}^{2D}(\omega, B) = \frac{\sigma_+^{2D}(\omega, B) + \sigma_-^{2D}(\omega, B)}{2}, \quad (9.31)$$

$$\sigma_{xy}^{2D}(\omega, B) = \frac{\sigma_+^{2D}(\omega, B) - \sigma_-^{2D}(\omega, B)}{2i}, \quad (9.32)$$

de forma que

$$\overleftrightarrow{\epsilon}_1 = \epsilon_0 \overleftrightarrow{I} + i \frac{\overleftrightarrow{\sigma}_{2D}}{\omega a}, \quad (9.33)$$

é a versão tensorial da Eq. (7.45) do Capítulo 7, onde $\overleftrightarrow{I}$ é o tensor unitário.

Como discutimos na Seção 3.3.1 do Capítulo 3, o cálculo dos coeficientes de energia $[\epsilon_1^{(\text{eff})}, \mu_1^{(\text{eff})}, \gamma_1^{(\text{eff})}]$ não é trivial na presença de absorção [86, 87, 133]. Dessa

forma, para o caso mais geral de altos valores de absorção, as derivadas parciais da Eq. (9.5) devem ser modificadas para levarem em conta as partes imaginárias dos parâmetros dispersivos. De fato, note das Figs. 9.2(a) e 9.2(b) que, para $B = 0T$, $\gamma_1 = 0$ e não podemos considerar a aproximação de fraca absorção, visto que não é satisfeita a relação $\varepsilon'_1 \gg \varepsilon''_1$. Por outro lado, para $B \neq 0$, verificamos que $\gamma'_1 \gg \gamma''_1$ não é satisfeita no intervalo de frequência considerado. Disso concluímos que, para ambos os parâmetros materiais, o modelo clássico para meios dispersivos de fraca absorção não é válido aqui: $\varepsilon_1^{(\text{eff})} \neq \partial(\omega\varepsilon'_1)/\partial\omega$ e $\gamma_1^{(\text{eff})} \neq \partial(\omega\gamma'_1)/\partial\omega$. Em vista dessas considerações, e usando o fato de que o modelo dispersivo de $\varepsilon_1(\omega)$ – na ausência de campo externo ($\mathbf{B} = \mathbf{0}$) e de condutividade de fundo ($\sigma_b = 0$) – é um modelo de Drude-Lorentz clássico, aplicamos a generalização proposta por Loudon [86], usada no Capítulo 7, para calcular $\varepsilon_1^{(\text{eff})}$ – Eq. (7.46). De modo similar, se a abordagem de Loudon vale para $\varepsilon_1^{(\text{eff})}$ quando $B \neq 0$, ela deve valer para $\gamma_1^{(\text{eff})}$, que possui expressão analítica análoga. Assim, definimos os coeficientes de energia:

$$\varepsilon_1^{(\text{eff})}(\omega, B) = \varepsilon'_1(\omega, B) + \frac{2\omega}{\Gamma} \varepsilon''_1(\omega, B) , \quad (9.34)$$

$$\gamma_1^{(\text{eff})}(\omega, B) = \gamma'_1(\omega, B) + \frac{2\omega}{\Gamma} \gamma''_1(\omega, B) . \quad (9.35)$$

Evidentemente, nossa definição não é rigorosa e usa um resultado válido para *meios isotrópicos* [86, 87], isto é, para $\mathbf{B} = \mathbf{0}$. Todavia, ela é consistente e fornece um valor *positivo definido* de energia eletromagnética, generalizando o resultado de Loudon [86]. Em particular, essas grandezas são independentes do sentido do campo $\mathbf{B}||\hat{\mathbf{z}}$: $\varepsilon_1^{(\text{eff})}(\omega, -|B|) = \varepsilon_1^{(\text{eff})}(\omega, |B|)$ e $\gamma_1^{(\text{eff})}(\omega, -|B|) = \gamma_1^{(\text{eff})}(\omega, |B|)$.

9.3.2 Influência do campo magnético externo

Apresentamos aqui o cálculo das eficiências totais para o cilindro homogêneo constituído de um meio efetivo de grafeno-SiC. Nas Figs. 9.3(a) e 9.3(b), plotamos, respectivamente, as eficiências de espalhamento (Q_{sca}) e de extinção (Q_{ext}) em função da frequência e do campo magnético aplicado. Uma vez que nosso sistema é limitado pelos parâmetros experimentais em teoria de *meios efetivos* [198], a análise ficou restrita ao limite de Rayleigh, de forma que $ka \ll 1$, ou seja, $Q_{\text{sca}} \ll Q_{\text{ext}}$ [1]. O que temos essencialmente é uma ressonância de dipolo elétrico (ou de plásmons localizados) em função do campo externo B . Como se percebe, à medida que

Figura 9.3 – Eficiências para um cilindro magneto-óptico constituído de uma folha de grafeno crescida epitaxialmente em carbeto de silício (SiC) [Eq. (9.28)] em função da frequência $f = \omega/2\pi$ e do campo $\mathbf{B} = B\hat{\mathbf{z}}$ aplicado. A variação de parâmetro de tamanho no intervalo de frequência é $5 \times 10^{-3} < ka < 0,4$ (limite de Rayleigh para baixas frequências). (a) Eficiência de espalhamento Q_{sca} . (b) Eficiência de extinção Q_{ext} . O pico para $B = 0$, cortado pela linha vertical, divide o espectro em duas regiões: ressonâncias dos coeficientes a_1 à esquerda e a_{-1} à direita.

aumentamos o módulo do campo magnético, a ressonância de dipolo ($\varepsilon'_B \approx -\varepsilon_0$) se divide em duas. O pico de ressonância que se desloca para frequências menores é “amortecido” pelos parâmetros do sistema, uma vez que ele se manifesta de maneira mais clara no espectro de extinção [Fig. 9.3(b)] e não no de espalhamento [Fig. 9.3(a)] na região de 5 THz. Esse picos de ressonância ocorrem, aproximadamente, para $\varepsilon'_B \approx -\varepsilon_0$ [compare com o *inset* da Fig. 9.2(a)] e podem ser interpretados como as ressonâncias localizadas de plásmons-poláritons de superfície.

O segundo pico de ressonância, que está presente tanto nos espectros de espalhamento quanto de extinção, ocorre para $\varepsilon'_B \approx 0$ e desloca-se para frequências maiores à medida que a amplitude do campo magnético aumenta. Essa ressonância pode ser identificada com a excitação de *plásmons volumétricos*. Como discutimos nos Capítulos 7 e 8, a excitação de plásmons volumétricos para $\varepsilon'_1 \geq 0$ em cilindros sob incidência normal só é possível no modo TM, isto é, $\mathbf{E}_i^{(I)} \parallel \hat{\mathbf{z}}$. A configuração de campo incidente de nosso sistema, no entanto, impõe $\mathbf{E}_i^{(II)} \perp \hat{\mathbf{z}}$, excitando os plásmons de superfície para $\varepsilon'_B \approx -\varepsilon_0$. Graças à anisotropia do sistema (birrefringência), que rotaciona o campo elétrico incidente (polarização) no meio efetivo, há o surgimento de uma componente de campo elétrico não nula na direção $\hat{\mathbf{z}}$. É precisamente essa componente que está excitando os plásmons do *bulk*.

Note que a alternância entre os dois tipos de ressonância (plásmons de superfície e volumétricos) devida à aplicação do campo magnético uniforme leva a um resultado similar ao *efeito Hall* [92], embora com origem física completamente distinta. Aqui, os plásmons-poláritons de superfície agiriam como “correntes elétricas” estacionárias na superfície condutora do grafeno-SiC, de modo que a aplicação do campo magnético $\mathbf{B}$ induziria a formação de um *gap* de energia na direção radial do cilindro, excitando os plásmons volumétricos. Do ponto de vista analítico, a quebra em dois tipos de excitações é explicada pelo fato de, para $B \neq 0$, $a_1 \neq a_{-1}$. Verificamos que os plásmons de superfície têm ressonância em $|a_1|^2$, enquanto os volumétricos têm ressonância tanto em $|a_{-1}|^2$ quanto em $|a_0|^2$, os quais coincidem em frequência – com $|a_0| \ll |a_{-1}|$ para materiais não magnéticos no limite de Rayleigh. Em particular, a Fig. 9.3(a) mostra que a influência de σ_b no formato de linha $|a_{-1}|^2$ é pequena, uma vez que ela é praticamente simétrica (Lorentziana). Como demonstramos no Capítulo 8, para $B = 0$ T, a ressonância de dipolo exibe

um perfil assimétrico do tipo Fano, que é simetrizado apenas para $\sigma_b = 0$.

Figura 9.4 – Espalhamento eletromagnético em um meio bidimensional, composto por cilindros de grafeno-SiC [Eq. (9.28)] de raios $a = 1 \mu\text{m}$, em função da frequência $f = \omega/2\pi$ e do campo magnético aplicado $\mathbf{B} = B\hat{\mathbf{z}}$. (a) Energia W/W_0 no interior de um único centro espalhador. (b) Velocidade de transporte de energia no meio desordenado com fração volumétrica de centros espalhadores $f_{\text{pack}} = 1/3$.

O gráfico que relaciona a energia eletromagnética armazenada no cilindro de

grafeno-SiC e o campo magnético aplicado encontra-se na Fig. 9.4(a). Os perfis apresentados para cada valor de campo são bastante parecidos com os perfis do espectro de extinção, Fig. 9.3(b). Essa semelhança entre os perfis é explicada pela Eq. (9.27) e por estarmos no limite de Rayleigh, onde a absorção é dominante no espalhamento. Dessa forma, não verificamos aumento algum de intensidade de campo interno fora da ressonância de espalhamento.

Na Fig. 9.4(b), aplicamos a energia interna no cálculo da velocidade de transporte de energia em um meio desordenado bidimensional constituído de cilindros idênticos de grafeno-SiC paralelos. Aqui, podemos ver claramente como a presença do campo magnético externo “quebra” o mínimo de v_E ($f \approx 7$ THz para $B = 0$ T), criando dois mínimos locais de velocidade, correspondentes às ressonâncias de plásmom de superfície e volumétrico. Note que não há grande variação em frequência do valor mínimo de velocidade de transporte ($v_E/c \approx 0,16$) em função do campo B ; ele apenas se desloca de 8 a 13 THz no intervalo de 5 a 20 T. Em outras palavras: o campo magnético externo nos permite sintonizar o mínimo de velocidade de transporte de energia no meio desordenado, deslocando-o para altas frequências à medida que a intensidade de campo magnético aumenta.

Em particular, além do cálculo da velocidade de transporte, podemos aplicar a energia interna em um único centro espalhador no cálculo da *constante de Verdet* ($\mathcal{V}_{\text{eff}}$) efetiva de um meio desordenado⁴⁷. Como é demonstrado na Ref. [234], a razão das constantes de Verdet do meio desordenado em relação à de um único centro espalhador ($\mathcal{V}$) é proporcional à energia armazenada no centro espalhador: $\mathcal{V}_{\text{eff}}/\mathcal{V} \approx f_{\text{pack}}W/W_0$. Dessa forma, conhecido $\mathcal{V}$, podemos obter, a partir da Fig. 9.4(a), a constante $\mathcal{V}_{\text{eff}}$. Nosso sistema, contudo, não se encontra na geometria de Faraday, qual seja, campo magnético na mesma direção da onda eletromagnética incidente; mas sim na geometria de Cotton-Mouton [31] (campo magnético e onda incidente são ortogonais). Ainda assim, mesmo estando em uma configuração diferente, podemos

⁴⁷ Em 1845, Faraday descobriu que quando uma luz linearmente polarizada atravessa um meio transparente submetido a um campo magnético uniforme (na mesma direção de incidência da luz), seu plano de polarização é rotacionado [31]. Esse ângulo de rotação é expresso pela fórmula $\Theta_F = \mathcal{V}B\ell$, onde B é a amplitude do campo magnético aplicado, ℓ é a espessura do material e $\mathcal{V}$ é a *constante de Verdet*, que depende do meio e da frequência ω da radiação – via fórmula de Becquerel, por exemplo: $\mathcal{V} \propto \omega \partial(m')/\partial\omega$, onde $m' = \text{Re}(m)$ é o índice de refração para $B = 0$ [232, 233].

estudar efeitos de *birrefringência*, como o *ângulo de desvio*⁴⁸ entre as direções de máximo espalhamento e de incidência em função do campo magnético [201].

9.4 Conclusões

Finalizando nossos estudos em geometria cilíndrica, apresentamos a solução de espalhamento para um cilindro girotrópico (magneto-óptico) homogêneo sob incidência de ondas planas no modo TE. Determinamos analiticamente os coeficientes de Lorenz-Mie para os campos eletromagnéticos espalhados (a partir dos quais calculamos as seções de choque ópticas) e internos. Uma expressão analítica para a energia eletromagnética armazenada no interior de um cilindro girotrópico foi calculada. À semelhança do que fizemos nos Capítulos 3, 6 e 7, obtivemos o vínculo entre a energia interna e a seção de choque de absorção em meios dispersivos. Complementando o estudo iniciado no Capítulo 7, abordamos novamente um meio efetivo consistindo de uma folha de grafeno epitaxialmente crescida em carbetto de silício (SiC), mas agora na presença de um campo magnético axial. Mostramos que o efeito introduzido pelo campo magnético uniforme, nesta geometria, atua como um análogo do efeito Hall, gerando, a partir de plásmons de superfície, excitações de plásmons volumétricos. A dependência da ressonância de plásmons volumétricos do campo magnético aplicado torna possível a sintonização do mínimo de velocidade de transporte de energia no meio desordenado bidimensional.

⁴⁸ De acordo com a Ref. [201], uma boa aproximação para este ângulo de rotação da direção de máximo espalhamento (no limite de cilindros finos não magnéticos) é $\varphi_{\text{rot}} = \tan^{-1}[-\text{Im}(a_1 a_{-1}^*)/\text{Re}(a_1 a_{-1}^*)]/2$, de maneira que $\varphi_{\text{rot}} = 0$ ou 180° se $B = 0$.

Centros espalhadores de formatos arbitrários contendo inclusões

Em conjunto com a teoria de espalhamento simples, expressa nas seções de choque e momentos de multipolo (coeficientes de Lorenz-Mie), o assunto em comum à maioria dos Capítulos precedentes é o cálculo da energia eletromagnética no interior de centros espalhadores [106]. Em razão de nossa escolha em tratar analiticamente o espalhamento eletromagnético, abordamos até aqui apenas duas geometrias, a saber, centros espalhadores esféricos [83, 108, 115, 160] e cilíndricos [107, 184]. O presente Capítulo visa responder qual seria o tratamento no caso de uma partícula espalhadora com formato arbitrário, podendo ser constituída de várias camadas [155] ou inclusões em seu interior [235]. Nosso ponto de partida é, uma vez mais, o campo eletromagnético interno aos centros espalhadores. Para facilitar a abordagem, consideramos apenas os meios materiais *isotrópicos*, de forma que não há acoplamento das propriedades elétricas e magnéticas na definição da densidade de energia, como nos sistemas explorados nos Capítulos 6 e 9. Supomos também que os campos dentro de cada uma das inclusões é conhecido, o que, em geral, não é verdade (*problemas inversos*). Todavia, usamos esse ponto de partida para calcularmos as intensidades dos campos internos e, a partir delas, auferirmos grandezas mensuráveis do espalhamento eletromagnético.

10.1 Energia interna

Considere um centro espalhador de volume V contendo $(N - 1)$ inclusões de formatos arbitrários ($N \geq 1$ é um número inteiro), como esquematizado na Fig. 10.1.

Cada uma das inclusões tem volume muito bem definido e delimitado no espaço, sendo representadas por $V_1, V_2, \dots, V_{N-1}$, de forma que o volume total do centro espalhador é $V = \sum_{q=1}^N V_q$, com V_N sendo o volume da partícula “hospedeira” (isto é, o volume do centro espalhador subtraídas as inclusões). Por simplicidade, supomos que os N materiais constituindo o centro espalhador são homogêneos, lineares e isotrópicos, com permissividade elétrica $\varepsilon_q = \varepsilon'_q + i\varepsilon''_q$ e permeabilidade magnética $\mu_q = \mu'_q + i\mu''_q$ associadas a cada volume V_q . O centro espalhador é irradiado por uma onda eletromagnética plana com amplitude elétrica E_0 e dependência temporal $e^{-i\omega t}$, onde ω é a frequência incidente e $H_0 = \sqrt{\varepsilon_0/\mu_0}E_0$ é amplitude magnética. O meio circundante (ε_0, μ_0) é qualquer meio não dispersivo e não absoritivo (o vácuo, por exemplo), com velocidade de fase $c = 1/\sqrt{\varepsilon_0\mu_0}$. Para um campo eletromagnético $(\mathbf{E}_q, \mathbf{H}_q)$, confinado no interior de inclusão passiva (ε_q, μ_q) com volume V_q , a média temporal da densidade de energia eletromagnética [107, 108, 115, 160, 184] é

$$\langle u_q \rangle_t(\mathbf{r}) = \varepsilon_q^{(\text{eff})} |\mathbf{E}_q(\mathbf{r})|^2 + \mu_q^{(\text{eff})} |\mathbf{H}_q(\mathbf{r})|^2 \quad (10.1)$$

onde $[\varepsilon_q^{(\text{eff})}, \mu_q^{(\text{eff})}]$ são os coeficientes de energia associados aos meios materiais $q = \{1, 2, \dots, N\}$ [86, 93] e a média temporal da energia eletromagnética é

$$W_q = \frac{1}{4} \int_{V_q} d^3r \langle u_q \rangle_t(\mathbf{r}) . \quad (10.2)$$

Se o meio (ε_q, μ_q) é fracamente absoritivo ($|\varepsilon''_q| \ll \varepsilon'_q$, $|\mu''_q| \ll \mu'_q$), então $\varepsilon_q^{(\text{eff})} = \partial(\omega\varepsilon'_q)/\partial\omega > 0$ e $\mu_q^{(\text{eff})} = \partial(\omega\mu'_q)/\partial\omega > 0$ [93]. Ainda, se a região V_q tem as mesmas propriedades ópticas do meio circundante (ε_0, μ_0) , temos $W_{0q} = (\varepsilon_0|E_0|^2 + \mu_0|H_0|^2)V_q/4$, de forma que [106]:

$$W_{0q} = \frac{\varepsilon_0}{2}|E_0|^2V_q . \quad (10.3)$$

Das Eqs. (10.2) e (10.3), obtemos que a energia eletromagnética normalizada W_q/W_{0q} é uma média espacial ($\langle \dots \rangle_{V_q} = V_q^{-1} \int_{V_q} d^3r \dots$) sobre uma média temporal das intensidades dos campos. Definindo a média volumétrica das intensidades $\langle |\mathbf{F}_q/F_0|^2 \rangle_{V_q} = V_q^{-1} \int_{V_q} d^3r |\mathbf{F}_q/F_0|^2$, onde $\mathbf{F}_q/F_0$ pode ser tanto $\mathbf{E}_q/E_0$ quanto $\mathbf{H}_q/H_0$, segue que [83]

$$\frac{W_q}{W_{0q}} = \frac{1}{2} \left[\frac{\varepsilon_q^{(\text{eff})}}{\varepsilon_0} \frac{\langle |\mathbf{E}_q|^2 \rangle_{V_q}}{|E_0|^2} + \frac{\mu_q^{(\text{eff})}}{\mu_0} \frac{\langle |\mathbf{H}_q|^2 \rangle_{V_q}}{|H_0|^2} \right] , \quad (10.4)$$

Figura 10.1 – Centro espalhador com formato arbitrário e $(N - 1)$ inclusões arbitrárias irradiado por uma onda plana. O meio externo é (ϵ_0, μ_0) e cada inclusão tem volume V_q e propriedades ópticas (ϵ_q, μ_q) , com $q = \{1, \dots, N - 1\}$, sendo V_N o volume da partícula hospedeira (ϵ_N, μ_N) .

que é o fator de aumento de energia associado à inclusão (ϵ_q, μ_q) . Como a energia W_q é uma grandeza extensiva, temos que

$$\frac{W}{W_0} = \sum_{q=1}^N \frac{V_q}{V} \frac{W_q}{W_{0q}} \quad (10.5)$$

é o fator de aumento de energia do centro espalhador como um todo, onde $W_0 = \sum_{q=1}^N W_{0q}$. A energia interna W/W_0 é, portanto, calculada pela média aritmética ponderada das contribuições elétricas e magnéticas na Eq. (10.5). Cada inclusão (ϵ_q, μ_q) contribui na soma com seu fator de aumento de energia W_q/W_{0q} ponderado por sua respectiva fração volumétrica V_q/V .

10.2 Velocidade de transporte de energia

Partindo da teoria eletromagnética, a velocidade de transporte de energia v_E é definida como a razão entre as médias temporais do vetor de Poynting e da densidade de energia: $v_E = |\langle \mathbf{S} \rangle_t| / \langle u \rangle_t$. Considere um caso particular com $(N - 1)$ inclusões

idênticas de volume V_1 e mesmas propriedades ópticas (ε_1, μ_1) . Suponha ainda que o volume da partícula hospedeira é muito maior que o volume das inclusões individuais $[V_N \gg (N-1)V_1]$ e que a separação média entre cada inclusão é muito maior que suas dimensões típicas. Dessas considerações, a média temporal do vetor de Poynting dentro de V é *aproximadamente* a média temporal do vetor de Poynting dentro de V_N . Se (ε_N, μ_N) tem as mesmas propriedades ópticas que o meio circundante (ε_0, μ_0) , obtemos $|\langle \mathbf{S} \rangle_t| \approx E_0 H_0 / 2 = c \varepsilon_0 |E_0|^2 / 2 = c W_0 / V$. Da Eq. (10.5), note que, para $(N-1)$ inclusões com volumes e propriedades ópticas idênticas à inclusão (ε_1, μ_1) , podemos escrever a energia total

$$\frac{W}{W_0} = (N-1) \frac{V_1}{V} \frac{W_1}{W_{01}} + \frac{V_N}{V} .$$

Usando a aproximação $\langle u \rangle_t \approx W/V$ e definindo a fração volumétrica de centros espalhadores $f_{\text{pack}} \equiv (N-1)V_1/V$ (Seção 2.4.3) e, por conseguinte, $V_N/V = 1 - f_{\text{pack}}$, obtemos

$$v_E = \frac{|\langle \mathbf{S} \rangle_t|}{\langle u \rangle_t} \approx \frac{c}{1 + f_{\text{pack}}(W_1/W_{01} - 1)} , \quad (10.6)$$

que é o mesmo resultado obtido na Ref. [89] usando a equação de Bethe-Salpeter na aproximação de fraca desordem. Em outras palavras, a partir de considerações simples, determinamos a velocidade de transporte de energia em um meio desordenado com baixa densidade de centros espalhadores idênticos (inclusões) de formatos arbitrários.

10.3 Seção de choque de absorção

Considere agora duas geometrias particulares, tratadas exhaustivamente nos Capítulos anteriores: esferas e cilindros revestidos ($N = 2$). A eficiência de absorção Q_{abs} (que, vale a pena lembrarmos, é a seção de choque de absorção σ_{abs} em unidades da seção de choque geométrica σ_g) pode ser escrita em termos das intensidades dos campos internos, como vimos, por exemplo, nos Capítulos 3 [Eq. (3.31)] e 7 [Eq. (7.34)]. Para esferas e cilindros concêntricos, ambos com raio externo b , derivamos: $Q_{\text{abs}} = \xi k b \sum_{q=1}^2 \langle (\varepsilon_q''/\varepsilon_0) |\mathbf{E}_q/E_0|^2 + (\mu_q''/\mu_0) |\mathbf{H}_q/H_0|^2 \rangle_{V_q} (V_q/V)$, onde $k b$ é o parâmetro de tamanho, com $k = \omega/c$, e $\xi = 4/3$ para esferas e $\xi = \pi/2$ para

cilindros [107, 108]. Embora não seja óbvio, note que

$$\sigma_g \xi k b = kV , \quad (10.7)$$

onde V pode ser tanto o volume de uma esfera ou de um cilindro, ambos com raio b . Essa observação aparentemente simples justifica a eliminação da dependência da energia em relação a kb e σ_g (dependência da forma) e nos permite escrever σ_{abs} para uma partícula revestida com um formato arbitrário. Generalizando esse resultado para uma partícula arbitrária com $(N - 1)$ inclusões, obtemos finalmente a seção de choque de absorção

$$\sigma_{\text{abs}} = \sum_{q=1}^N kV_q \left[\frac{\varepsilon_q''}{\varepsilon_0} \frac{\langle |\mathbf{E}_q|^2 \rangle_{V_q}}{|E_0|^2} + \frac{\mu_q''}{\mu_0} \frac{\langle |\mathbf{H}_q|^2 \rangle_{V_q}}{|H_0|^2} \right] , \quad (10.8)$$

a qual está de acordo com a seção de choque calculada no Apêndice C.2 [Eq. (C.39)].

Claramente, as Eqs. (10.5) e (10.8) são similares e descrevem propriedades de propagação e absorção do espalhamento eletromagnético, respectivamente. A relação entre W e σ_{abs} é desvelada quando consideramos um meio fracamente absoritivo e não dispersivo, de forma que $[\varepsilon_q^{(\text{eff})} = \varepsilon_q', \mu_q^{(\text{eff})} = \mu_q']$ na Eq. (10.5). Para simplificar nossa discussão, vamos definir uma “energia” complexa $\widetilde{W}/W_0$ substituindo $(\varepsilon_q^{(\text{eff})}, \mu_q^{(\text{eff})})$ por $(\varepsilon_q = \varepsilon_q' + \imath \varepsilon_q'', \mu_q = \mu_q' + \imath \mu_q'')$ na Eq. (10.5). Isto leva a

$$\frac{\widetilde{W}}{W_0} = \frac{W}{W_0} + \imath \frac{\sigma_{\text{abs}}}{2kV} , \quad (10.9)$$

onde a parte real é o fator de aumento de energia e a parte imaginária depende da seção de choque de absorção. O denominador $2kV$ na Eq. (10.9) pode ser interpretado como uma seção de choque geométrica para um centro espalhador de formato arbitrário. Para espalhadores esféricos e cilíndricos, $2kV$ leva em conta tanto a seção de choque geométrica quanto o parâmetro de tamanho (propriedades geométricas).

10.4 Tempo de absorção

Da teoria de espalhamento, o tempo de residência τ_d é definido como o tempo que as ondas eletromagnéticas são atrasadas devido às ressonâncias dentro

do centro espalhador [84]. Usando nossa notação e a definição da Ref. [84], $\tau_d = V(W/W_0)/(\sigma_{\text{sca}}c)$. Definindo a grandeza complexa $\tilde{\tau}_d = V(\tilde{W}/W_0)/(\sigma_{\text{sca}}c)$ no domínio da frequência, obtemos da Eq. (10.9):

$$\tilde{\tau}_d(\omega) = \tau_d(\omega) + i\tau_{\text{abs}}(\omega), \quad (10.10)$$

onde $\tau_{\text{abs}} \equiv \sigma_{\text{abs}}/(2\omega\sigma_{\text{sca}})$ é um tempo de absorção: $e^{i\omega\tilde{\tau}_d} = e^{i\omega\tau_d}e^{-\omega\tau_{\text{abs}}}$. Como o albedo é $\tilde{a} = \sigma_{\text{sca}}/\sigma_{\text{ext}}$, temos

$$\tau_{\text{abs}}(\omega) = \frac{1 - \tilde{a}(\omega)}{2\omega\tilde{a}(\omega)}. \quad (10.11)$$

Para espalhadores fracamente absorptivos, pode-se escrever $W/W_0 \approx m'\sigma_{\text{abs}}/(2km''V)$, onde $m = m' + im''$ é o índice de refração efetivo da partícula [107]. Portanto,

$$\tau_d(\omega) \approx \lim_{m'' \rightarrow 0} \frac{1 - \tilde{a}(\omega)}{2\omega\tilde{a}(\omega)} \frac{m'}{m''} \approx \lim_{m'' \rightarrow 0} \frac{1 - \tilde{a}(\omega)}{2\omega} \frac{m'}{m''}, \quad (10.12)$$

que é um resultado bem conhecido (onde consideramos $\tilde{a}(\omega) \approx 1$ no denominador) e pode ser provado rigorosamente para ondas escalares [84]. Então, para fraca absorção, usando a Eq. (10.11),

$$\tau_d = \lim_{m'' \rightarrow 0} \left(\frac{m'}{m''} \right) \tau_{\text{abs}}. \quad (10.13)$$

Lembrando que $m = c/v_p + ic/(2\omega\ell_{\text{ext}})$, onde ℓ_{ext} é o livre caminho médio de extinção e v_p é a velocidade de fase [84], tem-se $m'/m'' = 2\omega\ell_{\text{ext}}/v_p$. Identificando o tempo de defasagem τ_ϕ com τ_{abs} , a razão m'/m'' pode ser associada com a taxa adimensional de defasagem γ [236]: $m'/m'' \equiv \gamma = 2\pi/(\mathcal{N}\tau_\phi\Delta)$, onde Δ é o intervalo médio de frequência dos modos da cavidade e $\mathcal{N}$ é o número do modo [236]. Portanto, dentro de nossa abordagem, obtemos uma aproximação para a taxa de defasagem $\gamma = \tau_d/\tau_\phi$ no regime de fraca absorção. Em particular, podemos definir o livre caminho médio de extinção por

$$\ell_{\text{ext}} = \frac{v_p}{2\omega} \frac{\tau_d}{\tau_{\text{abs}}}. \quad (10.14)$$

10.5 Conclusões

Neste Capítulo, sintetizamos alguns de nossos principais resultados apresentados em Capítulos anteriores em um formalismo geral, independente da

forma do centro espalhador e do número e formato de suas inclusões. Mostramos que é possível estimar a velocidade de transporte de energia em um meio desordenado (na aproximação de fraca desordem) usando tão-somente a definição de energia interna e sua relação com o vetor de Poynting. A partir das geometrias esférica e cilíndrica, inferimos uma expressão geral para a seção de choque de absorção em partículas com inclusões arbitrárias. O vínculo da seção de choque com a energia interna e o tempo de residência nos induz a definir um tempo de absorção, que se mostra de acordo com a teoria de espalhamento múltiplo [84].

Conclusão geral e perspectivas

O tratamento rigoroso das equações de Maxwell macroscópicas em teoria de espalhamento nos permitiu abordar duas geometrias de bastante interesse científico e tecnológico: os centros espalhadores esféricos e cilíndricos. Enfocamos ao longo deste estudo o chamado *espalhamento simples*, cujo paradigma é a *teoria de Lorenz-Mie*. Essa teoria analítica, construída a partir de um único centro espalhador, pode ser aplicada ao estudo de sistemas com baixa densidade de partículas em *espalhamento múltiplo*. A condição que impomos ao sistema, neste caso, é a de que as partículas do meio interajam apenas e tão somente com o campo eletromagnético incidente [4].

Nas geometrias esférica e cilíndrica, demos destaque especial aos centros espalhadores revestidos por uma camada homogênea concêntrica [83, 108, 184]. As propriedades de espalhamento de tais sistemas são, comumente, analisadas a partir de grandezas auferidas no *campo distante* – via seções de choque totais e diferenciais. Tal abordagem trata o *campo próximo* de maneira indireta, vinculando as ressonâncias de espalhamento no campo distante aos aumentos de intensidade no interior e nas vizinhanças do centro espalhador. No entanto, como enfatizamos ao longo de nosso estudo, o acoplamento entre as ressonâncias internas aos centros espalhadores e as ressonâncias de espalhamento pode não se manifestar na mesma frequência de excitação, dando origem aos *estados escuros* [83]. Esse aumento de intensidade do campo próximo que não corresponde a uma ressonância no espectro de extinção é explicado em termos das ressonâncias de Fano em partículas estratificadas, como no caso das esferas ou cilindros concêntricos [67, 83].

Para o entendimento de como os modos de superfície no campo próximo

acoplam-se às ressonâncias nas seções de choque totais, mostramos que é relevante o cálculo de funcionais dos campos eletromagnéticos internos aos centros espalhadores, tais como a energia eletromagnética armazenada ou a intensidade de campo interno. De fato, mostramos que é possível obter propriedades importantes das ressonâncias de espalhamento fazendo o oposto do que é usual: a partir das ressonâncias na energia interna (campo próximo), auferimos informações acerca das ressonâncias de espalhamento (campo distante) [108].

Em meios dispersivos, a energia eletromagnética interna ao centro espalhador é uma grandeza física fundamental que encontra muitas aplicações em fotônica, plasmônica e metamateriais, justificando, assim, o interesse em seu estudo. Essa grandeza está diretamente relacionada, por exemplo, ao tempo de residência das ondas eletromagnéticas em um centro espalhador e ao seu fator de qualidade, ambas grandezas mensuráveis relevantes para aplicações em lasers ou cavidades ressonantes em geral [85], e à constante de Verdet em meios Faraday ativos [234]. Em espalhamento múltiplo, a energia interna está associada à velocidade com que a energia é transportada no meio desordenado, fornecendo estimativas sobre efeitos de localização da onda eletromagnética [89]. Ademais, o cálculo da energia interna pode dar informações diretas atinentes aos modos de superfície da partícula [108]. No caso de partículas estratificadas, por exemplo, a interferência entre modos eletromagnéticos internos, que aparecem explicitamente no cálculo da energia, explica o surgimento das ressonância de Fano não convencionais e dos *estados escuros* em nanoplasmônica [40, 83, 187].

Discutimos aqui os efeitos e as diferenças entre as ressonâncias de Fano convencionais, que aparecem para direções específicas de espalhamento, e as não convencionais, que se manifestam nas seções de choque totais e são identificadas apenas na região de campo próximo [83, 149]. Em sistemas plasmônicos, a modulação das ressonâncias de Fano pode favorecer, no caso da absorção, a transparência induzida por plásmos, e ser usada, no espalhamento, na técnica de cancelamento do espalhamento eletromagnético em todas as direções [123, 124, 156]. De fato, alguns dos avanços mais recentes na área de plasmônica estão relacionados à modulação das ressonâncias de Fano em nanoestruturas [56, 134].

Embora o estudo que aqui desenvolvemos tenha se focado apenas nas

geometrias esférica e cilíndrica sob incidência de ondas planas, ele abre perspectivas de estudos para geometrias mais gerais ou intermediárias [28] e diferentes esquemas de irradiação [40]. Em espalhamento simples, esferas e cilindros são os paradigmas para o espalhamento eletromagnético em três e duas dimensões, respectivamente [1]. Além disso, sendo ambos sistemas de referência para estudos em plasmônica, *meios efetivos* podem ser construídos a partir dessas duas geometrias, tanto no intuito de amplificar quanto de engendrar novas propriedades de espalhamento e perfis de campo próximo [55]. Duas aplicações bastante simples dessa ideia, que fornecemos para a geometria cilíndrica, baseiam-se no cálculo da velocidade de transporte de energia em meios desordenados bidimensionais [107, 205] e no uso da *absorção omnidirecional* para a criação de absorvedores perfeitos [206, 213]. Tais propriedades podem ainda ser modificadas em função da dispersão do centro espalhador, como mostramos no caso da esfera quiral [160] e do cilindro magneto-óptico, e também da estrutura de revestimento, como discutimos para esferas e cilindros isotrópicos constituídos de grafeno [184] ou metamateriais compósitos [108]. A combinação, portanto, de revestimentos plasmônicos anisotrópicos com materiais isotrópicos (ou vice-versa) [154, 187], aliados a meios opticamente ativos em diversas geometrias, abre possibilidades para o estudo de efeitos em *óptica linear* que são bastante ricos. Dentre as diversas aplicações potenciais, têm-se, por exemplo, os mantos de invisibilidade plasmônicos [186], os absorvedores perfeitos de radiação [206], dispositivos de espalhamento direcional [17, 237] e efeitos de localização em espalhamento múltiplo [110]. Essas aplicações, no entanto, são generalizações ou aplicações diretas das geometrias básicas que abordamos nesta tese – salientando-se, assim, a importância da *teoria de Lorenz-Mie* em seus aspectos mais fundamentais. Aspectos esses que nos permitiram explorar a física do espalhamento clássico em diferentes escalas de comprimento de onda e de tamanho de partícula, além de nos terem fornecido relações analíticas para o entendimento das ressonâncias de espalhamento, tanto nas regiões de campo próximo quanto distante.

Referências

- [1] C. F. Bohren e D. R. Huffman, *Absorption and Scattering of Light by Small Particles*. New York: John Wiley, 1983. [1](#), [2](#), [4](#), [5](#), [11](#), [12](#), [13](#), [14](#), [16](#), [17](#), [18](#), [20](#), [21](#), [22](#), [23](#), [27](#), [28](#), [29](#), [30](#), [31](#), [34](#), [42](#), [58](#), [61](#), [62](#), [66](#), [67](#), [69](#), [75](#), [86](#), [92](#), [105](#), [109](#), [110](#), [111](#), [124](#), [126](#), [127](#), [134](#), [135](#), [142](#), [149](#), [151](#), [159](#), [163](#), [169](#), [185](#), [211](#), [216](#), [217](#), [218](#), [220](#), [221](#), [222](#), [227](#), [229](#)
- [2] H. C. van de Hulst, *Light Scattering by Small Particles*. New York: Dover Publications, 1981. [1](#), [2](#), [3](#), [4](#), [13](#), [14](#), [16](#), [17](#), [19](#), [21](#), [22](#), [23](#), [31](#), [58](#), [93](#), [123](#), [124](#), [125](#), [126](#), [127](#), [140](#), [150](#), [218](#)
- [3] L. Tsang, J. A. Kong e K. H. Ding, *Scattering of Electromagnetic Waves: Theories and Applications*. New York: John Wiley, 2000. [1](#), [11](#), [17](#)
- [4] A. Ishimaru, *Electromagnetic Wave Propagation, Radiation, and Scattering*. New Jersey: Prentice Hall, 1991. [1](#), [17](#), [183](#), [216](#), [227](#)
- [5] S. Chandrasekhar, *Radiative Transfer*. London: Oxford University Press, 1950. [1](#)
- [6] M. Kerker, *The Scattering of Light and other Electromagnetic Radiation*. New York: Academic Press, 1969. [1](#), [15](#), [16](#), [17](#), [21](#), [31](#), [218](#), [223](#)
- [7] L. Rayleigh, “[On the light from the sky, its polarization and color](#)”, *Philos. Mag.*, vol. 41, pp. 107–120, 274–279, 1871. [1](#)
- [8] L. Rayleigh, “[On the scattering of light by small particles](#)”, *Philos. Mag.*, vol. 41, pp. 447–454, 1871. [1](#)

-
- [9] A. Ishimaru, *Wave Propagation and Scattering in Random Media. Vol 1: Single Scattering and Transport Theory*. New York: Academic Press, 1978. [1](#), [2](#), [16](#), [20](#), [22](#), [23](#), [24](#), [30](#), [228](#)
- [10] A. Schuster, *An Introduction to the Theory of Optics*. London: Edward Arnold, 1904. [1](#), [36](#)
- [11] A. Ishimaru, *Wave Propagation and Scattering in Random Media. Vol 2: Multiple Scattering, Turbulence, Rough Surfaces, and Remote Sensing*. New York: Academic Press, 1978. [1](#), [2](#)
- [12] F. J. Dyson, “[The S Matrix in Quantum Electrodynamics](#)”, *Phys. Rev.*, vol. 75, pp. 1736–1755, 1949. [2](#)
- [13] E. E. Salpeter e H. A. Bethe, “[A Relativistic Equation for Bound-State Problems](#)”, *Phys. Rev.*, vol. 84, pp. 1232–1242, 1951. [2](#)
- [14] M. C. W. van Rossum e T. M. Nieuwenhuizen, “[Multiple scattering of classical waves: microscopy, mesoscopy, and diffusion](#)”, *Rev. Mod. Phys.*, vol. 71, pp. 313–371, 1999. [2](#)
- [15] V. Gaiнд, D. Lin e K. J. Webb, “[Solution of the Bethe-Salpeter equation in a nondiffusive random medium having large scatterers](#)”, *J. Opt. Soc. Am. B*, vol. 30, pp. 2199–2205, 2013. [2](#)
- [16] P. Sheng, *Introduction to Wave Scattering, Localization, and Mesoscopic Phenomena*. Berlin: Springer, 2006. [2](#), [3](#), [8](#), [24](#), [25](#)
- [17] J. M. Geffrin, B. García-Cámara, R. Gómez-Medina, P. Albella, L. S. Froufe-Pérez, C. Eyraud, A. Litman, R. Vaillon, F. González, M. Nieto-Vesperinas, J. Sáenz e F. Moreno, “[Magnetic and electric coherence in forward- and back-scattered electromagnetic waves by a single dielectric subwavelength sphere](#)”, *Nature Comm.*, vol. 3, no. 1171, 2012. [3](#), [185](#)
- [18] M. Kerker, D.-S. Wang e C. L. Giles, “[Electromagnetic scattering by magnetic spheres](#)”, *J. Opt. Soc. Am.*, vol. 73, pp. 765–767, 1983. [3](#), [23](#), [31](#), [222](#)

-
- [19] F. A. Pinheiro, A. S. Martinez e L. C. Sampaio, “[Vanishing of energy transport and diffusion constant of electromagnetic waves in disordered magnetic media](#)”, *Phys. Rev. Lett.*, vol. 85, pp. 5563–5566, 2000. [3](#), [24](#), [31](#), [91](#), [93](#), [128](#)
- [20] T. Karpiuk, N. Cherroret, K. L. Lee, B. Grémaud, C. A. Müller e C. Miniatura, “[Coherent Forward Scattering Peak Induced by Anderson Localization](#)”, *Phys. Rev. Lett.*, vol. 109, no. 190601, 2012. [3](#)
- [21] L. V. Lorenz, “Lysbevaegelsen i og uden for en af plane Lysbolger belyst Kugle (Upon the reflection and refraction of plane light waves by a transparent sphere)”, *Det Kongelige Danske Videnskabernes Selskabs Skrifter*, vol. 6, pp. 1–62, 1890. [3](#)
- [22] G. Mie, “[Beiträge zur Optik trüber Medien speziell kolloidaler Goldlösungen \(Contributions to the optics of diffuse media, especially colloid metal solutions\)](#)”, *Ann. Phys.*, vol. 25, pp. 377–445, 1908. [3](#), [6](#)
- [23] H. Kragh, “[Ludvig Lorenz and nineteenth century optical theory: the work of a great Danish scientist](#)”, *Appl. Opt.*, vol. 30, pp. 4688–4695, 1991. [3](#)
- [24] M. I. Mishchenko e L. D. Travis, “[Gustav Mie and the evolving discipline of electromagnetic scattering by particles](#)”, *Bull. Amer. Meteor. Soc.*, vol. 89, pp. 1853–1861, 2008. [3](#)
- [25] A. Clebsch, “[Ueber die Reflexion an einer Kugelfläche \(Concerning reflection on a spherical surface\)](#)”, *Journal für Mathematik*, vol. 61, pp. 195–262, 1863. [3](#)
- [26] P. Debye, “[Der Lichtdruck auf Kugeln von beliebigem Material \(Light pressure on spheres of arbitrary material\)](#)”, *Ann. Phys.*, vol. 30, pp. 57–136, 1909. [3](#), [4](#), [23](#)
- [27] G. Gouesbet e G. Gréhan, *Generalized Lorenz-Mie Theories*. Berlin: Springer-Verlag, 2011. [4](#), [16](#)

- [28] M. I. Mishchenko, J. W. Hovenier e L. D. Travis, eds., *Light Scattering by Nonspherical Particles: Theory, Measurements, and Applications*. San Diego: Academic Press, 2000. 4, 185
- [29] H. M. Nussenzveig, “High-Frequency Scattering by a Transparent Sphere. I. Direct Reflection and Transmission”, *J. Math. Phys.*, vol. 10, pp. 82–124, 1969. 4
- [30] H. M. Nussenzveig, “High-Frequency Scattering by a Transparent Sphere. II. Theory of the Rainbow and the Glory”, *J. Math. Phys.*, vol. 10, pp. 125–176, 1969. 4
- [31] M. Born e E. Wolf, *Principles of Optics: Electromagnetic Theory of Propagation, Interference, and Diffraction of Light*. New York: Pergamon Press, 1989. 4, 12, 13, 20, 173, 218, 223
- [32] M. I. Mishchenko, L. D. Travis e A. A. Lacis, *Scattering, Absorption, and Emission of Light by Small Particles*. Cambridge: Cambridge University Press, 2004. 4, 16, 211
- [33] P. W. Barber e S. C. Hill, *Light Scattering by Particles: Computational Methods*. Singapore: World Scientific, 1990. 4, 14, 42, 135, 166, 218
- [34] M. I. Tribelsky e B. S. Luk’yanchuk, “Anomalous light scattering by small particles”, *Phys. Rev. Lett.*, vol. 97, no. 263902, 2006. 4
- [35] M. Bashevoy, V. Fedotov e N. Zheludev, “Optical whirlpool on an absorbing metallic nanoparticle”, *Opt. Express*, vol. 13, pp. 8372–8379, 2005. 4
- [36] B. S. Luk’yanchuk, A. E. Miroshnichenko, M. I. Tribelsky, Y. S. Kivshar e A. R. Khokhlov, “Paradoxes in laser heating of plasmonic nanoparticles”, *New J. of Phys.*, vol. 14, no. 093022, 2012. 4
- [37] Z. B. Wang, B. S. Luk’yanchuk, M. H. Hong, Y. Lin e T. C. Chong, “Energy flow around a small particle investigated by classical Mie theory”, *Phys. Rev. B*, vol. 70, no. 035418, 2004. 4

-
- [38] Z. Ruan e S. Fan, “Superscattering of Light from subwavelength nanostructures”, *Phys. Rev. Lett.*, vol. 105, no. 013901, 2010. 4
- [39] T. Khudiyev, E. Huseyinoglu e M. Bayindir, “Non-resonant Mie scattering: Emergent optical properties of core-shell polymer nanowires”, *Sci. Rep.*, vol. 4, no. 4607, 2014. 4
- [40] J. Sancho-Parramon e D. Jelovinar, “Boosting Fano resonances in single layer concentric core-shell”, *Nanoscale*, vol. 6, pp. 13555–13564, 2014. xix, 4, 79, 80, 184, 185
- [41] E. Ozbay, “Plasmonics: merging photonics and electronics at nanoscale dimensions”, *Science*, vol. 311, pp. 189–193, 2006. 4
- [42] S. A. Maier, ed., *Plasmonics: Fundamentals and Applications*. New York: Springer, 2007. 5, 41, 42
- [43] A. V. Zayats, I. I. Smolyaninov e A. A. Maradudin, “Nano-optics of surface plasmon polaritons”, *Phys. Reports*, vol. 408, pp. 131–314, 2005. 5, 42, 66
- [44] A. E. Rider, K. Ostrikov e S. A. Furman, “Plasmas meet plasmonics: Everything old is new again”, *Eur. Phys. J. D*, vol. 66, no. 226, 2012. 5, 41, 42
- [45] D. E. Gómez, Z. Q. Teo, M. Altissimo, T. J. Davis, S. Earl e A. Roberts, “The dark side of plasmonics”, *Nano Lett.*, vol. 13, pp. 3722–3728, 2013. 5
- [46] P. K. Jain e M. A. El-Sayed, “Plasmonic coupling in noble metal nanostructures”, *Chem. Phys. Lett.*, vol. 487, pp. 153–164, 2010. 5
- [47] C. Radloff e N. J. Halas, “Plasmonic Properties of concentric nanoshells”, *Nano Lett.*, vol. 4, pp. 1323–1327, 2004. 5
- [48] T. Shegai, Z. Li, T. Dadoosh, Z. Zhang, H. Xu e G. Haran, “Managing light polarization via plasmon-molecule interactions within an asymmetric metal nanoparticle trimer”, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, vol. 105, pp. 16448–16453, 2008. 5

- [49] S. N. Sheikholeslami, A. Garcia-Etxarri e J. A. Dionne, “Controlling the interplay of electric and magnetic modes via Fano-like plasmon resonances”, *Nano Lett.*, vol. 11, pp. 3927–3934, 2011. 5
- [50] Y. A. Urzhumov, G. Shvets, J. A. Fan, F. Capasso, D. Brandl e P. Nordlander, “Plasmonic nanoclusters: a path towards negative-index metafluids”, *Opt. Express*, vol. 15, pp. 14129–14145, 2007. 5
- [51] A. Gopinath, S. Boriskina, B. Reinhard e L. D. Negro, “Deterministic aperiodic arrays of metal nanoparticles for surface-enhanced Raman scattering (SERS)”, *Opt. Express*, vol. 17, pp. 3741–3753, 2009. 5
- [52] M. Farhat, S. Mühlig, C. Rockstuhl e F. Lederer, “Scattering cancellation of the magnetic dipole field from macroscopic spheres”, *Opt. Express*, vol. 20, pp. 13896–13906, 2012. 5, 97
- [53] E. Prodan, C. Radloff, N. Halas e P. Nordlander, “A hybridization model for the plasmon response of complex nanostructures”, *Science*, vol. 302, pp. 419–422, 2003. 6, 68
- [54] U. Fano, “Effects of configuration interaction on intensities and phase shifts”, *Phys. Rev.*, vol. 124, pp. 1866–1878, 1961. 6, 55, 65
- [55] B. Luk’yanchuk, N. I. Zheludev, S. A. Maier, N. J. Halas, P. Nordlander, H. Giessen e C. T. Chong, “The Fano resonance in plasmonic nanostructures and metamaterials”, *Nature Mater.*, vol. 9, pp. 707–715, 2010. 6, 7, 55, 56, 62, 65, 66, 72, 74, 77, 83, 96, 120, 144, 154, 185
- [56] A. Miroshnichenko, S. Flach e Y. Kivshar, “Fano resonances in nanoscale structures”, *Rev. Mod. Phys.*, vol. 82, no. 2257, 2010. 6, 52, 54, 55, 56, 62, 63, 65, 89, 184
- [57] Y. Francescato, V. Giannini e S. A. Maier, “Plasmonic Systems Unveiled by Fano Resonances”, *ACS Nano*, vol. 6, pp. 1830–1838, 2012. 6, 56

- [58] V. A. Fedotov, M. Rose, S. L. Prosvirnin, N. Papasimakis e N. I. Zheludev, “[Sharp dark-mode resonances in planar metamaterials with broken structural symmetry](#)”, *Phys. Rev. Lett.*, vol. 99, no. 147401, 2007. [6](#)
- [59] S. Zhang, D. Genov, Y. Wang, M. Liu e X. Zhang, “[Plasmon-induced transparency in metamaterials](#)”, *Phys. Rev. Lett.*, vol. 101, no. 047401, 2008. [6](#)
- [60] S. E. Harris, “[Electromagnetically induced transparency](#)”, *Phys. Today*, vol. 50, pp. 36–42, 1997. [6](#)
- [61] C. L. G. Alzar, M. A. G. Martinez e P. Nussenzeig, “[Classical analog of electromagnetically induced transparency](#)”, *Am. J. Phys.*, vol. 70, pp. 37–41, 2002. [6](#), [62](#), [65](#)
- [62] A. E. Miroshnichenko, S. Flach, A. V. Gorbach, B. S. Luk’yanchuk, Y. S. Kivshar e M. I. Tribelsky, “[Fano resonances: a discovery that was not made 100 years ago](#)”, *Opt. and Phot. News*, vol. 19, pp. 48–48, 2008. [6](#)
- [63] N. Liu, L. Langguth, T. Weiss, J. Kastel, M. Fleischhauer, T. Pfau e H. Giessen, “[Plasmonic analogue of electromagnetically induced transparency at the Drude damping limit](#)”, *Nature Mater.*, vol. 8, pp. 758–62, 2009. [6](#)
- [64] P. Tassin, L. Zhang, T. Koschny, E. N. Economou e C. M. Soukoulis, “[Low-loss metamaterials based on classical electromagnetically induced transparency](#)”, *Phys. Rev. Lett.*, vol. 102, no. 053901, 2009. [6](#)
- [65] M. I. Tribelsky, S. Flach, A. E. Miroshnichenko, A. V. Gorbach e Y. S. Kivshar, “[Light scattering by a finite obstacle and Fano resonances](#)”, *Phys. Rev. Lett.*, vol. 100, no. 043903, 2008. [7](#), [56](#)
- [66] B. Gallinet e O. J. F. Martin, “[Ab initio theory of Fano resonances in plasmonic nanostructures and metamaterials](#)”, *Phys. Rev. B*, vol. 83, no. 235427, 2011. [7](#)
- [67] A. E. Miroshnichenko, “[Off-resonance field enhancement by spherical nanoshells](#)”, *Phys. Rev. A*, vol. 81, no. 053818, 2010. [7](#), [8](#), [56](#), [58](#), [59](#), [65](#), [68](#), [69](#), [80](#), [82](#), [83](#), [86](#), [87](#), [96](#), [120](#), [124](#), [155](#), [183](#)

- [68] C. W. Hsu, B. G. DeLacy, S. G. Johnson, J. D. Joannopoulos e M. Soljacic, “[Theoretical Criteria for Scattering Dark States in Nanostructured Particles](#)”, *Nano Lett.*, vol. 14, pp. 2783–2788, 2014. 7
- [69] E. Boulais, R. Lachaine e M. Meunier, “[Plasma mediated off-resonance plasmonic enhanced ultrafast laser-induced nanocavitation](#)”, *Nano Lett.*, vol. 12, pp. 4763–4769, 2012. 7
- [70] J. Baumgart, L. Humbert, E. Boulais, R. Lachaine, J.-J. Lebrun e M. Meunier, “[Off-resonance plasmonic enhanced femtosecond laser optoporation and transfection of cancer cells](#)”, *Biomaterials*, vol. 33, pp. 2345–2350, 2012. 7
- [71] Y. Liu e X. Zhang, “[Metamaterials: a new frontier of science and technology](#)”, *Chem. Soc. Rev.*, vol. 40, pp. 2494–2507, 2011. 7, 36
- [72] H. Chen, C. T. Chan e P. Sheng, “[Transformation optics and metamaterials](#)”, *Nature Mater.*, vol. 9, pp. 387–396, 2010. 7, 36
- [73] T. G. Mackay e A. Lakhtakia, “[Negatively refracting chiral metamaterials: a review](#)”, *SPIE Reviews*, vol. 1, no. 018003, 2010. xxi, 7, 102, 104
- [74] D. R. Smith, W. J. Padilla, D. C. Vier, S. C. Nemat-Nasser e S. Schultz, “[Composite medium with simultaneously negative permeability and permittivity](#)”, *Phys. Rev. Lett.*, vol. 84, pp. 4184–4187, 2000. 7, 36, 37, 39, 102
- [75] D. R. Smith, J. B. Pendry e M. C. K. Wiltshire, “[Metamaterials and negative refractive index](#)”, *Science*, vol. 305, pp. 788–792, 2004. 7, 102
- [76] C. Enkrich, M. Wegener, S. Linden, S. Burger, L. Zschiedrich, F. Schmidt, J. F. Zhou, T. Koschny e C. M. Soukoulis, “[Magnetic metamaterials at telecommunication and visible frequencies](#)”, *Phys. Rev. Lett.*, vol. 95, no. 203901, 2005. 8
- [77] W. Cai, U. K. Chettiar, H. K. Yuan, V. C. de Silva, A. V. Kildishev, V. P. Drachev e V. M. Shalaev, “[Metamagnetics with rainbow colors](#)”, *Opt. Express*, vol. 15, pp. 3333–3341, 2007. 8

-
- [78] J. B. Pendry, D. Shurig e D. R. Smith, “Controlling electromagnetic fields”, *Science*, vol. 312, pp. 1780–1782, 2006. 8
- [79] U. Leonhardt, “Optical conformal mapping”, *Science*, vol. 312, pp. 1777–1780, 2006. 8
- [80] R. Ruppin, “Extinction properties of a sphere with negative permittivity”, *Sol. Stat. Comm.*, vol. 116, pp. 411–415, 2000. 8, 38, 43, 44, 46, 68
- [81] L. Gao e Y. Huang, “Extinction properties of a coated sphere containing a left-handed material”, *Opt. Comm.*, vol. 239, pp. 25–31, 2004. 8, 28, 43, 44, 46, 137
- [82] A. E. Miroshnichenko, “Non-Rayleigh limit of the Lorenz-Mie solution and suppression of scattering by spheres of negative refractive index”, *Phys. Rev. A*, vol. 80, no. 013808, 2009. 8
- [83] T. J. Arruda, A. S. Martinez e F. A. Pinheiro, “Unconventional Fano effect and off-resonance field enhancement in plasmonic coated spheres”, *Phys. Rev. A*, vol. 87, no. 043841, 2013. 8, 56, 57, 73, 89, 96, 100, 120, 124, 133, 140, 155, 175, 176, 183, 184
- [84] A. Lagendijk e B. A. van Tiggelen, “Resonant multiple scattering of light”, *Phys. Rep.*, vol. 270, pp. 143–215, 1996. 8, 180, 181
- [85] F. A. Pinheiro, “Statistics of quality factors in three-dimensional disordered magneto-optical systems and its applications to random lasers”, *Phys. Rev. A*, vol. 78, no. 023812, 2008. 8, 184
- [86] R. Loudon, “The propagation of electromagnetic energy through an absorbing dielectric”, *J. Phys. A: Gen. Phys.*, vol. 3, pp. 233–245, 1970. 8, 32, 40, 102, 137, 168, 169, 176
- [87] R. Ruppin, “Electromagnetic energy density in a dispersive and absorptive material”, *Phys. Lett. A*, vol. 299, pp. 309–312, 2002. 8, 32, 39, 40, 102, 137, 168, 169

-
- [88] P. Markos e C. M. Soukoulis, eds., *Wave Propagation: From Electrons to Photonic Crystals and Left-Handed Materials*. Princeton: Princeton University Press, 2008. 8, 39, 43
- [89] M. P. van Albada, B. A. van Tiggelen, A. Lagendijk e A. Tip, “Speed of Propagation of Classical Waves in Strongly Scattering Media”, *Phys. Rev. Lett.*, vol. 66, pp. 3132–3135, 1991. 8, 24, 25, 59, 144, 178, 184
- [90] B. A. van Tiggelen, A. Lagendijk, M. P. van Albada e A. Tip, “Speed of light in random media”, *Phys. Rev. B*, vol. 45, pp. 12233–12243, 1992. 8, 25, 59, 124, 144
- [91] A. G. Ramm, *Wave Scattering by Small Bodies of Arbitrary Shapes*. Singapore: World Scientific, 2005. 11
- [92] J. D. Jackson, *Classical Electrodynamics*. New York: John Wiley, 1999. 12, 17, 62, 171, 212, 214, 215, 217, 218, 220, 225, 228
- [93] L. D. Landau, E. M. Lifshitz e L. P. Pitaevskii, *Electrodynamics of Continuous Media*. Oxford: Pergamon Press, 1984. 12, 13, 32, 40, 41, 44, 83, 102, 105, 137, 176, 211, 225, 227, 228
- [94] K. L. van der Molen, P. Zijlstra, A. Lagendijk e A. P. Mosk, “Laser threshold of Mie resonances”, *Opt. Lett.*, vol. 31, pp. 1432–1434, 2006. 13
- [95] J. A. Kong, *Electromagnetic Wave Theory*. New York: John Wiley, 1990. 15, 20, 67, 70, 160, 211, 213, 214
- [96] E. J. Rothwell e M. J. Cloud, *Electromagnetics*. Boca Raton: CRC Press, 2001. 15, 103, 106, 160, 161, 211, 213, 214, 225
- [97] D. Deirmendjian, *Electromagnetic Scattering on Spherical Polydispersions*. New York: American Elsevier, 1969. 17
- [98] J. A. Stratton, *Electromagnetic Theory*. New York: McGraw-Hill, 1941. 17, 214, 215, 218

-
- [99] M. Abramowitz e I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions*. New York: Dover Publications, 1970. [18](#), [31](#), [222](#)
- [100] G. B. Arfken e H. J. Weber, *Essentials of Math Methods for Physicists*. San Diego: Academic Press, 2003. [18](#), [112](#), [222](#)
- [101] C. Schwartz e A. Dogariu, “[Conservation of angular momentum of light in single scattering](#)”, *Opt. Express*, vol. 14, pp. 8425–8433, 2006. [23](#)
- [102] R. Gómez-Medina, L. S. Froufe-Pérez, M. Yépez, F. Scheffold, M. Nieto-Vesperinas e J. J. Sáenz, “[Negative scattering asymmetry parameter for dipolar particles: Unusual reduction of the transport mean free path and radiation pressure](#)”, *Phys. Rev. A*, vol. 85, no. 035802, 2012. [23](#)
- [103] T. Brandes e S. Kettemann, *Anderson Localization and Its Ramifications: Disorder, Phase Coherence, and Electron Correlations*. Berlin: Springer-Verlag, 2003. [24](#)
- [104] F. A. Pinheiro, A. S. Martinez e L. C. Sampaio, “[Multiple scattering of electromagnetic waves in disordered magnetic media: localization parameter, energy transport velocity and diffusion constant](#)”, *Braz. J. Phys.*, vol. 31, pp. 65–70, 2001. [24](#)
- [105] N. Nakanishi, “[A general survey of the theory of the Bethe-Salpeter equation](#)”, *Prog. Theor. Phys. Supplement*, vol. 43, pp. 1–81, 1969. [25](#)
- [106] A. Bott e W. Zdunkowski, “[Electromagnetic energy within dielectric spheres](#)”, *J. Opt. Soc. Am. A*, vol. 4, pp. 1361–1365, 1987. [25](#), [33](#), [34](#), [59](#), [111](#), [114](#), [124](#), [175](#), [176](#)
- [107] T. J. Arruda e A. S. Martinez, “[Electromagnetic energy within a magnetic infinite cylinder and scattering properties for oblique incidence](#)”, *J. Opt. Soc. Am. A*, vol. 27, pp. 1679–1687, 2010. [25](#), [33](#), [44](#), [59](#), [111](#), [124](#), [129](#), [175](#), [176](#), [179](#), [180](#), [185](#)
- [108] T. J. Arruda, F. A. Pinheiro e A. S. Martinez, “[Electromagnetic energy within coated spheres containing dispersive metamaterials](#)”, *J. Opt.*, vol. 14,

- no. 065101, 2012. 28, 31, 33, 36, 59, 60, 72, 97, 111, 114, 120, 124, 128, 129, 133, 175, 176, 179, 183, 184, 185, 225, 238
- [109] A. L. Aden e M. Kerker, “Scattering of electromagnetic waves from two concentric spheres”, *J. Appl. Phys.*, vol. 22, pp. 1242–1246, 1951. 28
- [110] F. A. Pinheiro, A. S. Martinez e L. C. Sampaio, “New effects in light scattering in disordered media and coherent backscattering cone: system of magnetic particles”, *Phys. Rev. Lett.*, vol. 84, pp. 1435–1438, 2000. 31, 91, 128, 185
- [111] A. D. Boardman e K. Marinov, “Electromagnetic energy in a dispersive metamaterial”, *Phys. Rev. B*, vol. 73, no. 165110, 2006. 32, 38, 39, 40
- [112] J. C. M. Garnett, “Colours in metal glasses and in metallic films”, *Philos. Trans. R. Soc. Lond. A*, vol. 203, pp. 385–420, 1904. 32, 69, 90, 149
- [113] D. A. G. Bruggeman, “Berechnung verschiedener physikalischer Konstanten von heterogenen Substanzen. I. Dielektrizitätskonstanten und Leitfähigkeiten der Mischkörper aus isotropen Substanzen (Calculation of various physical constants of heterogeneous substances. I. Dielectric constant and conductivity of mixed bodies from isotropic substances)”, *Ann. Phys.*, vol. 24, pp. 636–679, 1935. 32
- [114] G. N. Watson, *A Treatise on the Theory of Bessel Functions*. Cambridge: Cambridge University Press, 1958. 33, 112, 129, 130, 134
- [115] T. J. Arruda e A. S. Martinez, “Electromagnetic energy within magnetic spheres”, *J. Opt. Soc. Am. A*, vol. 27, pp. 992–1001, 2010. 33, 34, 44, 59, 66, 67, 91, 111, 112, 114, 124, 129, 175, 176
- [116] R. Ruppin, “Electric and magnetic energies within dispersive metamaterial spheres”, *J. Opt.*, vol. 13, no. 095101, 2011. 33, 34, 40, 53, 114, 124, 133
- [117] T. Kaiser, S. Lange e G. Schweiger, “Structural resonances in a coated sphere: investigation of the volume-averaged source function and resonance positions”, *Appl. Opt.*, vol. 33, pp. 7789–7797, 1994. 33, 59, 60

-
- [118] V. G. Veselago, “The electrodynamics of substances with simultaneously negative values of ϵ and μ ”, *Sov. Phys. Usp.*, vol. 10, pp. 509–514, 1968. [36](#), [102](#)
- [119] H. Lamb, “On group-velocity”, *Proc. Lond. Math. Soc.*, vol. 1, pp. 473–479, 1904. [36](#)
- [120] L. I. Mandel’shtam, “Group velocity in a crystal lattice”, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.*, vol. 15, pp. 475–478, 1945. [36](#)
- [121] V. E. Pafomov, “On transition radiation and the Vavilov-Cherenkov radiation”, *Sov. Phys. JETP*, vol. 9, pp. 1321–1324, 1959. [36](#)
- [122] J. B. Pendry, “Negative refraction makes a perfect lens”, *Phys. Rev. Lett.*, vol. 85, pp. 3966–3969, 2000. [36](#)
- [123] A. Alù e N. Engheta, “Achieving transparency with plasmonic and metamaterial coatings”, *Phys. Rev. E*, vol. 72, no. 016623, 2005. [37](#), [90](#), [184](#)
- [124] A. Alù e N. Engheta, “Multifrequency optical invisibility cloak with layered plasmonic shells”, *Phys. Rev. Lett.*, vol. 100, no. 113901, 2008. [37](#), [90](#), [184](#)
- [125] P.-Y. Chen, J. Soric e A. Alù, “Invisibility and cloaking based on scattering cancellation”, *Adv. Mater.*, vol. 24, pp. OP281–OP304, 2012. [37](#)
- [126] B. Edwards, A. Alù, M. G. Silveirinha e N. Engheta, “Experimental verification of plasmonic cloaking at microwave frequencies with metamaterials”, *Phys. Rev. Lett.*, vol. 103, no. 153901, 2009. [37](#), [123](#)
- [127] N. Fang, D. Xi, J. Xu, M. Ambati, W. Srituravanich, C. Sun e X. Zhang, “Ultrasonic metamaterials with negative modulus”, *Nature Mater.*, vol. 5, pp. 452–456, 2006. [37](#)
- [128] M. Kadic, T. Bückmann, N. Stenger, M. Thiel e M. Wegener, “On the practicability of pentamode mechanical metamaterials”, *Appl. Phys. Lett.*, vol. 100, no. 191901, 2012. [37](#)

- [129] N. Stenger, M. Wilhelm e M. Wegener, “[Experiments on elastic cloaking in thin plates](#)”, *Phys. Rev. Lett.*, vol. 108, no. 014301, 2012. [37](#)
- [130] Y. A. Urzhumov e D. R. Smith, “[Fluid flow control with transformation media](#)”, *Phys. Rev. Lett.*, vol. 107, no. 074501, 2011. [37](#)
- [131] K. Aydin, K. Guven, M. Kafesaki, L. Zhang, C. M. Soukoulis e E. Ozbay, “[Experimental observation of true left-handed transmission peaks in metamaterials](#)”, *Opt. Lett.*, vol. 29, pp. 2623–2625, 2004. [xv](#), [38](#)
- [132] S. A. Tretyakov, “[Electromagnetic field energy density in artificial microwave materials with strong dispersion and loss](#)”, *Phys. Lett. A*, vol. 343, pp. 231–237, 2005. [39](#), [40](#)
- [133] P. G. Luan, “[Power loss and electromagnetic energy density in a dispersive metamaterial medium](#)”, *Phys. Rev. E*, vol. 80, no. 046601, 2009. [40](#), [41](#), [105](#), [168](#)
- [134] B. S. Luk’yanchuk, A. E. Miroshnichenko e Y. S. Kivshar, “[Fano resonances and topological optics: an interplay of far- and near-field interference phenomena](#)”, *J. Opt.*, vol. 15, no. 073001, 2013. [52](#), [54](#), [56](#), [124](#), [144](#), [184](#)
- [135] S. Mukherjee, H. Sobhani, J. B. Lassiter, R. Bardhan, P. Nordlander e N. J. Halas, “[Fanoshells: nanoparticles with built-in Fano resonances](#)”, *Nano Lett.*, vol. 10, pp. 2694–2701, 2010. [52](#), [89](#)
- [136] W. L. Barnes, A. Dereux e T. W. Ebbesen, “[Surface plasmon subwavelength optics](#)”, *Nature*, vol. 424, pp. 824–830, 2003. [55](#)
- [137] N. J. Halas, S. Lal, W.-S. Chang, S. Link e P. Nordlander, “[Plasmons in Strongly Coupled Metallic Nanostructures](#)”, *Chem. Rev.*, vol. 111, pp. 3913–3961, 2011. [55](#)
- [138] J. F. Ho, B. Luk’yanchuk e J. B. Zhang, “[Tunable Fano resonances in silver-silica-silver multilayer nanoshells](#)”, *Appl. Phys. A*, vol. 107, pp. 133–137, 2012. [55](#)

-
- [139] W. Liu, A. E. Miroshnichenko, D. N. Neshev e Y. S. Kivshar, “Polarization-independent Fano resonances in arrays of core-shell nanoparticles”, *Phys. Rev. B*, vol. 86, no. 081407, 2012. 55
- [140] R. W. Wood, “On a remarkable case of uneven distribution of light in a diffraction grating spectrum”, *Proc. R. Soc. London, Ser. A*, vol. 18, pp. 269–275, 1902. 55
- [141] L. Rayleigh, “On the dynamical theory of gratings”, *Proc. R. Soc. London, Ser. A*, vol. 79, pp. 399–416, 1907. 55
- [142] M. Sarrazin, J.-P. Vigneron e J.-M. Vigoureux, “Role of Wood anomalies in optical properties of thin metallic films with a bidimensional array of subwavelength holes”, *Phys. Rev. B*, vol. 67, no. 085415, 2003. 55
- [143] P. W. Anderson, “Plasmons, gauge invariance, and mass”, *Phys. Rev.*, vol. 130, pp. 439–442, 1963. 56
- [144] G. Morchio e F. Strocchi, “Spontaneous breaking of the Galilei group and the plasmon energy gap”, *Ann. Phys.*, vol. 170, pp. 310–332, 1986. 56
- [145] F. Hao, Y. Sonnefraud, P. V. Dorpe, S. A. Maier, N. J. Halas e P. Nordlander, “Symmetry breaking in plasmonic nanocavities: subradiant LSPR sensing and a tunable Fano resonance”, *Nano Lett.*, vol. 8, pp. 3983–3988, 2008. 56
- [146] J. Zhang e A. Zayats, “Multiple Fano resonances in single-layer nonconcentric core-shell nanostructures”, *Opt. Express*, vol. 21, no. 8427, 2010. 56
- [147] H. Chen, L. Shao, Y. C. Man, C. Zhao, J. Wang e B. Yang, “Fano Resonance in (Gold Core)-(Dielectric Shell) Nanostructures without Symmetry Breaking”, *Small*, vol. 8, pp. 1503–1509, 2012. 56
- [148] O. P. na Rodríguez, A. Rivera, M. Campoy-Quilesb e U. Palc, “Tunable Fano resonance in symmetric multilayered gold nanoshells”, *Nanoscale*, vol. 5, pp. 209–216, 2013. 56

- [149] M. I. Tribelsky, A. E. Miroshnichenko e Y. S. Kivshar, “[Unconventional Fano resonances in light scattering by small particles](#)”, *Europhys. Lett.*, vol. 97, no. 44005, 2012. [57](#), [73](#), [75](#), [87](#), [91](#), [92](#), [96](#), [100](#), [124](#), [142](#), [184](#)
- [150] A. Lovera, B. Gallinet, P. Nordlander e O. J. F. Martin, “[Mechanisms of Fano Resonances in Coupled Plasmonic Systems](#)”, *ACS Nano*, vol. 7, pp. 4527–4536, 2013. [57](#)
- [151] F. A. Pinheiro, A. S. Martinez e L. C. Sampaio, “[Electromagnetic scattering by small magnetic particles](#)”, *J. Magnet. Mag. Mat.*, vol. 226-230, pp. 1951–1953, 2001. [60](#), [222](#)
- [152] G. Breit e E. Wigner, “[Capture of Slow Neutrons](#)”, *Phys. Rev.*, vol. 49, pp. 519–531, 1936. [62](#)
- [153] Y. S. Joe, A. M. Satanin e C. S. Kim, “[Classical analogy of Fano resonances](#)”, *Phys. Scr.*, vol. 74, pp. 259–266, 2006. [xvii](#), [62](#), [63](#), [64](#)
- [154] C. Argyropoulos, P.-Y. Chen, F. Monticone, G. D’Aguanno e A. Alù, “[Nonlinear Plasmonic Cloaks to Realize Giant All-Optical Scattering Switching](#)”, *Phys. Rev. Lett.*, vol. 108, no. 263905, 2012. [73](#), [90](#), [185](#)
- [155] F. Monticone, C. Argyropoulos e A. Alù, “[Multilayered plasmonic covers for comblike scattering response and optical tagging](#)”, *Phys. Rev. Lett.*, vol. 110, no. 113901, 2013. [89](#), [97](#), [100](#), [175](#)
- [156] F. Monticone, C. Argyropoulos, e A. Alù, “[Layered plasmonic cloaks to tailor the optical scattering at the nanoscale](#)”, *Sci. Rep.*, vol. 2, no. 912, 2012. [89](#), [154](#), [155](#), [184](#)
- [157] A. Boltasseva e H. A. Atwater, “[Low-Loss Plasmonic Metamaterials](#)”, *Science*, vol. 331, pp. 290–291, 2011. [89](#)
- [158] G. V. Naik, J. Kim e A. Boltasseva, “[Oxides and nitrides as alternative plasmonic materials in the optical range](#)”, *Opt. Express*, vol. 1, pp. 1090–1099, 2011. [89](#)

-
- [159] F. Monticone e A. Alù, “Do cloaked objects really scatter less?”, *Phys. Rev. X*, vol. 3, no. 041005, 2013. 96
- [160] T. J. Arruda, F. A. Pinheiro e A. S. Martinez, “Electromagnetic energy within single-resonance chiral metamaterial spheres”, *J. Opt. Soc. Am. A*, vol. 30, pp. 1205–1212, 2013. 101, 124, 129, 175, 176, 185
- [161] L. Kelvin, *Baltimore Lectures on Molecular Dynamics and the Wave Theory of Light*. London: C. J. Clay and Sons, 1904. 101
- [162] C. F. Bohren, “Light scattering by an optically active sphere”, *Chem. Phys. Lett.*, vol. 29, pp. 458–462, 1974. 101, 105, 107, 108
- [163] A. Lakhtakia, *Beltrami Fields in Chiral Media*. Singapore: World Scientific, 1994. 101
- [164] C. Athanasiadis, G. Costakis e I. G. Stratis, “On some properties of Beltrami fields in chiral media”, *Reports on Mathematical Physics*, vol. 45, pp. 257–271, 2000. 101
- [165] J. Zhou, T. Koschny, M. Kafesaki, E. N. Economou, J. B. Pendry e C. M. Soukoulis, “Saturation of the magnetic response of split-ring Resonators at optical frequencies”, *Phys. Rev. Lett.*, vol. 95, no. 223902, 2005. 102
- [166] J. B. Pendry, “A chiral route to negative refraction”, *Science*, vol. 306, pp. 1353–1355, 2004. 102, 103
- [167] B. Wang, J. Zhou, T. Koschny, M. Kafesaki e C. M. Soukoulis, “Chiral metamaterials: simulations and experiments”, *J. Opt. A: Pure Appl. Opt.*, vol. 11, no. 114003, 2009. 102
- [168] E. Plum, J. Zhou, J. Dong, V. A. Fedotov, T. K. C. M. Soukoulis e N. I. Zheludev, “Metamaterial with negative index due to chirality”, *Phys. Rev. B*, vol. 79, no. 035407, 2009. xxi, 102, 104
- [169] D. R. Smith, P. Kolinko e D. Schurig, “Negative refraction in indefinite media”, *J. Opt. Soc. Am. B*, vol. 21, pp. 1032–1043, 2004. 102

- [170] V. A. Podolskiy e E. Narimanov, “[Strongly anisotropic waveguide as a nonmagnetic left-handed system](#)”, *Phys. Rev. B*, vol. 71, no. 201101, 2005. [102](#)
- [171] C. L. Cortes, W. Newman, S. Molesky e Z. Jacob, “[Quantum nano photonics using hyperbolic metamaterials](#)”, *J. Opt.*, vol. 14, no. 063001, 2012. [102](#)
- [172] P. G. Luan, Y. T. Wang, S. Zhang e X. Zhang, “[Electromagnetic energy density in a single-resonance chiral metamaterial](#)”, *Opt. Lett.*, vol. 36, pp. 675–677, 2011. [103](#), [104](#), [105](#), [114](#)
- [173] R. Zhao, T. Koschny e C. M. Soukoulis, “[Chiral metamaterials: retrieval of the effective parameters with and without substrate](#)”, *Opt. Express*, vol. 18, pp. 14553–14567, 2010. [xxi](#), [104](#), [105](#), [114](#)
- [174] M. Wegener e S. Linden, “[Giving light yet another new twist](#)”, *Physics*, vol. 2, no. 3, 2009. [xxi](#), [104](#)
- [175] M. P. Silverman, “[Reflection and refraction at the surface of a chiral medium: comparison of gyrotropic constitutive relations invariant or noninvariant under a duality transformation](#)”, *J. Opt. Soc. Am. A*, vol. 3, pp. 830–837, 1986. [104](#)
- [176] E. U. Condon, “[Theories of optical rotatory power](#)”, *Rev. Mod. Phys.*, vol. 9, pp. 432–457, 1937. [104](#)
- [177] A. Serdyukov, I. Semchenko, S. Tretyakov e A. Sihvola, *Electromagnetics of bi-anisotropic materials. Theory and applications*. Amsterdam: Gordon and Breach Science Publishers, 2001. [105](#)
- [178] C. F. Bohren, “[Circular dichroism and optical rotatory dispersion spectra of arbitrarily shaped optically active particles](#)”, *J. Theor. Biol.*, vol. 65, pp. 755–767, 1977. [106](#)
- [179] A. Lakhtakia, V. V. Varadan e V. K. Varadan, “[Field equations, Huygens’s principle, integral equations, and theorems for radiation and scattering of electromagnetic waves in isotropic chiral media](#)”, *J. Opt. Soc. Am. A*, vol. 5, pp. 175–184, 1988. [106](#), [107](#)

- [180] J. Lekner, “Optical properties of isotropic chiral media”, *Pure Appl. Opt.*, vol. 5, pp. 417–443, 1996. 106
- [181] C. F. Bohren, “Scattering of electromagnetic waves by an optically active cylinder”, *J. Coll. Interface Sci.*, vol. 66, pp. 105–109, 1978. 107, 108
- [182] L. Rayleigh, “On the electromagnetic theory of light”, *Philos. Mag.*, vol. 12, pp. 81–101, 1881. 123
- [183] L. Rayleigh, “The dispersal of light by a dielectric cylinder”, *Philos. Mag.*, vol. 36, pp. 365–376, 1918. 123
- [184] T. J. Arruda, A. S. Martinez e F. A. Pinheiro, “Electromagnetic energy within coated cylinders at oblique incidence and applications to graphene coatings”, *J. Opt. Soc. Am. A*, vol. 31, pp. 1811–1819, 2014. 123, 152, 156, 175, 176, 183, 185
- [185] A. Alù, D. Rainwater e A. Kerkhoff, “Plasmonic cloaking of cylinders: finite length, oblique illumination and cross-polarization coupling”, *New J. Phys.*, vol. 12, no. 103028, 2010. 123
- [186] W. J. M. Kort-Kamp, F. S. S. Rosa, F. A. Pinheiro e C. Farina, “Tuning plasmonic cloaks with an external magnetic field”, *Phys. Rev. Lett.*, vol. 111, no. 215504, 2013. 123, 159, 185
- [187] H. L. Chen e L. Gao, “Tunability of the unconventional Fano resonances in coated nanowires with radial anisotropy”, *Opt. Express*, vol. 21, pp. 23619–23630, 2013. 123, 124, 126, 184, 185
- [188] J. R. Wait, “Scattering of a plane wave from a circular dielectric cylinder at oblique incidence”, *Can. J. Phys.*, vol. 33, pp. 189–195, 1955. 123
- [189] A. C. Lind e J. M. Greenberg, “Electromagnetic scattering by obliquely oriented cylinders”, *J. Appl. Phys.*, vol. 37, pp. 3195–3203, 1966. 123
- [190] M. Kerker e E. Matijevic, “Scattering of electromagnetic waves from concentric infinite cylinders”, *J. Opt. Soc. Am.*, vol. 51, pp. 506–508, 1961. 123, 128

- [191] G. A. Shah, “Scattering of plane electromagnetic waves by infinite concentric circular cylinders at oblique incidence”, *Mon. Not. R. astr. Soc.*, vol. 148, pp. 93–102, 1970. [123](#), [127](#)
- [192] R. Ruppin, “Electromagnetic energy in dispersive spheres”, *J. Opt. Soc. Am. A*, vol. 15, pp. 524–527, 1998. [124](#)
- [193] K. Busch, C. M. Soukoulis e E. N. Economou, “Transport velocity in two-dimensional random media”, *Phys. Rev. B*, vol. 52, pp. 10834–10840, 1995. [124](#), [128](#), [144](#)
- [194] U. Schroter e A. Dereux, “Surface plasmon polaritons on metal cylinders with dielectric core”, *Phys. Rev. B*, vol. 64, no. 125420, 2001. [124](#)
- [195] Y. Jin, P. Zhang, e S. He, “Abnormal enhancement of electric field inside a thin permittivity-near-zero object in free space”, *Phys. Rev. B*, vol. 82, no. 075118, 2010. [124](#)
- [196] M. Ritala e M. Leskelä, “Atomic layer epitaxy - a valuable tool for nanotechnology?”, *Nanotech.*, vol. 10, pp. 19–24, 1999. [124](#)
- [197] J. Johansson, B. A. Wacaser, K. A. Dick e W. Seifert, “Growth related aspects of epitaxial nanowires”, *Nanotech.*, vol. 17, pp. S355–S361, 2006. [124](#)
- [198] I. Crassee, M. Orlita, M. Potemski, A. L. Walter, M. Ostler, T. Seyller, I. Gaponenko, J. Chen e A. B. Kuzmenko, “Intrinsic terahertz plasmons and magnetoplasmons in large scale monolayer graphene”, *Nano Lett.*, vol. 12, pp. 2470–2474, 2012. [124](#), [135](#), [136](#), [137](#), [147](#), [152](#), [154](#), [159](#), [166](#), [168](#), [169](#)
- [199] S. Thongrattanasiri, F. H. L. Koppens e F. J. G. de Abajo, “Complete Optical Absorption in Periodically Patterned Graphene”, *Phys. Rev. Lett.*, vol. 108, no. 047401, 2012. [124](#), [135](#), [136](#), [148](#), [152](#)
- [200] N. A. Zharova, I. V. Shadrivov, A. A. Zharov e Y. S. Kivshar, “Nonlinear control of invisibility cloaking”, *Opt. Express*, vol. 20, pp. 14954–14959, 2012. [126](#)

-
- [201] W. J. M. Kort-Kamp, F. S. S. Rosa, F. A. Pinheiro e C. Farina, “[Molding the flow of light with a magnetic field: plasmonic cloaking and directional scattering](#)”, *J. Opt. Soc. Am. A*, vol. 31, pp. 1969–1976, 2014. [126](#), [159](#), [160](#), [163](#), [168](#), [174](#)
- [202] R. P. Leavitt e J. W. Little, “[Absorption and emission of radiation by plasmons in two-dimensional electron-gas disks](#)”, *Phys. Rev. B*, vol. 34, pp. 2450–2457, 1986. [136](#)
- [203] S. A. Mikhailov, “[Radiative decay of collective excitations in an array of quantum dots](#)”, *Phys. Rev. B*, vol. 54, pp. 10335–10338, 1996. [136](#)
- [204] J. A. Lock, “[Morphology-Dependent Resonances of an Infinitely Long Circular Cylinder Illuminated by a Diagonally Incident Plane Wave or a Focused Gaussian Beam](#)”, *J. Opt. Soc. Am. A*, vol. 14, pp. 653–661, 1997. [142](#)
- [205] R. Ruppin, “[Electromagnetic energy inside an irradiated cylinder](#)”, *J. Opt. Soc. Am. A*, vol. 15, pp. 1891–1895, 1998. [144](#), [185](#)
- [206] A. V. Kildishev, L. J. Prokopeva e E. E. Narimanov, “[Cylinder light concentrator and absorber: theoretical description](#)”, *Opt. Express*, vol. 18, pp. 16646–16662, 2010. [147](#), [185](#)
- [207] T. V. Teperik, F. J. G. de Abajo, A. G. Borisov, M. Abdelsalam, P. N. Bartlett, Y. Sugawara e J. J. Baumberg, “[Omnidirectional absorption in nanostructured metal surfaces](#)”, *Nat. Photonics*, vol. 2, pp. 299–301, 2008. [147](#)
- [208] K. Aydin, V. E. Ferry, R. M. Briggs e H. Atwater, “[Broadband polarization-independent resonant light absorption using ultrathin plasmonic super absorbers](#)”, *Nat. Commun.*, vol. 2, no. 517, 2011. [147](#)
- [209] N. I. Landy, S. Sajuyigbe, J. J. Mock, D. R. Smith e W. J. Padilla, “[Perfect Metamaterial Absorber](#)”, *Phys. Rev. Lett.*, vol. 100, no. 207402, 2008. [147](#)
- [210] Y. Avitzour, Y. A. Urzhumov e G. Shvets, “[Wide-angle infrared absorber based on a negative-index plasmonic metamaterial](#)”, *Phys. Rev. B*, vol. 79, no. 045131, 2009. [147](#)

- [211] M. M. N. Liu, T. Weiss, M. Hentschel e H. Giessen, “[Infrared Perfect Absorber and Its Application As Plasmonic Sensor](#)”, *Nano Lett.*, vol. 10, pp. 2342–2348, 2010. [147](#)
- [212] A. Aubry, D. Y. Lei, A. I. Fernández-Domínguez, Y. Sonnefraud, S. A. Maier e J. B. Pendry, “[Plasmonic Light-Harvesting Devices over the Whole Visible Spectrum](#)”, *Nano Lett.*, vol. 10, pp. 2574–2579, 2010. [147](#)
- [213] E. E. Narimanov e A. V. Kildishev, “[Optical black hole: Broadband omnidirectional light absorber](#)”, *Appl. Phys. Lett.*, vol. 95, no. 041106, 2009. [147](#), [185](#)
- [214] W. W. Salisbury, “Absorbent body for electromagnetic waves”, *U.S. Patent*, no. 2 599 944, 1952. [147](#)
- [215] J. Cesario, R. Quidant, G. Badenes e S. Enoch, “[Electromagnetic coupling between a metal nanoparticle grating and a metallic surface](#)”, *Opt. Lett.*, vol. 30, pp. 3404–3406, 2005. [147](#)
- [216] A. P. Hibbins, W. A. Murray, J. Tyler, S. Wedge, W. L. Barnes e J. R. Sambles, “[Resonant absorption of electromagnetic fields by surface plasmons buried in a multilayered plasmonic nanostructure](#)”, *Phys. Rev. B*, vol. 74, no. 073408, 2006. [147](#)
- [217] N. Bonod, G. Tayeb, D. Maystre, S. Enoch e E. Popov, “[Total absorption of light by lamellar metallic gratings](#)”, *Opt. Express*, vol. 16, pp. 15431–15438, 2008. [147](#)
- [218] J. S. White, G. Veronis, Z. Yu, E. S. Barnard, A. Chandran, S. Fan e M. L. Brongersma, “[Extraordinary optical absorption through subwavelength slits](#)”, *Opt. Lett.*, vol. 34, pp. 686–688, 2009. [147](#)
- [219] N. M. R. Peres, F. Guinea e A. H. C. Neto, “[Electronic properties of disordered two-dimensional carbon](#)”, *Phys. Rev. B*, vol. 73, no. 125411, 2006. [147](#)
- [220] F. Bonaccorso, Z. Sun, T. Hasan e A. C. Ferrari, “[Graphene photonics and optoelectronics](#)”, *Nat. Photonics*, vol. 4, pp. 611–622, 2010. [147](#)

- [221] R. R. Nair, P. Blake, A. N. Grigorenko, K. S. Novoselov, T. J. Booth, T. Stauber, N. M. R. Peres e A. K. Geim, “[Fine Structure Constant Defines Visual Transparency of Graphene](#)”, *Science*, vol. 320, p. 1308, 2008. 148
- [222] A. Ferreira, N. M. R. Peres, R. M. Ribeiro e T. Stauber, “[Graphene-based photodetector with two cavities](#)”, *Phys. Rev. B*, vol. 85, no. 115438, 2012. 148
- [223] L. Ju, B. Geng, J. Horng, C. Girit, M. Martin, Z. Hao, H. A. Bechtel, X. Liang, A. Zettl, Y. R. Shen e F. Wang, “[Graphene plasmonics for tunable terahertz metamaterials](#)”, *Nat. Nanotechnol.*, vol. 6, pp. 630–634, 2011. 148
- [224] Y. V. Bludov, N. M. R. Peres e M. I. Vasilevskiy, “[Graphene-based polaritonic crystal](#)”, *Phys. Rev. B*, vol. 85, no. 245409, 2012. 148
- [225] J.-T. Liu, N.-H. Liu, J. Li, X. J. Li e J.-H. Huang, “[Enhanced absorption of graphene with one-dimensional photonic crystal](#)”, *Appl. Phys. Lett.*, vol. 101, no. 052104, 2012. 148
- [226] T. J. Echtermeyer, L. Britnell, P. K. Jasnós, A. Lombardo, R. V. Gorbachev, A. N. Grigorenko, A. K. Geim, A. C. Ferrari e K. S. Novoselov, “[Strong plasmonic enhancement of photovoltage in graphene](#)”, *Nat. Commun.*, vol. 2, no. 458, 2011. 148
- [227] J. R. Wait, “[Some Boundary Value Problems Involving Plasma Media](#)”, *J. Res. Nat. Bur. Stand.*, vol. 65, pp. 137–150, 1961. 159
- [228] D. Lacoste, B. A. van Tiggelen, G. L. J. A. Rikken e A. Sparenberg, “[Optics of a Faraday-active Mie sphere](#)”, *J. Opt. Soc. Am. A*, vol. 15, pp. 1636–1642, 1998. 159
- [229] A. S. Martinez e R. Maynard, “[Faraday effect and multiple scattering of light](#)”, *Phys. Rev. B*, vol. 50, pp. 3714–3732, 1994. 159
- [230] R.-J. Tarento, K.-H. Bennemann, P. Joyes e J. V. de Walle, “[Mie scattering of magnetic spheres](#)”, *Phys. Rev. E*, vol. 69, no. 026606, 2004. 161
- [231] N. S. Stepanov, “[Adiabatic Transformation of the Electromagnetic Wave Spectrum in a Plasma](#)”, *Sov. Phys. JETP*, vol. 26, pp. 1234–1237, 1968. 161

-
- [232] R. Serber, “[The Theory of the Faraday Effect in Molecules](#)”, *Phys. Rev.*, vol. 41, pp. 489–506, 1932. [173](#)
- [233] T. K. Xia, P. M. Hui e D. Stroud, “[Theory of Faraday rotation in granular magnetic materials](#)”, *J. Appl. Phys.*, vol. 67, pp. 2736–2741, 1990. [173](#)
- [234] D. Lacoste e B. A. van Tiggelen, “[Coherent backscattering of light in a magnetic field](#)”, *Phys. Rev. E*, vol. 61, pp. 4556–4565, 2000. [173](#), [184](#)
- [235] M. I. Mishchenko, L. Liu e D. W. Mackowski, “[Morphology-dependent resonances of spherical droplets with numerous microscopic inclusions](#)”, *Opt. Lett.*, vol. 39, pp. 1701–1704, 2014. [175](#)
- [236] C. W. J. Beenakker e P. W. Brouwer, “[Distribution of the reflection eigenvalues of a weakly absorbing chaotic cavity](#)”, *Phys. E*, vol. 9, pp. 463–466, 2001. [180](#)
- [237] Y. H. Fu, A. I. Kuznetsov, A. E. Miroshnichenko, Y. F. Yu e B. Luk’yanchuk, “[Directional visible light scattering by silicon nanoparticles](#)”, *Nature Comm.*, vol. 4, no. 1527, 2013. [185](#)
- [238] A. Doicu, T. Wriedt e Y. A. Eremin, *Light Scattering by Systems of Particles*. Berlin: Springer-Verlag, 2006. [211](#), [212](#)
- [239] D. J. Griffiths, *Introduction to Electrodynamics*. New Jersey: Prentice Hall, 1999. [211](#)

Equações de Maxwell na matéria

Fornecemos aqui uma introdução básica da teoria eletromagnética que ancora os principais conceitos e propriedades ópticas estudados nesta tese de doutorado. Foram usados nesta descrição alguns livros-textos clássicos de eletromagnetismo e teoria de espalhamento, a saber, *Bohren & Huffman* [1], *Mishchenko et al.* [32], *Doicu et al.* [238], *Rothwell & Cloud* [96] e *Landau et al.* [93].

A.1 Equações de Maxwell macroscópicas

Na teoria clássica do eletromagnetismo, o comportamento dos campos vetoriais em um meio material é governado pelas equações de Maxwell macroscópicas. Por *teoria macroscópica* entendemos que tanto os campos vetoriais quanto suas fontes geradoras são *funções contínuas* do espaço e do tempo, com derivadas igualmente contínuas no domínio do espaço e do tempo, de forma que as propriedades físicas são contínuas. Descontinuidades nos campos vetoriais e suas derivadas parciais são permitidas ocorrer apenas na interface entre meios materiais com propriedades físicas distintas, indicando, assim, que há uma descontinuidade na matéria.

Há diversas formas de se escrever as equações de Maxwell na matéria, cada uma delas diferindo na maneira pela qual os meios materiais são considerados. A forma mais antiga e extensamente usada nos livros-textos [239], e que aqui abordamos, foi sugerida por Minkowski em 1908 [95, 96]. No formalismo de Minkowski, as equações diferenciais não fazem menção aos materiais que suportam os campos vetoriais; toda a informação concernente aos meios materiais é relegada às

relações constitutivas. Nessa teoria macroscópica, as fontes de campo consistem do campo vetorial $\mathbf{J}(\mathbf{r}, t)$ (que é a densidade de corrente) e do campo escalar $\rho(\mathbf{r}, t)$ (a densidade de carga). O campo mediador das interações entre as partículas carregadas é o campo eletromagnético, o qual, no formalismo de Minkowski, é descrito por um conjunto de quatro campos vetoriais: $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ (campo elétrico), $\mathbf{D}(\mathbf{r}, t)$ (deslocamento elétrico), $\mathbf{B}(\mathbf{r}, t)$ (indução magnética) e $\mathbf{H}(\mathbf{r}, t)$ (campo magnético). Adotando-se o Sistema Internacional de unidades (SI)⁴⁹, as equações de Maxwell-Minkowski (doravante, *equações de Maxwell*) assumem a seguinte forma:

$$\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) , \quad (\text{A.1})$$

$$\nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{J}(\mathbf{r}, t) + \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{D}(\mathbf{r}, t) , \quad (\text{A.2})$$

$$\nabla \cdot \mathbf{D}(\mathbf{r}, t) = \rho(\mathbf{r}, t) , \quad (\text{A.3})$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = 0 . \quad (\text{A.4})$$

Em particular, a Eq. (A.1) é chamada de *lei de indução de Faraday*, a Eq. (A.2) é a *lei de Ampère-Maxwell*, a Eq. (A.3) é a *lei de Gauss do campo elétrico* e a Eq. (A.4) é a *lei de Gauss do campo magnético* (ou inexistência de monopolo magnético). Um ponto a ser notado, e que comumente passa despercebido, é que apenas as primeiras três equações da teoria de Maxwell são independentes, uma vez que a lei de Gauss do campo $\mathbf{B}$ pode ser obtida tomando-se a divergência da lei de Faraday [238]. Analogamente, tomando-se a divergência da lei de Ampère-Maxwell e usando-se a lei de Gauss do campo $\mathbf{E}$, obtém-se a *equação da continuidade*:

$$\nabla \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}, t) + \frac{\partial}{\partial t} \rho(\mathbf{r}, t) = 0 , \quad (\text{A.5})$$

a qual expressa a conservação da carga elétrica.

A fim de tornar as equações de Maxwell completas, é necessário fornecer informações adicionais acerca dos materiais nos quais os campos se propagam, dadas então pelas *relações constitutivas*. Essas relações fornecem a descrição dos meios materiais por meio de suas dependências funcionais com respeito aos campos:

⁴⁹ Para transformar as equações de Maxwell-Minkowski do sistema SI (mks) para o Gaussiano (cgs), basta fazer as substituições: $(\rho, \mathbf{J})$ por $(4\pi\rho/c, 4\pi\mathbf{J}/c)$ e $(\mathbf{D}, \mathbf{B})$ por $(\mathbf{D}/c, \mathbf{B}/c)$, onde $c = 1/\sqrt{\epsilon_0\mu_0}$ é a velocidade da luz no vácuo. O sistema de unidades de Heaviside-Lorentz, bastante usado em teoria quântica de campos [92], é o sistema Gaussiano racionalizado, isto é, o fator 4π não aparece nas equações, sendo incorporado às grandezas.

$\mathbf{D} = \mathbf{D}(\mathbf{E}, \mathbf{H})$ e $\mathbf{B} = \mathbf{B}(\mathbf{E}, \mathbf{H})$. De modo geral, tanto o deslocamento elétrico $\mathbf{D}$ quanto o campo de indução magnética $\mathbf{B}$ podem ser expressos por uma parte dependente apenas do espaço livre (ε_0, μ_0) – onde ε_0 é a *permissividade elétrica* e μ_0 é a *permeabilidade magnética* do espaço livre⁵⁰, e uma dependente da resposta do material à aplicação do campo $\mathbf{E}$ ou $\mathbf{H}$, respectivamente:

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}, t) = \varepsilon_0 \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) + \mathbf{P}(\mathbf{r}, t) , \quad (\text{A.6})$$

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = \mu_0 \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) + \mu_0 \mathbf{M}(\mathbf{r}, t) , \quad (\text{A.7})$$

onde os vetores $\mathbf{P}(\mathbf{r}, t)$ e $\mathbf{M}(\mathbf{r}, t)$ são, respectivamente, o vetor de polarização elétrica e o vetor de magnetização. Ambas as grandezas são definidas, respectivamente, como a resposta do meio material à aplicação de um campo elétrico $\mathbf{E}$ ou magnético $\mathbf{H}$. Em uma definição aproximada, essas grandezas podem ser identificadas com a média do momento de dipolo elétrico (no caso de $\mathbf{P}$) ou magnético (no caso de $\mathbf{M}$) por unidade de volume. Em particular, no chamado formalismo de *Maxwell-Boffi*⁵¹, os campos vetoriais $\mathbf{P}$ e $\mathbf{M}$ tomam os lugares de $\mathbf{D}$ e $\mathbf{H}$ nas equações de Maxwell-Minkowski mediante as transformações (A.6) e (A.7). Outros formalismos que se utilizam dos vetores $\mathbf{P}$ e $\mathbf{M}$, e consideram cargas em movimento, são os formalismos de Chu e Ampère⁵², os quais não são abordados em nossa descrição.

Apenas como um exemplo prático, se o meio é *isotrópico e linear*, a resposta do material à aplicação dos campos $\mathbf{E}$ e $\mathbf{H}$ é dada por

$$\mathbf{P}(\mathbf{r}, t) = \varepsilon_0 \chi_e \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) , \quad (\text{A.8})$$

$$\mathbf{M}(\mathbf{r}, t) = \chi_m \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) , \quad (\text{A.9})$$

⁵⁰ No espaço livre, $\varepsilon_0 \approx 8.85 \times 10^{-12} \text{Fm}^{-1} \approx (10^{-9}/36\pi) \text{Fm}^{-1}$ e $\mu_0 \approx 4\pi \times 10^{-7} \text{Hm}^{-1}$, enquanto em um meio material, a permissividade e a permeabilidade são determinadas, respectivamente, pelas propriedades elétricas e magnéticas do meio.

⁵¹ Como uma alternativa para as equações de Maxwell-Minkowski, podemos considerar a transformação linear de $(\mathbf{E}, \mathbf{B}, \mathbf{D}, \mathbf{H})$ para $(\mathbf{E}, \mathbf{B}, \mathbf{P}, \mathbf{M})$, a qual preserva a covariância das equações de Maxwell: $\nabla \times \mathbf{E} = -\partial \mathbf{B} / \partial t$, $\nabla \times (\mathbf{B} / \mu_0 - \mathbf{M}) = \mathbf{J} + \partial (\varepsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P}) / \partial t$, $\nabla \cdot (\varepsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P}) = \rho$, $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$. Estas equações são chamadas de equações de *Maxwell-Boffi* em homenagem a L. Boffi, quem as formalizou para meios materiais em movimento. O uso de $(\mathbf{P}, \mathbf{M})$ no lugar de $(\mathbf{D}, \mathbf{H})$ é às vezes chamado de aplicação do princípio de Ampère e Lorentz [95, 96], em que os materiais são vistos como um conjunto de partículas de matéria carregada imersas no espaço livre.

⁵² Os formalismos de Chu e de Ampère das equações de Maxwell são alternativas úteis às formas de Minkowski e Boffi. Esses incluem explicitamente informações sobre a velocidade de corpos carregados em movimento, e diferem um pouco da forma de Boffi na interpretação física das propriedades elétrica e magnética da matéria [95].

onde χ_e e χ_m são, respectivamente, as suscetibilidades elétrica e magnética do material (ε, μ) . Dessas relações, a permissividade ε e a permeabilidade μ de meios isotrópicos podem ser reescritas como $\varepsilon = \varepsilon_0(1 + \chi_e)$ e $\mu = \mu_0(1 + \chi_m)$. Da lei de Gauss do campo elétrico e da equação da continuidade, Eqs. (A.3) e (A.5), podemos ainda definir para meios lineares a relação constitutiva $\mathbf{J}(\mathbf{r}, t) = \sigma \mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$, chamada de *lei de Ohm*, onde σ é condutividade elétrica do meio. Assim, dizemos que um meio material é *inomogêneo* (ou heterogêneo) se ε , μ e σ são funções do espaço⁵³. O meio é chamado de *temporalmente dispersivo* se os parâmetros materiais são funções da frequência, e *espacialmente dispersivo* se as relações constitutivas são convoluções sobre o espaço.

Neste estudo, não entramos na discussão de quais campos são mais fundamentais no formalismo que adotamos. Originalmente, na construção da teoria eletromagnética, o próprio Maxwell separou os campos vetoriais nos pares $(\mathbf{E}, \mathbf{H})$, que aparecem dentro das *integrais de linha* e cujos cálculos fornecem o trabalho do campo eletromagnético, e $(\mathbf{B}, \mathbf{D})$, que aparecem nas *integrais de superfície* e dão o fluxo do campo eletromagnético [98]. Para nossa descrição, portanto, é mais natural adotarmos $(\mathbf{E}, \mathbf{H})$ para o cálculo da energia eletromagnética e grandezas de espalhamento, o que não significa que o par $(\mathbf{B}, \mathbf{D})$ seja menos fundamental: é questão de escolha e conveniência. Se estivéssemos em regimes relativísticos, por exemplo, obteríamos que $(\mathbf{E}, \mathbf{B})$ transformam-se juntos por meio de transformações de Lorentz, assim como $(\mathbf{D}, \mathbf{H})$ [92, 96]. Sommerfeld também fez a associação $(\mathbf{E}, \mathbf{B})$ (*entidades de intensidade*) e $(\mathbf{D}, \mathbf{H})$ (*entidades de quantidade*), atribuindo uma relação de *causa* e *efeito* entre os dois pares, respectivamente [96]. Nessa interpretação, $\mathbf{E}$ induz uma polarização $\mathbf{P}$ no material e $\mathbf{D} = \varepsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P}$ é seu resultado, enquanto $\mathbf{B}$ cria $\mathbf{M}$ e o resultado correspondente é $\mathbf{H} = \mathbf{B}/\mu_0 - \mathbf{M}$. Ao longo desta tese de doutorado, contudo, consideramos que $\mathbf{H}$ induz o campo $\mathbf{B}$ na matéria, e não o contrário. Todas essas abordagens, porém, independente dessas interpretações, são equivalentes e descrevem de modo completo a interação da radiação com a matéria macroscópica [95].

⁵³ De modo geral, as grandezas ε , μ e σ são *tensoriais*, de forma que no caso *isotrópico* essas grandezas devem ser interpretadas como um escalar multiplicando um tensor identidade $\overleftrightarrow{I}$: $\overleftrightarrow{\varepsilon} = \varepsilon \overleftrightarrow{I}$, $\overleftrightarrow{\mu} = \mu \overleftrightarrow{I}$ e $\overleftrightarrow{\sigma} = \sigma \overleftrightarrow{I}$.

A.2 Condições de contorno

Os campos eletromagnéticos devem satisfazer as equações de Maxwell nos pontos onde tanto ε quanto μ são contínuos. No entanto, quando se atravessa a separação entre uma partícula e um meio externo, há, em geral, uma mudança repentina nas propriedades ópticas. Idealmente, essa mudança deve ocorrer em uma região de transição com espessura da ordem de dimensões atômicas. Do ponto de vista macroscópico, portanto, há uma descontinuidade no contorno da partícula. Assim, na interface de separação entre dois meios, os campos vetoriais $\mathbf{E}$, $\mathbf{D}$, $\mathbf{B}$ e $\mathbf{H}$ podem ser descontínuos. As condições de contorno na interface, então necessárias para a determinação dos campos vetoriais em todos os pontos do espaço, podem ser derivadas a partir das equações de Maxwell na forma integral [92, 98] e são as seguintes:

1. As componentes normal de $\mathbf{D}$ e tangencial de $\mathbf{H}$ são descontínuas:

$$\hat{\mathbf{n}} \cdot (\mathbf{D}_2 - \mathbf{D}_1) = \rho_s , \quad (\text{A.10})$$

$$\hat{\mathbf{n}} \times (\mathbf{H}_2 - \mathbf{H}_1) = \mathbf{J}_s , \quad (\text{A.11})$$

onde $\hat{\mathbf{n}}$ é um versor direcionado, localmente, ao longo da normal à interface de separação entre os meios 1 e 2 e apontando em direção ao meio 2, e ρ_s e $\mathbf{J}_s$ são, respectivamente, as densidades de carga e de corrente superficiais.

2. As componentes normal de $\mathbf{B}$ e tangencial de $\mathbf{E}$ são contínuas:

$$\hat{\mathbf{n}} \cdot (\mathbf{B}_2 - \mathbf{B}_1) = 0 , \quad (\text{A.12})$$

$$\hat{\mathbf{n}} \times (\mathbf{E}_2 - \mathbf{E}_1) = \mathbf{0} . \quad (\text{A.13})$$

As condições de contorno acima são úteis na resolução das equações de Maxwell em regiões adjacentes distintas e com propriedades físicas contínuas. A partir desse conjunto de relações vinculando as soluções parciais em cada uma das regiões adjacentes, é possível determinar os campos vetoriais em todo o espaço. Em especial, na ausência de correntes superficiais ($\mathbf{J}_s = \mathbf{0}$), a continuidade das componentes tangenciais dos campos $\mathbf{H}$ e $\mathbf{E}$ na interface de separação entre dois meios, Eqs. (A.11) e (A.13), respectivamente, é uma condição *necessária e suficiente* para a resolução

do espalhamento de ondas eletromagnéticas por partículas isoladas [1, 4]. De fato, impomos essa condição de contorno em todos os sistemas tratados nesta tese de doutorado.

Campos eletromagnéticos harmônicos

Campos vetoriais *oscilantes no tempo* são geralmente representados como *funções complexas*. Nessa representação, o campo vetorial que possui significado físico nada mais é que a parte real da função vetorial complexa correspondente [1,92]. Fazemos aqui um pequeno resumo sobre a notação complexa em eletrodinâmica, descrevendo, logo em sequência, as principais propriedades de uma onda plana com dependência temporal harmônica.

B.1 Representação complexa dos campos

Um *campo vetorial harmônico* $\mathbf{F}(\mathbf{r}, t)$ (real) tem a forma

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}, t) = \mathcal{A}(\mathbf{r}) \cos(\omega t) + \mathcal{B}(\mathbf{r}) \sin(\omega t) , \quad (\text{B.14})$$

onde ω é a frequência angular da onda e $\mathcal{A}$ e $\mathcal{B}$ são amplitudes reais independentes do tempo. Usando a *fórmula de Euler*, note que $\mathbf{F} = \mathbf{F}(\mathbf{r}, t)$ pode ser reescrito como a parte real de um vetor complexo: $\mathbf{F}(\mathbf{r}, t) = \text{Re}[\mathbf{F}_c(\mathbf{r}, t)]$, onde $\mathbf{F}_c(\mathbf{r}, t) = \mathcal{C}(\mathbf{r})e^{-i\omega t}$, com $\mathcal{C}(\mathbf{r}) = \mathcal{A}(\mathbf{r}) + i\mathcal{B}(\mathbf{r})$ e $i^2 = -1$. O vetor $\mathbf{F}_c(\mathbf{r}, t)$ é uma representação complexa do campo físico real $\mathbf{F}(\mathbf{r}, t)$. Se todos os operadores $\mathcal{L}$ atuando sobre os campos harmônicos são *lineares*, segue imediatamente que $\mathcal{L}\mathbf{F} = \mathcal{L}\text{Re}(\mathbf{F}_c) = \text{Re}(\mathcal{L}\mathbf{F}_c)$.

Note que há uma certa arbitrariedade associada à representação complexa de um campo real: $\mathbf{F}$ pode também ser reescrito como $\mathbf{F} = \text{Re}(\mathbf{F}_c^*)$, onde $\mathbf{F}_c^* = \mathcal{C}^*e^{+i\omega t}$ e o asterisco denota conjugação complexa ($i \leftrightarrow -i$). Em nossos estudos, assumimos que todos os campos e fontes possuem dependência temporal harmônica dada

por $e^{-i\omega t}$, que é a mais utilizada em livros-textos e artigos. Esta convenção é a mesma encontrada, por exemplo, nos livros clássicos de *Born & Wolf* [31], *Stratton* [98], *Jackson* [92], *Bohren & Huffman* [1] e *Barber & Hill* [33]. Devido a essa ambiguidade na representação de $\mathbf{F}$, é sempre importante enfatizar qual é a escolha da dependência harmônica dos campos complexos. Ao se comparar grandezas calculadas, por exemplo, nos livros de *van de Hulst* [2] ou de *Kerker* [6], os quais adotam $e^{+i\omega t}$, com as do *Stratton* [98], há certas diferenças de sinal na parte imaginária dessas grandezas, implicando em funções de Hankel diferentes para os campos espalhados [1, 2]. Os parâmetros materiais, como a permissividade ε ou a permeabilidade μ (e, conseqüentemente, o índice de refração), têm partes imaginárias negativas na convenção $e^{+i\omega t}$.

Nesta tese de doutorado, representamos o campo elétrico $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ como sendo uma grandeza vetorial complexa que oscila no tempo com frequência angular ω :

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \text{Re} [\mathbf{E}(\mathbf{r})e^{-i\omega t}] ; \quad (\text{B.15})$$

e, por conseguinte, o mesmo é estendido aos outros campos vetoriais via equações de Maxwell (A.1)–(A.4). Aqui, o vetor amplitude do campo $\mathbf{E}(\mathbf{r})$, representado no domínio da frequência, é uma grandeza complexa $\mathbf{E}_c(\mathbf{r})$, enquanto $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ no domínio do tempo é real. Por simplicidade, omitimos o índice “c” das amplitudes complexas e também o fato de dependerem de ω . Usando então o *ansatz* (B.15) para os campos vetoriais, as equações de Maxwell no domínio da frequência tornam-se:

$$\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}) = i\omega \mathbf{B}(\mathbf{r}) , \quad (\text{B.16})$$

$$\nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}) = \mathbf{J}(\mathbf{r}) - i\omega \mathbf{D}(\mathbf{r}) , \quad (\text{B.17})$$

$$\nabla \cdot \mathbf{D}(\mathbf{r}) = \rho(\mathbf{r}) , \quad (\text{B.18})$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r}) = 0 . \quad (\text{B.19})$$

Levando em conta a equação da continuidade $\nabla \cdot \mathbf{J} - i\omega \rho = 0$, podemos expressar a lei de Maxwell-Ampère e a lei de Gauss do campo elétrico como sendo, respectivamente,

$$\nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}) = -i\omega \mathbf{D}_{\text{total}}(\mathbf{r}) , \quad (\text{B.20})$$

$$\nabla \cdot \mathbf{D}_{\text{total}}(\mathbf{r}) = 0 , \quad (\text{B.21})$$

onde $\mathbf{D}_{\text{total}} = \mathbf{D} + i\mathbf{J}/\omega$ é o deslocamento elétrico total ou efetivo.

A relação constitutiva para o deslocamento elétrico efetivo na matéria, supondo um meio material homogêneo, linear e isotrópico, é

$$\mathbf{D}_{\text{total}}(\mathbf{r}) = \varepsilon_{\text{total}} \mathbf{E}(\mathbf{r}) , \quad (\text{B.22})$$

onde a permissividade elétrica complexa $\varepsilon_{\text{total}}$ é dada por

$$\varepsilon_{\text{total}} = \varepsilon_0 \left(1 + \chi_e + \frac{i\sigma}{\omega\varepsilon_0} \right) , \quad (\text{B.23})$$

onde σ e χ_e são, respectivamente, a condutividade e a susceptibilidade elétricas complexas⁵⁴. Em outras palavras, na representação complexa, não há perda de generalidade em se considerar um meio material livre de fontes, uma vez que a solução das equações é a mesma que para um deslocamento elétrico efetivo. Essa solução mais simples das equações de Maxwell para campos harmônicos em meios livres de fonte é uma *onda plana vetorial*⁵⁵.

Fisicamente, ε e μ complexos implicam em diferenças de fase entre os campos harmônicos incidentes e induzidos na matéria. Por exemplo, se a permeabilidade $\mu = \mu' + i\mu''$ é complexa, onde $\mu' = \text{Re}(\mu)$ e $\mu'' = \text{Im}(\mu)$, então, para o campo magnético real $\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 \cos(\omega t)$, o campo de indução magnética correspondente é $\mathbf{B} = |\mu| \mathbf{H}_0 \cos(\omega t - \varphi)$, onde o ângulo de fase φ é dado por $\tan \varphi = \mu''/\mu'$ e $|\mu| = \sqrt{\mu'^2 + \mu''^2}$. De fato, como mostramos a seguir, se a parte imaginária de qualquer das grandezas constitutivas é não nula, a amplitude de uma onda plana que se propaga no meio irá decrescer (de modo *evanescente*) devido à absorção ou dissipação da energia eletromagnética.

Embora restrinjamos nosso estudo às ondas monocromáticas, não há perda de generalidade nessa consideração. De fato, pela teoria de Fourier, um campo $\mathbf{F}(\mathbf{r}, t)$ real com dependência temporal *arbitrária* e *seccionalmente contínuo* no tempo

⁵⁴ Da Eq. (B.23), é imediato que ambas condutividade e suscetibilidade contribuem para a parte imaginária da permissividade: $\text{Im}(\varepsilon_{\text{total}}) = \text{Im}(\chi_e) + \text{Re}(\sigma/\omega\varepsilon_0)$. Se $\text{Im}(\varepsilon_{\text{total}}) \neq 0$, o meio material é dito absoritivo e o campo é atenuado no meio. Usualmente, $\text{Im}(\chi_e)$ é associada à densidade de corrente de cargas “ligadas” e $\text{Re}(\sigma/\omega\varepsilon_0)$ à densidade de corrente de cargas “livres”, de modo que a absorção é determinada pela soma dessas duas contribuições. Para um meio livre de fontes, $\sigma = 0$ e, portanto, $\varepsilon_{\text{total}} = \varepsilon = \varepsilon_0(1 + \chi_e)$.

⁵⁵ Em particular, considere a Eq. (B.21) e a relação constitutiva (B.22), de modo que $\nabla \cdot (\varepsilon_{\text{total}} \mathbf{E}) = 0$. É imediato que se $\varepsilon_{\text{total}} \neq 0$, o campo elétrico tem divergência nula. Esta é a condição geral para um *campo elétrico transversal*. Excetuando possíveis frequências em que $\varepsilon_{\text{total}} = 0$, portanto, o meio não pode suportar *campos longitudinais*.

pode ser expresso como uma superposição de funções vetoriais com dependências temporais harmônicas em frequências positivas:

$$\begin{aligned}\mathbf{F}(\mathbf{r}, t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \mathcal{F}(\mathbf{r}, \omega) e^{-i\omega t} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^{\infty} d\omega \mathcal{F}(\mathbf{r}, \omega) e^{-i\omega t}, \\ \mathcal{F}(\mathbf{r}, \omega) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dt \mathbf{F}(\mathbf{r}, t) e^{i\omega t} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^{\infty} dt \mathbf{F}(\mathbf{r}, t) e^{i\omega t},\end{aligned}$$

onde $\mathcal{F}$ é a transformada de Fourier do campo real $\mathbf{F}(t) = \text{Re}[\mathbf{F}_c(t)]$, cuja condição para que seja real é $\mathcal{F}^*(\omega) = \mathcal{F}(-\omega)$. Assim, dado um campo vetorial com uma dependência temporal arbitrária, mas contínuo ou bem comportado, podemos expressá-lo como uma superposição de funções com dependência temporal harmônica $e^{-i\omega t}$ e amplitudes $\mathcal{F}(\omega)$.

Assumindo que as operações de integração e diferenciação são permutáveis e que $\rho = 0$ (não há cargas no meio), é possível mostrar que as transformadas de Fourier dos campos e da densidade de corrente elétrica satisfazem as equações de Maxwell expressas em (B.16)–(B.19). A partir da suposição de que o mesmo seja válido para as relações constitutivas lineares (A.6) e (A.7), obtém-se como resultado importante, via *teorema da convolução*, que grandezas constitutivas dependentes da frequência implicam em respostas do meio dependentes dos campos em todos os instantes de tempo anteriores [1, 92]. Uma vez mais, salientamos que essa possibilidade de superpor soluções via teoria de Fourier é uma consequência direta da *linearidade* das equações de Maxwell e das condições de contorno.

B.2 Ondas eletromagnéticas planas

Considere as soluções das equações de Maxwell para um meio isotrópico, homogêneo e linear (ε, μ) dadas por

$$\begin{bmatrix} \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \\ \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{E}_0 \\ \mathbf{H}_0 \end{bmatrix} e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)}, \quad (\text{B.24})$$

onde $\mathbf{E}_0$ e $\mathbf{H}_0$ são vetores constantes que podem ou não ser complexos⁵⁶ e o índice “c” foi omitido, uma vez que já sabemos que o campo físico é parte real dos campos

⁵⁶ As ondas monocromáticas têm uma propriedade chamada *estado de polarização*. Supondo $\mathbf{E}_0 = \mathcal{A} + i\mathcal{B}$, temos $\mathbf{E} = \text{Re}(\mathbf{E}_c) = \mathcal{A} \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t) - \mathcal{B} \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)$. Considere $\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} = kz$.

vetoriais complexos. Soluções como a da Eq. (B.24) são chamadas de *ondas planas*. De fato, considerando o vetor de onda $\mathbf{k} = k\hat{\mathbf{e}}$ como uma grandeza complexa, $\mathbf{k} = \mathbf{k}' + i\mathbf{k}''$, sendo $\mathbf{k}'$ e $\mathbf{k}''$ vetores reais, o campo elétrico assume a forma

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_0 e^{-\mathbf{k}'' \cdot \mathbf{r}} e^{i(\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r} - \omega t)}, \quad (\text{B.25})$$

onde $\mathbf{E}_0 e^{-\mathbf{k}'' \cdot \mathbf{r}}$ é a *amplitude* do campo elétrico (para o campo magnético, o resultado é análogo) e $\varphi = \mathbf{k}' \cdot \mathbf{r} - \omega t$ é a fase da onda. Uma equação da forma $\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} = \text{constante}$, onde $\mathbf{k}$ é qualquer vetor real, define uma superfície plana cuja normal é $\mathbf{k}$. Portanto, $\mathbf{k}'$ é perpendicular a superfícies de fase constante, e $\mathbf{k}''$ é perpendicular a superfícies de amplitude constante. Se $\mathbf{k}'$ e $\mathbf{k}''$ são paralelos, o que inclui o caso $\mathbf{k}'' = \mathbf{0}$, estas superfícies coincidem e as ondas são ditas homogêneas; caso contrário, fala-se em ondas inhomogêneas. Por exemplo, ondas propagando-se no vácuo (ε_0, μ_0) são homogêneas.

As equações de Maxwell para ondas planas se reduzem a $\mathbf{k} \cdot (\mathbf{E}_0, \mathbf{H}_0) = (0, 0)$ (condições para a transversalidade) e $\mathbf{k} \times (\mathbf{E}_0, \mathbf{H}_0) = \omega(\mu\mathbf{H}_0, -\varepsilon\mathbf{E}_0)$. Dessas equações, obtém-se facilmente a relação de dispersão

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{k} = \omega^2 \varepsilon \mu, \quad (\text{B.26})$$

que relaciona o vetor de onda $\mathbf{k} = (k' + i k'')\hat{\mathbf{e}}$ a propriedades do meio material e à frequência angular ω da onda. A grandeza adimensional

$$N = c\sqrt{\varepsilon\mu} = \frac{k}{k_0} = \sqrt{\frac{\varepsilon\mu}{\varepsilon_0\mu_0}} \quad (\text{B.27})$$

é o índice de refração absoluto do meio (ε, μ) , onde $c = 1/\sqrt{\varepsilon_0\mu_0}$ e $k_0 = \omega\sqrt{\varepsilon_0\mu_0}$ são, respectivamente, a velocidade e o número de onda no espaço livre. A velocidade de fase da onda no meio (ε, μ) , por sua vez, é dada por $v_p = \omega/k'$.

Para $z = 0$, a Eq. (B.24) descreve uma elipse no plano xy , chamada *elipse de vibração*. Se $\mathcal{A} = \mathbf{0}$ (ou $\mathcal{B} = \mathbf{0}$), a elipse de vibração é apenas uma linha, e a onda é *linearmente polarizada*; o vetor $\mathcal{B}$, nesse caso, especifica a *direção de vibração*. Se $|\mathcal{A}| = |\mathcal{B}|$ e $\mathcal{A} \cdot \mathcal{B} = 0$, a elipse de vibração é um círculo, e a onda é *circularmente polarizada*. Dependendo do sentido de rotação no tempo, a onda pode ser circularmente polarizada *à direita*, se $\mathcal{A} \times \mathcal{B}$ estiver na mesma direção e sentido de propagação da onda, e *à esquerda*, caso contrário. De modo geral, uma onda monocromática da forma (B.24) é *elipticamente polarizada* e, em cada instante de tempo, descreve uma *hélice* no espaço com o mesmo sentido de rotação da elipse [1].

Outra grandeza de bastante relevância, principalmente para meios magnéticos [18], é a impedância intrínseca Z do meio (ε, μ):

$$Z = \frac{E_0}{H_0} = \frac{k}{\omega\varepsilon} = Z_0 \sqrt{\frac{\varepsilon_0\mu}{\varepsilon\mu_0}}, \quad (\text{B.28})$$

onde $Z_0 = \sqrt{\mu_0/\varepsilon_0}$ é a impedância do espaço livre e usamos a relação $H_0 = E_0\sqrt{\varepsilon/\mu}$ válida para as amplitudes das ondas planas. Na literatura, costuma-se usar N (ou n) para o índice de refração e Z para a impedância do meio. Para nos mantermos de acordo com a notação usada ao longo desta tese, definimos o *índice de refração relativo* $m = N/N_0$ ($N_0 = 1$ neste caso em particular) e o *índice de impedância relativa* $\tilde{m} = Z_0/Z$, de forma que, se o meio material é *não magnético* ($\mu = \mu_0$), temos a igualdade $m = \tilde{m}$ [18, 151].

Uma vez que ε e μ são grandezas complexas, podemos escrever $N = \eta + i\kappa$, onde η e κ são grandezas reais ($\kappa \geq 0$) e, no caso geral de um *meio dispersivo e causal*, são vinculadas pelas relações de *Kramers-Kronig*⁵⁷. O mesmo vale para a impedância complexa Z e, de modo geral, para as grandezas constitutivas ε e μ .

Em particular, aplicando a Eq. (C.33), o vetor de Poynting de uma onda plana homogênea propagando-se na direção $\hat{\mathbf{e}}$ é dado por

$$\langle \mathbf{S} \rangle_t = \frac{1}{2} \text{Re} \left[\frac{\mathbf{k}^*}{\omega\mu^*} \right] |\mathbf{E}_c|^2 = \frac{1}{2} \text{Re} \left[\frac{1}{Z^*} \right] |\mathbf{E}_0|^2 \exp[-2\kappa k_0 z] \hat{\mathbf{e}}, \quad (\text{B.29})$$

onde $z = \hat{\mathbf{e}} \cdot \mathbf{r}$. A magnitude do vetor de Poynting, denotada por $I = |\langle \mathbf{S} \rangle_t|$, é chamada *intensidade* do campo ($\mathbf{E}, \mathbf{H}$), ou *irradiância*, possuindo dimensões de potência por unidade de área⁵⁸. À medida que a onda se propaga pelo meio, a intensidade é *exponencialmente* atenuada:

$$I(z) = I_0 e^{-\alpha z}, \quad (\text{B.30})$$

onde $\alpha = 2\kappa k_0$ é o *coeficiente de absorção* do meio material (ε, μ), e é dependente, portanto, da parte imaginária do índice de refração do meio. Evidentemente, o

⁵⁷ Supondo que $N(\omega) = \eta(\omega) + i\kappa(\omega)$ seja uma função analítica para frequências reais, segue que $\eta(\omega) - 1 = (2/\pi) \mathcal{P} \int_0^\infty d\Omega \Omega \kappa(\Omega) / (\Omega^2 - \omega^2)$ e $\kappa(\omega) = (-2\omega/\pi) \mathcal{P} \int_0^\infty d\Omega \eta(\Omega) / (\Omega^2 - \omega^2)$ [1], onde $\mathcal{P}$ indica o valor principal de Cauchy [99, 100].

⁵⁸ Na literatura, algumas vezes se diferencia intensidade de irradiância pela dimensão dessas grandezas: enquanto a primeira é potência por unidade de área, a segunda é potência por unidade de ângulo sólido.

coeficiente de absorção óptica depende da concentração de partículas absorventes no meio material. Dessa observação, a Eq. (B.30), que expressa a atenuação exponencial do campo em função da “espessura” do meio, pode ser identificada com a lei *empírica* de Beer-Lambert-Bouguer [6, 31].

Conservação da energia eletromagnética

A energia eletromagnética armazenada no interior dos centros espalhadores tem uma relação muito estreita com a seção de choque de absorção [108]. Neste Apêndice, discutimos brevemente a conservação da energia eletromagnética e o cálculo da densidade de energia em meios com fraca absorção. Nossa descrição segue basicamente os livros de *Jackson* [92] e *Landau et al.* [93]. Em especial, a partir da potência dissipada nos centros espalhadores, demonstramos de forma bastante intuitiva como a seção de choque de absorção depende dos campos internos.

C.1 Teorema de Poynting

As conservações de energia e *momentum* eletromagnéticos, assim como a equação da continuidade (conservação da carga), seguem naturalmente das equações de Maxwell⁵⁹, então apresentadas no Apêndice A.1. De fato, usando a identidade vetorial $\nabla \cdot (\mathbf{a} \times \mathbf{b}) = \mathbf{b} \cdot (\nabla \times \mathbf{a}) - \mathbf{a} \cdot (\nabla \times \mathbf{b})$ em conjunto com as leis de Faraday e de Ampère-Maxwell, Eqs. (A.1) e (A.2), obtém-se o *teorema de Poynting* no domínio do tempo:

$$\nabla \cdot \mathbf{S}(\mathbf{r}, t) + \left[\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \cdot \frac{\partial \mathbf{D}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) \cdot \frac{\partial \mathbf{B}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \right] = -\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}, t) . \quad (\text{C.31})$$

Aqui, definimos a grandeza vetorial $\mathbf{S} = \mathbf{E} \times \mathbf{H}$, chamada de *vetor de Poynting*, que é interpretada como a densidade do fluxo de potência atravessando um certo

⁵⁹ Em realidade, *postulamos* que o campo eletromagnético pode ser associado a um fluxo de energia propagando-se na velocidade da luz e, a partir desse postulado, obtemos as leis de conservação de energia e *momentum* [96].

volume. Integrando a Eq. (C.31) sobre um volume finito V e área superficial A e usando o teorema do divergente, obtém-se a representação integral do teorema de Poynting:

$$\oint_A d^2r (\mathbf{S} \cdot \hat{\mathbf{n}}) + \int_V d^3r \left(\mathbf{E} \cdot \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} + \mathbf{H} \cdot \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \right) = - \int_V d^3r (\mathbf{E} \cdot \mathbf{J}) , \quad (\text{C.32})$$

onde $\hat{\mathbf{n}}$ é um versor normal à superfície A e apontando para fora do volume V . A equação acima estabelece que a potência de Poynting fluindo através do contorno A somada à taxa de aumento da energia eletromagnética no volume V é igual à potência fornecida pelas fontes dentro do volume.

Na prática, a frequência angular ω é tão alta que os instrumentos de medida não são capazes de registrar as oscilações de energia, mas sim respostas médias no tempo. A média temporal do vetor de Poynting, na representação complexa dos campos harmônicos⁶⁰, é

$$\langle \mathbf{S} \rangle_t = \frac{1}{2} \text{Re} [\mathbf{E} \times \mathbf{H}^*] . \quad (\text{C.33})$$

Em particular, podemos escrever o teorema de Poynting no domínio da frequência,

$$\nabla \cdot (\mathbf{E} \times \mathbf{H}^*) + i\omega (\mathbf{E} \cdot \mathbf{D}^* - \mathbf{B} \cdot \mathbf{H}^*) = -\mathbf{E} \cdot \mathbf{J}^* , \quad (\text{C.34})$$

de maneira que o vetor de Poynting complexo é definido, por conveniência no cálculo da média temporal, como sendo $\mathbf{S} = \mathbf{E} \times \mathbf{H}^*$. O termo $-\mathbf{E} \cdot \mathbf{J}^*$ é interpretado como a densidade de potência complexa fornecida pela fonte.

C.2 Densidade de energia e absorção

A taxa de variação de energia por unidade de volume em um meio material (ε, μ) é dada por $\nabla \cdot \mathbf{S}$. Considerando, em especial, que não há fontes de corrente no meio ($\mathbf{J} = \mathbf{0}$), a Eq. (C.31) assume a forma

$$-\nabla \cdot \mathbf{S}(\mathbf{r}, t) = \left[\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \cdot \frac{\partial \mathbf{D}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) \cdot \frac{\partial \mathbf{B}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \right] . \quad (\text{C.35})$$

⁶⁰ Considerando os vetores com dependência harmônica $\mathbf{a}(\mathbf{r}, t) = \text{Re}[\mathbf{a}(\mathbf{r})e^{-i\omega t}]$ e $\mathbf{b}(\mathbf{r}, t) = \text{Re}[\mathbf{b}(\mathbf{r})e^{-i\omega t}]$, obtemos o produto interno $c(\mathbf{r}, t) = \mathbf{a}(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{b}(\mathbf{r}, t) = (1/2)\text{Re}[\mathbf{a}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{b}^*(\mathbf{r}) + \mathbf{a}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{b}(\mathbf{r})e^{-2i\omega t}]$. A média temporal de c sobre o intervalo de tempo T é definida como sendo $\langle c(\mathbf{r}) \rangle_t = \lim_{T \rightarrow \infty} T^{-1} \int_0^T dt c(\mathbf{r}, t) = (1/2)\text{Re}[\mathbf{a}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{b}^*(\mathbf{r})]$; de modo similar, para o produto vetorial $\mathbf{d}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{a}(\mathbf{r}, t) \times \mathbf{b}(\mathbf{r}, t)$, obtemos $\langle \mathbf{d}(\mathbf{r}) \rangle_t = (1/2)\text{Re}[\mathbf{a}(\mathbf{r}) \times \mathbf{b}^*(\mathbf{r})]$.

Em um meio isotrópico não dispersivo e não absoritivo, isto é, ε e μ são constantes reais multiplicando tensores unitários, a grandeza expressa na Eq. (C.35) pode ser considerada como a taxa de variação no tempo da densidade de energia eletromagnética: $\partial u / \partial t = -\nabla \cdot \mathbf{S}$. Usando as relações constitutivas lineares, Eqs. (A.6) e (A.7), na Eq. (C.35) e integrando no tempo, obtém-se $u = (\varepsilon |\mathbf{E}|^2 + \mu |\mathbf{H}|^2) / 2$. Essa grandeza tem um significado termodinâmico exato: ela é a densidade de energia eletromagnética do campo $(\mathbf{E}, \mathbf{H})$ armazenada no volume V e está associada à entropia do sistema [93]. A média temporal na representação complexa é

$$\langle u \rangle_t(\mathbf{r}) = \frac{1}{4} [\varepsilon |\mathbf{E}(\mathbf{r})|^2 + \mu |\mathbf{H}(\mathbf{r})|^2], \quad (\text{C.36})$$

onde ε e μ são constantes reais não negativas.

Na presença de dispersão, porém, essa interpretação simples não é mais possível. Isso porque dispersão significa, em geral, dissipação de energia (via relações de Kramers-Kronig [1]), de forma que $\varepsilon = \varepsilon' + i\varepsilon''$ e $\mu = \mu' + i\mu''$ são funções de ω . No caso de um campo harmônico, a densidade de potência média dissipada⁶¹ (isto é, o *calor* por unidade de tempo e volume) é dada por:

$$\begin{aligned} Q &= \frac{1}{2} \text{Re} [i\omega (\mathbf{E} \cdot \mathbf{D}^* - \mathbf{B} \cdot \mathbf{H}^*)] \\ &= \frac{\omega}{2} [\varepsilon'' |\mathbf{E}(\mathbf{r})|^2 + \mu'' |\mathbf{H}(\mathbf{r})|^2]. \end{aligned} \quad (\text{C.37})$$

Para campos com dependência temporal arbitrária, basta aplicar a teoria de Fourier para se obter um resultado análogo (Apêndice B.1). Em todos os casos, porém, obtém-se que a energia eletromagnética dissipada na matéria devido à interação com o campo é determinada pelas partes imaginárias de ε e μ , as quais, portanto, devem ser positivas definidas para frequências reais positivas (meios passivos): $\varepsilon'' \geq 0$ e $\mu'' \geq 0$. Como todo meio dispersivo tem absorção, segue que $Q > 0$; portanto, o processo é termodinamicamente irreversível. As frequências nas quais $\varepsilon'' \ll \varepsilon'$ e $\mu'' \ll \mu'$ são chamadas de intervalos de transparência ou regime de fraca absorção.

⁶¹ A taxa de absorção específica (SAR, do inglês *specific absorption rate*) é usada para representar a potência dissipada por unidade de massa de meios biológicos quando a densidade de fluxo incidente é 1 mW/cm² [4]. Se a densidade do meio é dada por ρ (kg/m³), define-se SAR = Q/ρ (W/kg). Para meios biológicos, $\mu'' = 0$, e, portanto, SAR = $\omega \varepsilon'' \varepsilon_0 |\mathbf{E}|^2 / (2\rho) = \sigma |\mathbf{E}|^2 / (2\rho)$. Em geral, considera-se a densidade como sendo aproximadamente igual à da água ($\rho = 10^3$ kg/m³).

Para um campo com dependência temporal arbitrária no regime de transparência, expandimos $\omega\varepsilon''(\omega)$ em torno de uma frequência ω_0 (de ressonância) e tomamos $\omega \approx \omega_0$, de onde obtemos que o primeiro termo, dado pela Eq. (C.37), corresponde à absorção, e o segundo, que corresponde à densidade média de energia, é dado por [92, 93]

$$\langle u \rangle_t(\mathbf{r}) = \frac{1}{4} \left[\frac{\partial(\omega\varepsilon')}{\partial\omega} |\mathbf{E}(\mathbf{r})|^2 + \frac{\partial(\omega\mu')}{\partial\omega} |\mathbf{H}(\mathbf{r})|^2 \right], \quad (\text{C.38})$$

onde necessariamente $\partial(\omega\varepsilon')/\partial\omega > 0$ e $\partial(\omega\mu')/\partial\omega > 0$, uma vez que $\langle u \rangle_t > 0$. Note que para um meio não dispersivo, ε' e μ' são constantes e a Eq. (C.38) se reduz à Eq. (C.36).

Em especial, para uma onda plana propagando-se no meio (ε_0, μ_0) , segue imediatamente a intensidade $I_0 = (1/2)|E_0|^2\sqrt{\varepsilon_0/\mu_0}$ (Apêndice B.2). Supondo que essa onda incida na região (ε, μ) encerrada em um volume V , e usando a definição de *seção de choque* dada na Seção 2.4 (potência dividida por intensidade incidente), podemos escrever, a partir da Eq. (C.37):

$$\begin{aligned} \sigma_{\text{abs}} &\equiv \int_V d^3r \frac{Q}{I_0} \\ &= \int_V d^3r \, k \left[\frac{\varepsilon''}{\varepsilon_0} \left| \frac{\mathbf{E}(\mathbf{r})}{E_0} \right|^2 + \frac{\mu''}{\mu_0} \left| \frac{\mathbf{H}(\mathbf{r})}{H_0} \right|^2 \right], \end{aligned} \quad (\text{C.39})$$

que é exatamente a expressão que faz o vínculo das seções de choque – via conservação da energia, Eq. (2.9) – com os campos internos a um centro espalhador. Note que não há rigor algum nesse cálculo: determinamos a seção de choque de absorção de maneira heurística, usando, para isso, a definição da Seção 2.4, que também carece de rigor. Um cálculo rigoroso da Eq. (C.39), usando *vetores de Hertz* e a *função de Green para o espaço livre* em um volume V com uma *fonte de corrente efetiva* que gera os campos espalhados, pode ser encontrado na Ref. [9].

Componentes dos campos eletromagnéticos

Apresentamos, por completeza, as expressões exatas das componentes dos campos eletromagnéticos que usamos no cálculo dos coeficientes de Lorenz-Mie e da energia interna aos centros espalhadores, bem como as condições de contorno desses coeficientes. Essas componentes foram calculadas na mesma notação e com os mesmos campos incidentes de *Bohren & Huffman* [1], livro esse que usamos como base para a maioria de nossos cálculos. Assim, grande parte dos casos limites pode ser recuperada e conferida na Ref. [1]. Enfatizamos que as Seções deste Apêndice devem ser lidas como uma extensão dos Capítulos aos quais elas se referenciam, uma vez que muitas funções, embora com diferentes significados e definições, sejam definidas ao longo da tese pelos mesmos símbolos.

D.1 Geometria esférica

Na geometria esférica (r, θ, ϕ) , seguindo o método dos harmônicos esféricos vetoriais, a equação de Helmholtz escalar a ser resolvida é

$$\left[\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + (k_q r)^2 \right] \psi(r, \theta, \phi) = 0 ,$$

cujas soluções linearmente independentes, para o caso da esfera, são dadas por

$$\psi_{e1n}(r, \cos \theta, \phi) = \cos(1\phi) P_n^{(1)}(\cos \theta) z_n(k_q r) , \quad (\text{D.40})$$

$$\psi_{o1n}(r, \cos \theta, \phi) = \sin(1\phi) P_n^{(1)}(\cos \theta) z_n(k_q r) , \quad (\text{D.41})$$

onde $P_n^{(1)}(\cos \theta)$ é a função associada de Legendre de primeira ordem e $z_n(k_q r)$ é uma função esférica de Bessel (j_n), Neumann (y_n) ou Hankel (h_n) e deve ser escolhida de acordo com a região em que se consideram os campos [ondas estacionárias (interior da esfera) ou propagantes (ondas espalhadas)]. Para o interior do centro espalhador, por exemplo, escolhem-se $z_n = j_n$ para a região que inclui a origem do sistema de coordenadas e uma combinação linear de funções geradas por $z_n = j_n$ e $z_n = y_n$ para regiões que não incluem a origem (pois a função de Neumann diverge nela). Por outro lado, para os campos espalhados, escolhe-se entre $z_n = h_n^{(1)} = j_n + iy_n$ ou $z_n = h_n^{(2)} = j_n - iy_n$, a depender se o *ansatz* temporal é $e^{-i\omega t}$ ou $e^{+i\omega t}$, respectivamente, de forma a garantir que na região de campo distante as ondas espalhadas estejam se afastando do centro espalhador para $\omega t > 0$.

Em nossos cálculos, o *ansatz* temporal é $e^{-i\omega t}$ e o campo incidente é $\mathbf{E}_i(\mathbf{r}) = E_0 e^{ikr \cos \theta} \hat{\mathbf{x}}$, com $\hat{\mathbf{x}} = \sin \theta \cos \phi \hat{\mathbf{r}} + \cos \theta \cos \phi \hat{\boldsymbol{\theta}} - \sin \phi \hat{\boldsymbol{\phi}}$. Em coordenadas esféricas, as componentes da expansão da onda plana ($\mathbf{E}_i, \mathbf{H}_i$) em ondas parciais esféricas são:

$$\begin{aligned} E_{ir} &= \frac{-i \cos \phi \sin \theta}{\rho^2} \sum_{n=1}^{\infty} E_n \psi_n(\rho) n(n+1) \pi_n , \\ E_{i\theta} &= \frac{\cos \phi}{\rho} \sum_{n=1}^{\infty} E_n [\pi_n \psi_n(\rho) - i \tau_n \psi'_n(\rho)] , \\ E_{i\phi} &= \frac{\sin \phi}{\rho} \sum_{n=1}^{\infty} E_n [i \pi_n \psi'_n(\rho) - \tau_n \psi_n(\rho)] ; \\ H_{ir} &= \frac{k}{\omega \mu} \tan \phi E_{ir} , \\ H_{i\theta} &= \frac{k}{\omega \mu} \tan \phi E_{i\theta} , \\ H_{i\phi} &= \frac{-k}{\omega \mu} \cot \phi E_{i\phi} , \end{aligned}$$

onde $\rho = kr$, $E_n = i^n E_0 (2n+1)/[n(n+1)]$ e $\psi_n(\rho) = \rho j_n(\rho)$ é a função de Riccati-Bessel. As funções angulares são $\pi_n = P_n^{(1)}(\cos \theta)/\sin \theta$ e $\tau_n = d[P_n^{(1)}(\cos \theta)]/d\theta$. A seguir, fornecemos as componentes das expansões dos campos internos e espalhados para as duas geometrias de centros espalhadores esféricos que abordamos.

D.1.1 Esferas concêntricas

As componentes dos campos eletromagnéticos e demais funções desta Seção fazem referência aos Capítulos 3, 4 e 5.

D.1.1.1 Campos internos e espalhados

- *Campo eletromagnético interno* ($\mathbf{E}_q, \mathbf{H}_q$), regiões ($0 \leq r \leq a$) para $q = 1$ e ($a \leq r \leq b$) para $q = 2$:

$$E_{qr} = - \frac{\imath \cos \phi \sin \theta}{\rho_q^2} \sum_{n=1}^{\infty} E_n n(n+1) \pi_n \left\{ \delta_{1q} d_n \psi_n(\rho_q) + \delta_{2q} [g_n \psi_n(\rho_q) - w_n \chi_n(\rho_q)] \right\}, \quad (\text{D.42})$$

$$E_{q\theta} = \frac{\cos \phi}{\rho_q} \sum_{n=1}^{\infty} E_n \left\{ \delta_{1q} [c_n \pi_n \psi_n(\rho_q) - \imath d_n \tau_n \psi'_n(\rho_q)] + \delta_{2q} \pi_n [f_n \psi_n(\rho_q) - v_n \chi_n(\rho_q)] - \imath \delta_{2q} \tau_n [g_n \psi'_n(\rho_q) - w_n \chi'_n(\rho_q)] \right\}, \quad (\text{D.43})$$

$$E_{q\phi} = \frac{\sin \phi}{\rho_q} \sum_{n=1}^{\infty} E_n \left\{ \delta_{1q} [\imath d_n \pi_n \psi'_n(\rho_q) - c_n \tau_n \psi_n(\rho_q)] + \imath \delta_{2q} \pi_n [g_n \psi'_n(\rho_q) - w_n \chi'_n(\rho_q)] - \delta_{2q} \tau_n [f_n \psi_n(\rho_q) - v_n \chi_n(\rho_q)] \right\}, \quad (\text{D.44})$$

$$H_{qr} = - \frac{\imath k_q \sin \phi \sin \theta}{\omega \mu_q \rho_q^2} \sum_{n=1}^{\infty} E_n n(n+1) \pi_n \left\{ \delta_{1q} c_n \psi_n(\rho_q) + \delta_{2q} [f_n \psi_n(\rho_q) - v_n \chi_n(\rho_q)] \right\}, \quad (\text{D.45})$$

$$H_{q\theta} = \frac{k_q \sin \phi}{\omega \mu_q \rho_q} \sum_{n=1}^{\infty} E_n \left\{ \delta_{1q} [d_n \pi_n \psi_n(\rho_q) - \imath c_n \tau_n \psi'_n(\rho_q)] + \delta_{2q} \pi_n [g_n \psi_n(\rho_q) - w_n \chi_n(\rho_q)] - \imath \delta_{2q} \tau_n [f_n \psi'_n(\rho_q) - v_n \chi'_n(\rho_q)] \right\}, \quad (\text{D.46})$$

$$H_{q\phi} = \frac{k_q \cos \phi}{\omega \mu_q \rho_q} \sum_{n=1}^{\infty} E_n \left\{ \delta_{1q} [d_n \tau_n \psi_n(\rho_q) - \imath c_n \pi_n \psi'_n(\rho_q)] + \delta_{2q} \tau_n [g_n \psi_n(\rho_q) - w_n \chi_n(\rho_q)] - \imath \delta_{2q} \pi_n [f_n \psi'_n(\rho_q) - v_n \chi'_n(\rho_q)] \right\}, \quad (\text{D.47})$$

onde $\rho_q = k_q r$, com k_q sendo o número de onda no meio (ϵ_q, μ_q) , $\delta_{qq'}$ é o delta de Kronecker e as funções radiais $\psi_n(\rho_q) = \rho_q j_n(\rho_q)$ e $\chi_n(\rho_q) = -\rho_q y_n(\rho_q)$ são

as funções de Riccati-Bessel e Riccati-Neumann, respectivamente.

- *Campo eletromagnético espalhado* ($\mathbf{E}_s, \mathbf{H}_s$), região ($b \leq r$):

$$\begin{aligned}
 E_{sr} &= \frac{\imath \cos \phi \sin \theta}{\rho^2} \sum_{n=1}^{\infty} E_n a_n \xi_n(\rho) n(n+1) \pi_n , \\
 E_{s\theta} &= \frac{\cos \phi}{\rho} \sum_{n=1}^{\infty} E_n [\imath a_n \tau_n \xi'_n(\rho) - b_n \tau_n \xi_n(\rho)] , \\
 E_{s\phi} &= \frac{\sin \phi}{\rho} \sum_{n=1}^{\infty} E_n [b_n \tau_n \xi_n(\rho) - \imath a_n \pi_n \xi'_n(\rho)] ; \\
 H_{sr} &= \frac{\imath k}{\omega \mu} \frac{\sin \phi \sin \theta}{\rho^2} \sum_{n=1}^{\infty} E_n b_n \xi_n(\rho) n(n+1) \pi_n , \\
 H_{s\theta} &= \frac{k}{\omega \mu} \frac{\sin \phi}{\rho} \sum_{n=1}^{\infty} E_n [\imath b_n \tau_n \xi'_n(\rho) - a_n \pi_n \xi_n(\rho)] , \\
 H_{s\phi} &= \frac{k}{\omega \mu} \frac{\cos \phi}{\rho} \sum_{n=1}^{\infty} E_n [\imath b_n \pi_n \xi'_n(\rho) - a_n \tau_n \xi_n(\rho)] ,
 \end{aligned}$$

onde $\xi_n(\rho) = \rho h_n^{(1)}(\rho)$ é a função de Ricatti-Hankel.

D.1.1.2 Condições de contorno

Impondo a continuidade das componentes tangenciais dos campos elétricos e magnéticos, Eq. (2.2), nas interfaces $r = a$ e $r = b$, obtemos que os coeficientes de

Aden-Kerker devem necessariamente satisfazer o sistema de equações:

$$\left\{ \begin{array}{l} m_2 \xi'_n(y) a_n + \psi'_n(m_2 y) g_n - \chi'_n(m_2 y) w_n = m_2 \psi'_n(y) , \\ m_2 \xi_n(y) b_n + \psi_n(m_2 y) f_n - \chi_n(m_2 y) v_n = m_2 \psi_n(y) , \\ m_2 \xi_n(y) a_n + \tilde{m}_2 \psi_n(m_2 y) g_n - \tilde{m}_2 \chi_n(m_2 y) w_n = m_2 \psi_n(y) , \\ m_2 \xi'_n(y) b_n + \tilde{m}_2 \psi'_n(m_2 y) f_n - \tilde{m}_2 \chi'_n(m_2 y) v_n = m_2 \psi'_n(y) , \\ m_2 \psi_n(m_1 x) c_n - m_1 \psi_n(m_2 x) f_n + m_1 \chi_n(m_2 x) v_n = 0 , \\ m_2 \psi'_n(m_1 x) d_n - m_1 \psi'_n(m_2 x) g_n + m_1 \chi'_n(m_2 x) w_n = 0 , \\ m_2 \tilde{m}_1 \psi'_n(m_1 x) c_n - m_1 \tilde{m}_2 \psi'_n(m_2 x) f_n + m_1 \tilde{m}_2 \chi'_n(m_2 x) v_n = 0 , \\ m_2 \tilde{m}_1 \psi_n(m_1 x) d_n - m_1 \tilde{m}_2 \psi_n(m_2 x) g_n + m_1 \tilde{m}_2 \chi_n(m_2 x) w_n = 0 , \end{array} \right.$$

onde $x = ka$ e $y = kb$ são os parâmetros de tamanho das esferas interior e exterior, respectivamente, e $m_q = \sqrt{\epsilon_q/\epsilon_0} \sqrt{\mu_q/\mu_0}$ e $\tilde{m}_q = \sqrt{\epsilon_q/\epsilon_0} / \sqrt{\mu_q/\mu_0}$ são os índices de refração e impedância, $q = \{1, 2\}$.

D.1.2 Esferas opticamente ativas

As componentes dos campos eletromagnéticos e demais funções desta Seção fazem referência ao Capítulo 6.

D.1.2.1 Campos internos e espalhados

- *Campo eletromagnético interno* ($\mathbf{E}_1, \mathbf{H}_1$), região ($0 \leq r \leq a$):

$$E_{1r} = \sum_{n=1}^{\infty} E_n \sin \theta n(n+1) \pi_n \times \left\{ \frac{\psi_n(\rho_L)}{\rho_L^2} [f_{on} \sin \phi + f_{en} \cos \phi] - \alpha_R \frac{\psi_n(\rho_R)}{\rho_R^2} [g_{on} \sin \phi + g_{en} \cos \phi] \right\} , \quad (\text{D.48})$$

$$E_{1\theta} = \sum_{n=1}^{\infty} E_n \left\{ \frac{\cos \phi}{\rho_L} [f_{on} \pi_n \psi_n(\rho_L) + f_{en} \tau_n \psi'_n(\rho_L)] \right.$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{\sin \phi}{\rho_L} [f_{on}\tau_n\psi'_n(\rho_L) - f_{en}\pi_n\psi_n(\rho_L)] + \alpha_R \frac{\cos \phi}{\rho_R} [g_{on}\pi_n\psi_n(\rho_R) - g_{en}\tau_n\psi'_n(\rho_R)] \\
& - \alpha_R \frac{\sin \phi}{\rho_R} [g_{on}\tau_n\psi'_n(\rho_R) + g_{en}\pi_n\psi_n(\rho_R)] \Bigg\} , \tag{D.49}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
E_{1\phi} = \sum_{n=1}^{\infty} E_n \Bigg\{ & \frac{\cos \phi}{\rho_L} [f_{on}\pi_n\psi'_n(\rho_L) - f_{en}\tau_n\psi_n(\rho_L)] \\
& - \frac{\sin \phi}{\rho_L} [f_{on}\tau_n\psi_n(\rho_L) + f_{en}\pi_n\psi'_n(\rho_L)] - \alpha_R \frac{\cos \phi}{\rho_R} [g_{on}\pi_n\psi'_n(\rho_R) + g_{en}\tau_n\psi_n(\rho_R)] \\
& - \alpha_R \frac{\sin \phi}{\rho_R} [g_{on}\tau_n\psi_n(\rho_R) - g_{en}\pi_n\psi'_n(\rho_R)] \Bigg\} , \tag{D.50}
\end{aligned}$$

onde $\rho_q = k_q r$, com q podendo ser tanto L quanto R. O campo magnético correspondente $\mathbf{H}_1$ é obtido das equações Eqs. (D.48)–(D.50) pelas substituições de $(f_n, \alpha_R g_n)$ por $(\alpha_L f_n, g_n)$.

- *Campo eletromagnético espalhado* ($\mathbf{E}_s, \mathbf{H}_s$), região ($a \leq r$):

$$\begin{aligned}
E_{sr} &= \frac{i \sin \theta}{\rho^2} \sum_{n=1}^{\infty} E_n \xi_n(\rho) n(n+1) (a_n \cos \phi - d_n \sin \phi) \pi_n , \\
E_{s\theta} &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{E_n}{\rho} \{ \cos \phi [i a_n \tau_n \xi'_n(\rho) - b_n \tau_n \xi_n(\rho)] - \sin \phi [c_n \pi_n \xi_n(\rho) + i d_n \tau_n \xi'_n(\rho)] \} , \\
E_{s\phi} &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{E_n}{\rho} \{ \sin \phi [-i a_n \pi_n \xi'_n(\rho) + b_n \tau_n \xi_n(\rho)] - \cos \phi [c_n \tau_n \xi_n(\rho) + i d_n \pi_n \xi'_n(\rho)] \} ; \\
H_{sr} &= \frac{ik}{\omega \mu} \frac{\sin \theta}{\rho^2} \sum_{n=1}^{\infty} E_n \xi_n(\rho) n(n+1) (b_n \sin \phi - c_n \cos \phi) \pi_n , \\
H_{s\theta} &= \frac{k}{\omega \mu} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{E_n}{\rho} \{ \sin \phi [-a_n \pi_n \xi_n(\rho) + i b_n \tau_n \xi'_n(\rho)] - \cos \phi [i c_n \tau_n \xi'_n(\rho) - d_n \pi_n \xi_n(\rho)] \} , \\
H_{s\phi} &= \frac{k}{\omega \mu} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{E_n}{\rho} \{ \cos \phi [-a_n \tau_n \xi_n(\rho) + i b_n \pi_n \xi'_n(\rho)] + \sin \phi [i c_n \pi_n \xi'_n(\rho) - d_n \tau_n \xi_n(\rho)] \} ,
\end{aligned}$$

onde $\rho = kr$ e $\xi_n(\rho) = \rho h_n^{(1)}(\rho)$ é a função de Riccati-Hankel de primeiro tipo.

D.1.2.2 Condições de contorno

Das condições de contorno – continuidade das componentes tangenciais dos campos, Eq. (2.2) –, os coeficientes das esferas quirais devem necessariamente

satisfazer o sistema de equações:

$$\left\{ \begin{array}{l}
 \imath \xi'_n(x) a_n - \xi_n(x) b_n - \frac{\psi_n(y_L)}{m_L} f_{on} - \frac{\psi'_n(y_L)}{m_L} f_{en} - \alpha_R \left[\frac{\psi_n(y_R)}{m_R} g_{on} - \frac{\psi'_n(y_R)}{m_R} g_{en} \right] \\
 \hspace{15em} = -\psi_n(x) + \imath \psi'_n(x) , \\
 \imath \xi'_n(x) c_n + \xi_n(x) d_n - \imath \tilde{m} \left[\frac{\psi_n(y_L)}{m_L} f_{on} + \frac{\psi'_n(y_L)}{m_L} f_{en} \right] + Z_0 \left[\frac{\psi_n(y_R)}{m_R} g_{on} - \frac{\psi'_n(y_R)}{m_R} g_{en} \right] = 0 , \\
 \imath \xi'_n(x) a_n + \xi_n(x) b_n + \frac{\psi_n(y_L)}{m_L} f_{on} - \frac{\psi'_n(y_L)}{m_L} f_{en} + \alpha_R \left[\frac{\psi_n(y_R)}{m_R} g_{on} + \frac{\psi'_n(y_R)}{m_R} g_{en} \right] \\
 \hspace{15em} = \psi_n(x) + \imath \psi'_n(x) , \\
 \imath \xi'_n(x) c_n - \xi_n(x) d_n + \imath \tilde{m} \left[\frac{\psi_n(y_L)}{m_L} f_{on} - \frac{\psi'_n(y_L)}{m_L} f_{en} \right] - Z_0 \left[\frac{\psi_n(y_R)}{m_R} g_{on} + \frac{\psi'_n(y_R)}{m_R} g_{en} \right] = 0 , \\
 \xi_n(x) a_n + \imath \xi'_n(x) b_n + \imath \tilde{m} \left[\frac{\psi'_n(y_L)}{m_L} f_{on} + \frac{\psi_n(y_L)}{m_L} f_{en} \right] + Z_0 \left[\frac{\psi'_n(y_R)}{m_R} g_{on} - \frac{\psi_n(y_R)}{m_R} g_{en} \right] \\
 \hspace{15em} = \psi_n(x) + \imath \psi'_n(x) , \\
 \xi_n(x) c_n + \imath \xi'_n(x) d_n + \frac{\psi'_n(y_L)}{m_L} f_{on} - \frac{\psi_n(y_L)}{m_L} f_{en} - \alpha_R \left[\frac{\psi'_n(y_R)}{m_R} g_{on} + \frac{\psi_n(y_R)}{m_R} g_{en} \right] = 0 , \\
 \xi_n(x) a_n - \imath \xi'_n(x) b_n - \imath \tilde{m} \left[\frac{\psi'_n(y_L)}{m_L} f_{on} - \frac{\psi_n(y_L)}{m_L} f_{en} \right] - Z_0 \left[\frac{\psi'_n(y_R)}{m_R} g_{on} + \frac{\psi_n(y_R)}{m_R} g_{en} \right] \\
 \hspace{15em} = \psi_n(x) - \imath \psi'_n(x) , \\
 \xi_n(x) c_n - \imath \xi'_n(x) d_n - \frac{\psi'_n(y_L)}{m_L} f_{on} - \frac{\psi_n(y_L)}{m_L} f_{en} + \alpha_R \left[\frac{\psi'_n(y_R)}{m_R} g_{on} - \frac{\psi_n(y_R)}{m_R} g_{en} \right] = 0 ,
 \end{array} \right.$$

onde $Z_0 = \sqrt{\mu_0/\epsilon_0}$, $\alpha_R = -\imath \sqrt{\mu_1/\epsilon_1}$ e usamos os ângulos de espalhamento $\theta = 0^\circ$ e $\theta = 180^\circ$ para obtermos as oito equações independentes, sendo $\pi_n(1) = \tau_n(1) = n(n+1)/2$, $\pi_n(-1) = (-1)^{n-1} \pi_n(1)$ e $\tau_n(-1) = (-1)^n \tau_n(1)$. Para as esferas não opticamente ativas, um ângulo de espalhamento é suficiente para obter um sistema de equações possível e determinado.

D.2 Geometria cilíndrica

Na geometria cilíndrica (r, ϕ, z) , seguindo o método dos harmônicos cilíndricos vetoriais, a equação de Helmholtz escalar a ser resolvida é

$$\left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} + k_q^2 \right] \psi(r, \phi, z) = 0 , \quad (D.51)$$

com soluções da forma

$$\psi_n(r, \phi, z) = Z_n(r\sqrt{k_q^2 - k^2 \cos^2 \zeta}) e^{i(n\phi - kz \cos \zeta)} , \quad (\text{D.52})$$

onde ζ é o ângulo entre a onda incidente e o eixo do cilindro e Z_n é uma função esférica de Bessel (J_n), Neumann (Y_n) ou Hankel (H_n), a depender das condições de contorno.

Para o campo incidente, analisamos duas situações distintas e linearmente independentes: as polarizações TM ($\mathbf{E}_i \parallel xz$) e TE ($\mathbf{E}_i \perp xz$), as quais são indicadas pelos índices (I) e (II), respectivamente. O *ansatz* temporal é $e^{-i\omega t}$ e as componentes dos campos incidentes ($\mathbf{E}_i, \mathbf{H}_i$), já expandidas em ondas parciais cilíndricas, são:

$$\begin{aligned} E_{ir}^{(I)} &= -i \sum_{n=-\infty}^{\infty} \cos \zeta J'_n(\rho) \varphi_n(\phi, z) , \\ E_{i\phi}^{(I)} &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} n \cos \zeta \frac{J_n(\rho)}{\rho} \varphi_n(\phi, z) , \\ E_{iz}^{(I)} &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} \rho \frac{J_n(\rho)}{kr} \varphi_n(\phi, z) , \\ H_{ir}^{(I)} &= \frac{k}{\omega\mu} \sum_{n=-\infty}^{\infty} n \frac{J_n(\rho)}{\rho} \varphi_n(\phi, z) , \\ H_{i\phi}^{(I)} &= i \frac{k}{\omega\mu} \sum_{n=-\infty}^{\infty} J'_n(\rho) \varphi_n(\phi, z) , \\ H_{iz}^{(I)} &= 0 ; \\ E_{ir}^{(II)} &= -i \sum_{n=-\infty}^{\infty} n \frac{J_n(\rho)}{\rho} \varphi_n(\phi, z) , \\ E_{i\phi}^{(II)} &= i \sum_{n=-\infty}^{\infty} J'_n(\rho) \varphi_n(\phi, z) , \\ E_{iz}^{(II)} &= 0 , \\ H_{ir}^{(II)} &= i \frac{k}{\omega\mu} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \cos \zeta J'_n(\rho) \varphi_n(\phi, z) , \\ H_{i\phi}^{(II)} &= -\frac{k}{\omega\mu} \sum_{n=-\infty}^{\infty} n \cos \zeta \frac{J_n(\rho)}{\rho} \varphi_n(\phi, z) , \\ H_{iz}^{(II)} &= -\frac{k}{\omega\mu} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \rho \frac{J_n(\rho)}{kr} \varphi_n(\phi, z) , \end{aligned}$$

onde $\rho = kr \sin \zeta$ e $\varphi_n(\phi, z) = E_0(-\imath)^n e^{\imath(n\phi - kz \cos \zeta)}$

D.2.1 Cilindros concêntricos

As componentes dos campos eletromagnéticos e demais funções desta Seção fazem referência aos Capítulos 7 e 8.

D.2.1.1 Campos internos e espalhados

• *Campo eletromagnético interno* ($\mathbf{E}_q, \mathbf{H}_q$), regiões ($0 \leq r \leq a$) para $q = 1$ e ($a \leq r \leq b$) para $q = 2$:

Para o modo TM, as componentes cilíndricas do campo elétrico $\mathbf{E}_1^{(I)}$ dentro do cilindro (ϵ_1, μ_1) são:

$$E_{1r}^{(I)} = \imath \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left[d_n^{(I)} n \frac{J_n(\rho_1)}{\rho_1} - c_n^{(I)} \frac{\cos \zeta}{m_1} J'_n(\rho_1) \right] \varphi_n(\phi, z), \quad (\text{D.53})$$

$$E_{1\phi}^{(I)} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left[c_n^{(I)} \frac{\cos \zeta}{m_1} n \frac{J_n(\rho_1)}{\rho_1} - d_n^{(I)} J'_n(\rho_1) \right] \varphi_n(\phi, z), \quad (\text{D.54})$$

$$E_{1z}^{(I)} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n^{(I)} \frac{\rho_1}{m_1 k r} J_n(\rho_1) \varphi_n(\phi, z), \quad (\text{D.55})$$

onde $k = \omega \epsilon_0 \mu_0$ é o número de onda incidente, J_n é a função de Bessel cilíndrica e $\varphi_n(\phi, z) = E_0(-\imath)^n e^{\imath(n\phi - kz \cos \zeta)}$, com E_0 sendo a amplitude do campo elétrico incidente.

Dentro da casca cilíndrica (ϵ_2, μ_2), o campo elétrico correspondente $\mathbf{E}_2^{(I)}$ é expresso em coordenadas cilíndricas como se segue:

$$E_{2r}^{(I)} = \imath \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left[g_n^{(I)} n \frac{J_n(\rho_2)}{\rho_2} - f_n^{(I)} \frac{\cos \zeta}{m_2} J'_n(\rho_2) + w_n^{(I)} n \frac{Y_n(\rho_2)}{\rho_2} - v_n^{(I)} \frac{\cos \zeta}{m_2} Y'_n(\rho_2) \right] \varphi_n(\phi, z), \quad (\text{D.56})$$

$$E_{2\phi}^{(I)} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left[f_n^{(I)} \frac{\cos \zeta}{m_2} n \frac{J_n(\rho_2)}{\rho_2} - g_n^{(I)} J'_n(\rho_2) + v_n^{(I)} \frac{\cos \zeta}{m_2} n \frac{Y_n(\rho_2)}{\rho_2} - w_n^{(I)} Y'_n(\rho_2) \right] \varphi_n(\phi, z), \quad (\text{D.57})$$

$$E_{2z}^{(I)} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{\rho_2}{m_2 k r} [f_n^{(I)} J_n(\rho_2) + v_n^{(I)} Y_n(\rho_2)] \varphi_n(\phi, z), \quad (\text{D.58})$$

onde Y_n é a função cilíndrica de Neumann. A dependência radial nas Eqs. (D.53)–(D.58) está em $\rho_q = kr\sqrt{m_q^2 - \cos^2 \zeta}$, com $m_q = \sqrt{\epsilon_q/\epsilon_0}\sqrt{\mu_q/\mu_0}$ sendo o índice de refração relativo do meio $q = \{1, 2\}$, Fig. 7.1, com respeito ao meio circundante (ϵ_0, μ_0) [108].

Os campos magnéticos correspondentes $\mathbf{H}_q^{(I)}$ são obtidos a partir das Eqs. (D.53)–(D.58) trocando-se (c_n, d_n) por $(p_1 d_n, p_1 c_n)$, (f_n, g_n) por $(p_2 g_n, p_2 f_n)$ e (v_n, w_n) por $(p_2 w_n, p_2 v_n)$, onde $p_q = -i\sqrt{\epsilon_q/\mu_q}$. Ainda, a polarização TE (caso II) é prontamente obtida pela multiplicação do lado direito das Eqs. (D.53)–(D.58) por $(-i)$ e trocando-se os coeficientes TM pelos correspondentes TE.

- *Campo eletromagnético espalhado* ($\mathbf{E}_s, \mathbf{H}_s$), região ($b \leq r$):

$$\begin{aligned}
E_{sr}^{(I)} &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left[i b_n^{(I)} \cos \zeta \frac{H_n'^{(1)}(\rho)}{\rho} + a_n^{(I)} n \frac{H_n^{(1)}(\rho)}{\rho} \right] \varphi_n(\phi, z) , \\
E_{s\phi}^{(I)} &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left[i a_n^{(I)} H_n'^{(1)}(\rho) - b_n^{(I)} \cos \zeta n \frac{H_n^{(1)}(\rho)}{\rho} \right] \varphi_n(\phi, z) , \\
E_{sz}^{(I)} &= - \sum_{n=-\infty}^{\infty} b_n^{(I)} \rho \frac{H_n^{(1)}(\rho)}{kr} \varphi_n(\phi, z) , \\
H_{sr}^{(I)} &= \frac{k}{\omega\mu} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left[i a_n^{(I)} \cos \zeta H_n'^{(1)}(\rho) - b_n^{(I)} n \frac{H_n^{(1)}(\rho)}{\rho} \right] \varphi_n(\phi, z) , \\
H_{s\phi}^{(I)} &= - \frac{k}{\omega\mu} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left[a_n^{(I)} \cos \zeta n \frac{H_n^{(1)}(\rho)}{\rho} + i b_n^{(I)} H_n'^{(1)}(\rho) \right] \varphi_n(\phi, z) , \\
H_{sz}^{(I)} &= - \frac{k}{\omega\mu} \sum_{n=-\infty}^{\infty} a_n^{(I)} \rho \frac{H_n^{(1)}(\rho)}{kr} \varphi_n(\phi, z) ; \\
E_{sr}^{(II)} &= - \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left[i b_n^{(II)} \cos \zeta \frac{H_n'^{(1)}(\rho)}{\rho} + a_n^{(II)} n \frac{H_n^{(1)}(\rho)}{\rho} \right] \varphi_n(\phi, z) , \\
E_{s\phi}^{(II)} &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left[b_n^{(II)} \cos \zeta n \frac{H_n^{(1)}(\rho)}{\rho} - i a_n^{(II)} H_n'^{(1)}(\rho) \right] \varphi_n(\phi, z) , \\
E_{sz}^{(II)} &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} b_n^{(II)} \rho \frac{H_n^{(1)}(\rho)}{kr} \varphi_n(\phi, z) , \\
H_{sr}^{(II)} &= \frac{k}{\omega\mu} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left[b_n^{(II)} n \frac{H_n^{(1)}(\rho)}{\rho} - i a_n^{(II)} \cos \zeta H_n'^{(1)}(\rho) \right] \varphi_n(\phi, z) , \\
H_{s\phi}^{(II)} &= \frac{k}{\omega\mu} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left[i b_n^{(II)} H_n'^{(1)}(\rho) + a_n^{(II)} \cos \zeta n \frac{H_n^{(1)}(\rho)}{\rho} \right] \varphi_n(\phi, z) ,
\end{aligned}$$

$$H_{sz}^{(\text{II})} = \frac{k}{\omega\mu} \sum_{n=-\infty}^{\infty} a_n^{(\text{II})} \rho \frac{H_n^{(1)}(\rho)}{kr} \varphi_n(\phi, z) .$$

D.2.1.2 Condições de contorno e funções auxiliares

Explicitamente, aplicando as condições de contorno da Eq. (2.2) (continuidade das componentes tangenciais dos campos), temos para a polarização TM:

$$\left\{ \begin{array}{l} \imath m_2 \eta \xi H_n'^{(1)}(\xi) a_n^{(\text{I})} - m_2 \eta n \cos \zeta H_n^{(1)}(\xi) b_n^{(\text{I})} - \xi n \cos \zeta J_n(\eta) f_n^{(\text{I})} \\ \quad + m_2 \eta \xi J_n'(\eta) g_n^{(\text{I})} - \xi n \cos \zeta Y_n(\eta) v_n^{(\text{I})} + m_2 \eta \xi Y_n'(\eta) w_n^{(\text{I})} = -m_2 \eta n \cos \zeta J_n(\xi) , \\ m_2 \xi H_n^{(1)}(\xi) b_n^{(\text{I})} + \eta J_n(\eta) f_n^{(\text{I})} + \eta Y_n(\eta) v_n^{(\text{I})} = m_2 \xi J_n(\xi) , \\ m_2 \eta n \cos \zeta H_n^{(1)}(\xi) a_n^{(\text{I})} + \imath m_2 \eta \xi H_n'^{(1)}(\xi) b_n^{(\text{I})} + \imath m_2 \tilde{m}_2 \eta \xi J_n'(\eta) f_n^{(\text{I})} \\ \quad - \imath \tilde{m}_2 \xi n \cos \zeta J_n(\eta) g_n^{(\text{I})} + \imath m_2 \tilde{m}_2 \eta \xi Y_n'(\eta) v_n^{(\text{I})} - \imath \tilde{m}_2 \xi n \cos \zeta Y_n(\eta) w_n^{(\text{I})} = \imath m_2 \eta \xi J_n'(\xi) , \\ m_2 \xi H_n^{(1)}(\xi) a_n^{(\text{I})} - \imath \tilde{m}_2 \eta J_n(\eta) g_n^{(\text{I})} - \imath \tilde{m}_2 \eta Y_n(\eta) w_n^{(\text{I})} = 0 , \\ m_2 \eta_2 n \cos \zeta J_n(\eta_1) c_n^{(\text{I})} - m_1 m_2 \eta_1 \eta_2 J_n'(\eta_1) d_n^{(\text{I})} - m_1 \eta_1 n \cos \zeta J_n(\eta_2) f_n^{(\text{I})} \\ \quad + m_1 m_2 \eta_1 \eta_2 J_n'(\eta_2) g_n^{(\text{I})} - m_1 \eta_1 n \cos \zeta Y_n(\eta_2) v_n^{(\text{I})} + m_1 m_2 \eta_1 \eta_2 Y_n'(\eta_2) w_n^{(\text{I})} = 0 , \\ m_2 \eta_1 J_n(\eta_1) c_n^{(\text{I})} - m_1 \eta_2 J_n(\eta_2) f_n^{(\text{I})} - m_1 \eta_2 Y_n(\eta_2) v_n^{(\text{I})} = 0 , \\ m_1 \tilde{m}_1 m_2 \eta_1 \eta_2 J_n'(\eta_1) c_n^{(\text{I})} - \tilde{m}_1 m_2 \eta_2 n \cos \zeta J_n(\eta_1) d_n^{(\text{I})} - m_1 m_2 \tilde{m}_1 \eta_1 \eta_2 J_n'(\eta_2) f_n^{(\text{I})} \\ \quad + m_1 \tilde{m}_2 \eta_1 n \cos \zeta J_n(\eta_2) g_n^{(\text{I})} - m_1 m_2 \tilde{m}_2 \eta_1 \eta_2 Y_n'(\eta_2) v_n^{(\text{I})} + m_1 \tilde{m}_2 \eta_1 n \cos \zeta Y_n(\eta_2) w_n^{(\text{I})} = 0 , \\ \tilde{m}_1 m_2 \eta_1 J_n(\eta_1) d_n^{(\text{I})} - m_1 \tilde{m}_2 \eta_2 J_n(\eta_2) g_n^{(\text{I})} - m_1 \tilde{m}_2 \eta_2 Y_n(\eta_2) w_n^{(\text{I})} = 0 . \end{array} \right.$$

Similarmente, para o modo TE obtemos:

$$\left\{ \begin{array}{l} m_2 \eta \xi H_n^{(1)}(\xi) a_n^{(\text{II})} + \imath m_2 \eta n \cos \zeta H_n^{(1)}(\xi) b_n^{(\text{II})} - \xi n \cos \zeta J_n(\eta) f_n^{(\text{II})} \\ \quad + m_2 \eta \xi J_n'(\eta) g_n^{(\text{II})} - \xi n \cos \zeta Y_n(\eta) v_n^{(\text{II})} + m_2 \eta \xi Y_n'(\eta) w_n^{(\text{II})} = m_2 \eta \xi J_n'(\xi) , \\ \imath m_2 \xi H_n^{(1)}(\xi) b_n^{(\text{II})} - \eta J_n(\eta) f_n^{(\text{II})} - \eta Y_n(\eta) v_n^{(\text{II})} = 0 , \\ m_2 \eta n \cos \zeta H_n^{(1)}(\xi) a_n^{(\text{II})} + \imath m_2 \eta \xi H_n^{(1)}(\xi) b_n^{(\text{II})} - m_2 \tilde{m}_2 \eta \xi J_n'(\eta) f_n^{(\text{II})} \\ \quad + \tilde{m}_2 \xi n \cos \zeta J_n(\eta) g_n^{(\text{II})} - m_2 \tilde{m}_2 \eta \xi Y_n'(\eta) v_n^{(\text{II})} + \tilde{m}_2 \xi n \cos \zeta Y_n(\eta) w_n^{(\text{II})} = m_2 \eta n \cos \zeta J_n(\xi) , \\ m_2 \xi H_n^{(1)}(\xi) a_n^{(\text{II})} + \tilde{m}_2 \eta J_n(\eta) g_n^{(\text{II})} + \tilde{m}_2 \eta Y_n(\eta) w_n^{(\text{II})} = m_2 \xi J_n(\xi) , \\ m_2 \eta_2 n \cos \zeta J_n(\eta_1) c_n^{(\text{II})} - m_1 m_2 \eta_1 \eta_2 J_n'(\eta_1) d_n^{(\text{II})} - m_1 \eta_1 n \cos \zeta J_n(\eta_2) f_n^{(\text{II})} \\ \quad + m_1 m_2 \eta_1 \eta_2 J_n'(\eta_2) g_n^{(\text{II})} - m_1 \eta_1 n \cos \zeta Y_n(\eta_2) v_n^{(\text{II})} + m_1 m_2 \eta_1 \eta_2 Y_n'(\eta_2) w_n^{(\text{II})} = 0 , \\ m_2 \eta_1 J_n(\eta_1) c_n^{(\text{II})} - m_1 \eta_2 J_n(\eta_2) f_n^{(\text{II})} - m_1 \eta_2 Y_n(\eta_2) v_n^{(\text{II})} = 0 , \\ m_1 \tilde{m}_1 m_2 \eta_1 \eta_2 J_n'(\eta_1) c_n^{(\text{II})} - \tilde{m}_1 m_2 \eta_2 n \cos \zeta J_n(\eta_1) d_n^{(\text{II})} - m_1 m_2 \tilde{m}_2 \eta_1 \eta_2 J_n'(\eta_2) f_n^{(\text{II})} \\ \quad + m_1 \tilde{m}_2 \eta_1 n \cos \zeta J_n(\eta_2) g_n^{(\text{II})} - m_1 m_2 \tilde{m}_2 \eta_1 \eta_2 Y_n'(\eta_2) v_n^{(\text{II})} + m_1 \tilde{m}_2 \eta_1 n \cos \zeta Y_n(\eta_2) w_n^{(\text{II})} = 0 , \\ \tilde{m}_1 m_2 \eta_1 J_n(\eta_1) d_n^{(\text{II})} - m_1 \tilde{m}_2 \eta_2 J_n(\eta_2) g_n^{(\text{II})} - m_1 \tilde{m}_2 \eta_2 Y_n(\eta_2) w_n^{(\text{II})} = 0 , \end{array} \right.$$

As funções auxiliares obtidas a partir das condições de contorno e empregadas para se escrever os coeficientes do tipo Mie na Sec. 6.1 são apresentadas abaixo: onde definimos a função derivada logarítmica $L_n^{(Z)}(\rho) = Z_n'(\rho)/[\rho Z_n(\rho)]$, com Z_n sendo qualquer função especial cilíndrica. Sendo que $H_n^{(1)} = J_n + \imath Y_n$ é a função de Hankel cilíndrica de primeiro tipo, prosseguimos com

$$\mathcal{A}_n = \frac{J_n(\eta_2 x)}{Y_n(\eta_2 x)} \left[\frac{\mu_1 L_n^{(J)}(\eta_1 x) - \mu_2 L_n^{(J)}(\eta_2 x)}{\mu_1 L_n^{(J)}(\eta_1 x) - \mu_2 L_n^{(Y)}(\eta_2 x)} \right] , \quad (\text{D.59})$$

$$\mathcal{B}_n = \frac{J_n(\eta_2 x)}{Y_n(\eta_2 x)} \left[\frac{\epsilon_1 L_n^{(J)}(\eta_1 x) - \epsilon_2 L_n^{(J)}(\eta_2 x)}{\epsilon_1 L_n^{(J)}(\eta_1 x) - \epsilon_2 L_n^{(Y)}(\eta_2 x)} \right] , \quad (\text{D.60})$$

$$\mathcal{C}_n = \frac{\mu_2 (1 - \eta_2^2/\eta_1^2)}{m_2 \eta_2^2 x^2 \left[\mu_1 L_n^{(J)}(\eta_1 x) - \mu_2 L_n^{(Y)}(\eta_2 x) \right]} , \quad (\text{D.61})$$

$$\mathcal{D}_n = \frac{\epsilon_2 (1 - \eta_2^2/\eta_1^2)}{m_2 \eta_2^2 x^2 \left[\epsilon_1 L_n^{(J)}(\eta_1 x) - \epsilon_2 L_n^{(Y)}(\eta_2 x) \right]} , \quad (\text{D.62})$$

$$\mathcal{V}_n = \frac{J_n(\eta_2 x)}{Y_n(\eta_2 x)} \mathcal{C}_n , \quad (\text{D.63})$$

$$\mathcal{W}_n = \frac{J_n(\eta_2 x)}{Y_n(\eta_2 x)} \mathcal{D}_n , \quad (\text{D.64})$$

$$\bar{\mathcal{A}}_n = \frac{J_n(\eta_2 y)}{Y_n(\eta_2 y)} \left[\frac{\mu_2 L_n^{(J)}(\eta_2 y) - \mu_0 L_n^{(H)}(\eta_0 y)}{\mu_2 L_n^{(Y)}(\eta_2 y) - \mu_0 L_n^{(H)}(\eta_0 y)} \right] , \quad (\text{D.65})$$

$$\bar{\mathcal{B}}_n = \frac{J_n(\eta_2 y)}{Y_n(\eta_2 y)} \left[\frac{\epsilon_2 L_n^{(J)}(\eta_2 y) - \epsilon_0 L_n^{(H)}(\eta_0 y)}{\epsilon_2 L_n^{(Y)}(\eta_2 y) - \epsilon_0 L_n^{(H)}(\eta_0 y)} \right] , \quad (\text{D.66})$$

$$\bar{\mathcal{C}}_n = \frac{\mu_2 (1 - \eta_0^2/\eta_2^2)}{m_2 \eta_0^2 y^2 \left[\mu_2 L_n^{(Y)}(\eta_2 y) - \mu_0 L_n^{(H)}(\eta_0 y) \right]} , \quad (\text{D.67})$$

$$\bar{\mathcal{D}}_n = \frac{\epsilon_2 (1 - \eta_0^2/\eta_2^2)}{m_2 \eta_0^2 y^2 \left[\epsilon_2 L_n^{(Y)}(\eta_2 y) - \epsilon_0 L_n^{(H)}(\eta_0 y) \right]} , \quad (\text{D.68})$$

$$\bar{\mathcal{V}}_n = \frac{J_n(\eta_2 y)}{Y_n(\eta_2 y)} \bar{\mathcal{C}}_n , \quad (\text{D.69})$$

$$\bar{\mathcal{W}}_n = \frac{J_n(\eta_2 y)}{Y_n(\eta_2 y)} \bar{\mathcal{D}}_n , \quad (\text{D.70})$$

$$\mathcal{F}_n^{(\text{I})} = \frac{2i\epsilon_2 \left[\pi Y_n(\eta_2 y) H_n^{(1)}(\eta_0 y) \right]^{-1}}{\tilde{m}_2 \eta_2 \eta_0 y^2 \left[\epsilon_0 L_n^{(H)}(\eta_0 y) - \epsilon_2 L_n^{(Y)}(\eta_2 y) \right]} , \quad (\text{D.71})$$

$$\frac{\mathcal{P}_n^{(\text{I})}}{\mathcal{F}_n^{(\text{I})}} = \bar{\mathcal{V}}_n (1 - \gamma_n^2 \mathcal{C}_n \mathcal{D}_n) - \mathcal{V}_n (1 - \gamma_n^2 \bar{\mathcal{C}}_n \mathcal{D}_n) + \mathcal{B}_n (\mathcal{C}_n - \bar{\mathcal{C}}_n) , \quad (\text{D.72})$$

$$\frac{\mathcal{Q}_n^{(\text{I})}}{\mathcal{F}_n^{(\text{I})}} = \bar{\mathcal{A}}_n (\mathcal{V}_n - \mathcal{B}_n \mathcal{C}_n) - \mathcal{A}_n (\bar{\mathcal{V}}_n - \mathcal{B}_n \bar{\mathcal{C}}_n) + \gamma_n^2 \mathcal{W}_n (\mathcal{C}_n \bar{\mathcal{V}}_n - \bar{\mathcal{C}}_n \mathcal{V}_n) , \quad (\text{D.73})$$

$$\mathcal{F}_n^{(\text{II})} = \frac{2i\mu_2 \left[\pi Y_n(\eta_2 y) H_n^{(1)}(\eta_0 y) \right]^{-1}}{\eta_2 \eta_0 y^2 \left[\mu_0 L_n^{(H)}(\eta_0 y) - \mu_2 L_n^{(Y)}(\eta_2 y) \right]} , \quad (\text{D.74})$$

$$\frac{\mathcal{P}_n^{(\text{II})}}{\mathcal{F}_n^{(\text{II})}} = \bar{\mathcal{W}}_n (1 - \gamma_n^2 \mathcal{C}_n \mathcal{D}_n) - \mathcal{W}_n (1 - \gamma_n^2 \bar{\mathcal{C}}_n \bar{\mathcal{D}}_n) + \mathcal{A}_n (\mathcal{D}_n - \bar{\mathcal{D}}_n) , \quad (\text{D.75})$$

$$\frac{\mathcal{Q}_n^{(\text{II})}}{\mathcal{F}_n^{(\text{II})}} = \bar{\mathcal{B}}_n (\mathcal{W}_n - \mathcal{A}_n \mathcal{D}_n) - \mathcal{B}_n (\bar{\mathcal{W}}_n - \mathcal{A}_n \bar{\mathcal{D}}_n) + \gamma_n^2 \mathcal{V}_n (\mathcal{D}_n \bar{\mathcal{W}}_n - \bar{\mathcal{D}}_n \mathcal{W}_n) , \quad (\text{D.76})$$

$$\begin{aligned} \mathcal{R}_n^{(\text{I})} = & (\mathcal{A}_n - \gamma_n^2 \mathcal{C}_n \mathcal{W}_n) \left[\gamma_n^2 \bar{\mathcal{V}}_n (\mathcal{D}_n - \bar{\mathcal{D}}_n) + \bar{\mathcal{B}}_n (1 - \gamma_n^2 \bar{\mathcal{C}}_n \mathcal{D}_n) - \mathcal{B}_n (1 - \gamma_n^2 \bar{\mathcal{C}}_n \bar{\mathcal{D}}_n) \right] \\ & + (1 - \gamma_n^2 \mathcal{C}_n \mathcal{D}_n) \left[\bar{\mathcal{A}}_n (\mathcal{B}_n - \bar{\mathcal{B}}_n) + \gamma_n^2 \bar{\mathcal{W}}_n (\bar{\mathcal{V}}_n - \mathcal{B}_n \bar{\mathcal{C}}_n) - \gamma_n^2 \mathcal{W}_n (\bar{\mathcal{V}}_n - \bar{\mathcal{B}}_n \bar{\mathcal{C}}_n) \right] \\ & + \gamma_n^2 (\mathcal{V}_n - \mathcal{B}_n \mathcal{C}_n) \left[(\mathcal{W}_n - \bar{\mathcal{W}}_n) + \bar{\mathcal{D}}_n (\bar{\mathcal{A}}_n - \gamma_n^2 \bar{\mathcal{C}}_n \mathcal{W}_n) - \mathcal{D}_n (\bar{\mathcal{A}}_n - \gamma_n^2 \bar{\mathcal{C}}_n \bar{\mathcal{W}}_n) \right] , \end{aligned} \quad (\text{D.77})$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{R}_n^{(\text{II})} = & (\mathcal{B}_n - \gamma_n^2 \mathcal{D}_n \mathcal{V}_n) \left[\gamma_n^2 \overline{\mathcal{W}}_n (\mathcal{C}_n - \overline{\mathcal{C}}_n) + \overline{\mathcal{A}}_n (1 - \gamma_n^2 \mathcal{C}_n \overline{\mathcal{D}}_n) - \mathcal{A}_n (1 - \gamma_n^2 \overline{\mathcal{C}}_n \overline{\mathcal{D}}_n) \right] \\
& + (1 - \gamma_n^2 \mathcal{C}_n \mathcal{D}_n) \left[\overline{\mathcal{B}}_n (\mathcal{A}_n - \overline{\mathcal{A}}_n) + \gamma_n^2 \overline{\mathcal{V}}_n (\overline{\mathcal{W}}_n - \mathcal{A}_n \overline{\mathcal{D}}_n) - \gamma_n^2 \mathcal{V}_n (\overline{\mathcal{W}}_n - \overline{\mathcal{A}}_n \overline{\mathcal{D}}_n) \right] \\
& + \gamma_n^2 (\mathcal{W}_n - \mathcal{A}_n \mathcal{D}_n) \left[(\mathcal{V}_n - \overline{\mathcal{V}}_n) + \overline{\mathcal{C}}_n (\overline{\mathcal{B}}_n - \gamma_n^2 \overline{\mathcal{D}}_n \mathcal{V}_n) - \mathcal{C}_n (\overline{\mathcal{B}}_n - \gamma_n^2 \overline{\mathcal{D}}_n \overline{\mathcal{V}}_n) \right] ,
\end{aligned} \tag{D.78}$$

onde $x = ka$, $y = kb$, $\eta_q = \sqrt{m_q - \cos^2 \zeta}$ e $\gamma_n = n \cos \zeta$. Note que $\eta_0 = \sqrt{1 - \cos^2 \zeta} = \sin \zeta$.

D.2.2 Cilindro magneto-óptico

As componentes dos campos eletromagnéticos e demais funções desta Seção fazem referência ao Capítulo 9. Para um cilindro girotrópico não magnético, consideramos apenas o modo TE em incidência normal ($\zeta = 90^\circ$), de forma que o campo incidente assume a forma

$$\begin{aligned}
E_{ir} &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} E_0 (-i)^n n \frac{J_n(kr)}{kr} e^{in\phi} , \\
E_{i\phi} &= i \sum_{n=-\infty}^{\infty} E_0 (-i)^n J'_n(kr) e^{in\phi} , \\
H_{iz} &= -\frac{k}{\omega \mu_0} \sum_{n=-\infty}^{\infty} E_0 (-i)^n J_n(kr) e^{in\phi} ,
\end{aligned}$$

onde $k^2 = \omega^2 \epsilon_0 \mu_0$.

D.2.2.1 Campos internos e espalhados

- *Campo eletromagnético interno* ($\mathbf{E}_1, \mathbf{H}_1$), região ($0 \leq r \leq a$) no modo TE:

$$E_{1r} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} E_0 (-i)^n d_n \left[\beta J'_n(k_1 r) + n \frac{J_n(k_1 r)}{k_1 r} \right] e^{in\phi} , \tag{D.79}$$

$$E_{1\phi} = i \sum_{n=-\infty}^{\infty} E_0 (-i)^n d_n \left[J'_n(k_1 r) + \beta n \frac{J_n(k_1 r)}{k_1 r} \right] e^{in\phi} , \tag{D.80}$$

$$H_{1z} = -\frac{k_1}{\omega \mu_1} \sum_{n=-\infty}^{\infty} E_0 (-i)^n d_n J_n(k_1 r) e^{in\phi} , \tag{D.81}$$

onde $k_1^2 = \omega^2 \epsilon_1 (1 - \beta^2) \mu_1$, com $\beta = \gamma_1 / \epsilon_1$.

- *Campo eletromagnético espalhado* ($\mathbf{E}_s, \mathbf{H}_s$), região ($r \geq a$) no modo TE:

$$\begin{aligned} E_{sr} &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} E_0(-i)^n a_n n \frac{H_n^{(1)}(kr)}{kr} e^{in\phi} , \\ E_{s\phi} &= i \sum_{n=-\infty}^{\infty} E_0(-i)^n a_n H_n'^{(1)}(kr) e^{in\phi} , \\ H_{sz} &= -\frac{k}{\omega\mu_0} \sum_{n=-\infty}^{\infty} E_0(-i)^n a_n H_n^{(1)}(kr) e^{in\phi} . \end{aligned}$$

D.2.2.2 Condições de contorno

Das condições de contorno para o modo TE em incidência normal ($\zeta = 90^\circ$), obtemos

$$\begin{cases} J_n'(x) - b_n H_n'^{(1)}(x) - a_n \left[J_n'(m_1 x) + \frac{\gamma_1}{\epsilon_1} n \frac{J_n(m_1 x)}{m_1 x} \right] = 0 , \\ -J_n(x) + b_n H_n^{(1)}(x) + \tilde{m}_1 a_n J_n(m_1 x) = 0 , \end{cases}$$

onde $x = ka$, $m_1 = k_1/k = \sqrt{\epsilon_1(1 - \beta^2)\mu_1/(\epsilon_0\mu_0)}$ e $\tilde{m}_1 = \sqrt{\epsilon_1(1 - \beta^2)\mu_0/(\epsilon_0\mu_1)}$.