UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO CARLOS

OTÁVIO DE BRITO SILVA

Geração e propagação de ondas de superfície em fendas metálicas de dimensões menores que o comprimento de onda

São Carlos
2012

OTÁVIO DE BRITO SILVA

Geração e propagação de ondas de superfície em fendas metálicas de dimensões menores que o comprimento de onda

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física do Instituto de Física de São Carlos da Universidade de São Paulo para obtenção do título de mestre em Ciências

Área de concentração: Física Básica
Orientador: Prof. Dr. Euclydes Marega Júnior.

Versão Corrigida
(Versão original disponível na Unidade que aloja o Programa)

São Carlos
2012

de Brito Silva, Otávio
Geração e propagação de ondas de superfície em fendas metálicas de dimensões menores que o comprimento de onda / Otávio de Brito Silva; orientador Euclydes Marega Júnior - versão corrigida -- São Carlos, 2012.
148 p.

Dissertação (Mestrado - Programa de Pós-Graduação em Física Básica) -- Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, 2012.

1. Plasmon de superfície. 2. Transmissão óptica. 3. Fenda. 4. Filme metálico. 5. Nanofabricação. I. Marega Júnior, Euclydes, orient. II. Título.

Ao meu queridíssimo avô Celcino, pois prometi a ele que venceria.

A maior prova do cumprimento desse juramento está constituída nesse trabalho.

AGRADECIMENTOS

Agradeço à minha mãe Rosa por me incentivar em todos os momentos e decisões de minha vida, me apoiar nos momentos difíceis e torcer sempre pela minha vitória. Te amo muito!

Agradeço à minha irmã Flávia que apesar de ser mais nova do que eu me ensinou os valores de amizade e amor. Te amo de mais!

Agradeço ao Prof. Dr. Euclydes Marega Júnior, pela orientação ao longo do trabalho de mestrado, pela amizade, e cuja contribuição foi fundamental para meu crescimento científico e profissional. Muitíssimo obrigado!

Agradeço ao Prof. Dr. Ben-Hur Viana Borges pelos ensinamentos, detalhes nas simulações e suporte que foram essenciais no desenvolvimento do trabalho. Muito obrigado!

Agradeço ao Prof. Dr. John Weiner pelas sugestões nas simulações que ajudaram a elucidar o trabalho. *Thank you!*

Agradeço ao Prof. Dr. Frederico Dias Nunes pelos conselhos, considerações e todo o conhecimento que demonstraram ser de extrema importância para a composição da dissertação. Muito obrigado!

Agradeço ao Prof. Dr. Antonio Ricardo Zanatta por disponibilizar seu laboratório para a realização das medidas necessárias para a elaboração da parte experimental do trabalho.

Agradeço aos técnicos Carlos Alberto de Souza (Carlão) e Haroldo Arakaki pelo suporte dado na preparação e fabricação das amostras, sem das quais seria impossível fazer as medidas.

Agradeço a equipe de nosso grupo pelas sugestões, críticas, apoio e que me acompanharam ao longo do trabalho: Fabio, Victor, Sérgio e Fernando. Muitíssimo obrigado!

Agradeço de certa forma a meu pai, pois sempre temos ter sentimento de gratidão para com os pais.

Agradeço aos meus avós, Celcino (*in memoriam*) e Helenice pela lição de humildade e caráter que modelaram minha família e aos avós Altamirando e Maria do Carmo (*in memoriam*) pelos bons momentos da infância. Eterna saudade dos que se foram, mas um imenso amor dos que ficam! Muito obrigado!

Agradeço ao tio Dito e tia a Ângela pela ajuda e carinho que oferecidos durante meus primeiros anos em São Carlos. Muito obrigado!

Agradeço aos meus tios Silvia, Paulo, Celso, Helaine, Walmir, Helma e aos primos Mariana, Natália, Diogo e Ricardo pelos bons momentos em família que vivemos apesar de minha distância de casa.

Agradeço aos meus eternos amigos de São Carlos: Myagi (Luciano), Bomba (José Tadeu), Orelha (Rafael), Porra (Cezar), Birigui (Getúlio), Gustavo, Birigui (Rafael), Mariama, Gabi, Driele, Murilo, Big (Rafael), Eduardo e Ulysses.

Agradeço aos meus amigos de sala pela descontração: Fernando, Alessandra, Vinícius, Iza e Rafael.

Agradeço aos meus amigos do IFSC OSA *Student Chapter*: Juliana, Emerson, Adriano Otuka, Regina, Renato, Gustavo, Tarcísio, Anderson, Ruben, Oriana e Vinícius.

Agradeço aos professores do Instituto de Física de São Carlos, por contribuírem na minha formação.

Agradeço ao Instituto de Física de São Carlos pelo apoio financeiro e gráfico em eventos.

Agradeço o Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico, pela concessão da bolsa de mestrado e pelo apoio financeiro para a realização da pesquisa.

“Um cientista é um homem tão débil e humano como qualquer outro;
no entanto, a busca científica pode enobrecê-lo,
inclusive na contramão de sua vontade.”

Isaac Asimov

Resumo

SILVA, O.B. **Geração e propagação de ondas de superfície em fendas metálicas de dimensões menores que o comprimento de onda**. 2012. p. 137. Dissertação (Mestrado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2012.

Neste trabalho apresentamos um estudo sistemático da transmissão da radiação eletromagnética em um conjunto de fendas metálicas individuais depositadas em substratos de vidro BK7 com larguras abaixo do comprimento de onda da luz incidente. As fendas foram obtidas através da evaporação térmica de prata e ouro sobre um substrato dielétrico (vidro BK7). A fabricação das fendas foi feita de forma direta através de um equipamento de feixe de íons de Gálio (FEI Quanta 3D). A transmissão óptica das fendas foi estudada com radiação laser para os comprimentos de onda de 488 nm e 632.8 nm. Observou–se uma oscilação de intensidade na transmissão devido ao efeito de interferência dos *surface plasmon polariton* (SPP) gerados na superfície metálica como função da espessura do filme metálico. Os resultados experimentais obtidos foram confrontados com simulações computacionais, via método de elementos finitos, a partir das quais pode se compreender os mecanismos de propagação da radiação na estrutura em questão, e compará-los com detalhes da fabricação de fendas. Procedimento similar foi realizado ao variar a largura das mesmas. Também foi feita a análise da transmissão óptica em fendas fabricadas em filmes constituídos por camadas alternadas de prata e ouro, a fim de comparar como tal mudança na configuração da estrutura afeta os resultados anteriores. O trabalho serviu para mostrar que as dimensões dos filmes metálicos, assim como das fendas, apresentavam grande influência nas propriedades de transmissão e, além do que foi possível conferir diversos conceitos básicos da teoria eletromagnética num sistema relativamente simples. A compreensão dessas propriedades é fundamental para o desenvolvimento de futuros dispositivos que utilizam efeitos plasmônicos.

Palavras-chave: Plasmon de superfície. Transmissão óptica. Fenda. Filme metálico. Nanofabricação.

Abstract

SILVA, O.B. **Generation and propagation of surface waves in metallic slits of dimensions smaller than the wavelength**. 2012. p. 137. Dissertação (Mestrado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2012.

This work presents a systematic study of the transmission of electromagnetic radiation on a set of single metallic slits metallic with widths below the wavelength of incident light, deposited on BK7 glass substrates. The slits were obtained by thermal evaporation of silver and gold on a dielectric (BK7 glass). The fabrication of the slits was performed directly through a gallium ion beam equipment (FEI Quanta 3D). The optical transmission of the slits was studied by laser radiation for the wavelengths of 488 nm and 632.8 nm. An oscillation in the transmission intensity was observed due to the interference effect of the surface plasmon polariton (SPP) generated on the metallic surface as a function of the metal film thickness. The experimental results were compared with computational simulations, via finite element method, in order to comprehend the mechanisms of radiation propagation in the structure and compare them with details of slits' fabrication. A similar procedure was performed by varying the width of the slits. An analagous analysis of the optical transmission in slits fabricated in films consisting of alternating layers of silver and gold was performed in order to compare how this change in structure configuration affects the previous results. The work served to show that the dimensions of the metal films, as well as of the slits, have a significant influence on the properties of transmission, and, moreover it was possible to confer different basic concepts of electromagnetic theory in a relatively simple system. Understanding these properties is fundamental for the development of future devices that make use of plasmonics effects.

Keywords: Surface plasmon. Optical transmission. Slit. Metallic film. Nanofabrication.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 -	Esquema do experimento da transmissão óptica extraordinária num arranjo periódico de buracos feitos em filme metálico.	26
Figura 2 -	Representação do fenômeno da difração por uma abertura circular.	27
Figura 3 -	Modelo esquemático da fenda em filme metálico e suas propriedades.	31
Figura 4 -	Diagrama representativo da interface planar de um metal e um dielétrico.	33
Figura 5 -	Ilustração do acoplamento da onda SPP na interface metal-dielétrico.	39
Figura 6 -	Plotes das relações de dispersão dos plasmons de *bulk* e de superfície.	43
Figura 7 -	Comparação entre o modelo de Drude com os dados experimentais da permissividade da prata em termos da frequência.	45
Figura 8 -	Comparação entre o modelo de Drude com os dados experimentais da permissividade do ouro em termos da frequência.	46
Figura 9 -	Plotes das partes real e imaginária da permissividade da prata em termos do comprimento de onda a partir de dados tabelados.	48
Figura 10 -	Plotes das partes real e imaginária da permissividade do ouro em termos do comprimento de onda a partir de dados tabelados.	49
Figura 11 -	Simulação da relação de dispersão do vidro de BK7 a partir da equação de Sellmeier.	52
Figura 12 -	Adaptação do gráfico da transmissão óptica no arranjo periódico no experimento de Ebbesen onde são mostradas as contribuições dos plasmons de *bulk* e de superfície.	53
Figura 13 -	Esquematização dos feixes de elétrons e de íons.	56
Figura 14 -	Taxas de *sputtering* do íon de Ga^{+} para diferentes períodos e átomos da rede cristalina.	57
Figura 15 -	Sequências de imagens de microscopia eletrônica de varredura para fendas em filmes de prata.	59
Figura 16 -	Sequências de imagens de microscopia eletrônica de varredura para fendas em filmes de ouro.	60
Figura 17 -	Esquematização do *setup* experimental para medida de transmissão das fendas.	61

Figura 18 -	Plote da componente y do campo elétrico a partir da fenda em filme de ouro.	64
Figura 19 -	Comparação entre os plotes das componentes x da densidade de corrente elétrica com os do deslocamento elétrico.	65
Figura 20 -	Simulação do plote do espectro de transmissão da fenda de 70 nm de largura em filme de prata de 160 nm.	67
Figura 21 -	Simulações com as comparações dos espectros de transmissão da fenda para diferentes valores de espessura do filme de prata.	68
Figura 22 -	Simulações com as comparações dos espectros de transmissão da fenda para diferentes valores de espessura do filme de ouro.	69
Figura 23 -	Espectros de transmissão para diferentes valores de largura da fenda num filme de prata com 200 nm de espessura.	70
Figura 24 -	Espectros de transmissão para diferentes valores de largura da fenda num filme de ouro com 200 nm de espessura.	70
Figura 25 -	Comparação dos espectros de transmissão da fenda em filme de prata com 200 nm de espessura para o caso de fendas de menor largura.	71
Figura 26 -	Comparação dos espectros de transmissão da fenda em filme de ouro com 200 nm de espessura para o caso de fendas de menor largura.	72
Figura 27 -	Resultados experimentais da transmissão óptica em função da espessura do filme para fendas feitas em ouro e prata.	73
Figura 28 -	Resultados teóricos da transmissão óptica em função da espessura do filme de prata para três casos distintos de largura da fenda.	74
Figura 29 -	Resultados teóricos da transmissão óptica em função da espessura do filme de ouro para três casos distintos de largura da fenda.	75
Figura 30 -	Plotes do módulo do vetor de Poynting para dois casos de espessura do filme de ouro em que há máxima e mínima transmissão.	77
Figura 31 -	Plotes do módulo do vetor de Poynting para dois casos de espessura do filme de prata em que há máxima e mínima transmissão.	77
Figura 32 -	Gráfico da transmissão óptica em função da largura da fenda em filme de prata para uma fonte de luz de polarização TE.	80
Figura 33 -	Gráfico da transmissão óptica em função da largura da fenda em filme de ouro para uma fonte de luz de polarização TE.	80
Figura 34 -	Gráfico da transmissão óptica em função da largura da fenda em filme de prata para uma fonte de luz de polarização TM.	81

Figura 35 -	Gráfico da transmissão óptica em função da largura da fenda em filme de ouro para uma fonte de luz de polarização TM.	81
Figura 36 -	Simulação da transmissão óptica em função da largura da fenda em dois filmes de ouro de espessuras 200 nm e 300 nm.	82
Figura 37 -	Simulação da transmissão óptica em função da largura da fenda em dois filmes de prata de espessuras 260 nm e 360 nm.	83
Figura 38 -	Resultados experimentais das transmissões ópticas em função da largura das fendas em filmes de ouro e prata.	84
Figura 39 -	Esquematização do experimento de multicamada metálica.	86
Figura 40 -	Gráficos da transmissão óptica dos sistemas multicamada Au/Ag/Au/Ag e Ag/Au/Ag/Au em termos da largura da fenda (experimento).	88
Figura 41 -	Comparação entre as transmissões dos filmes de Ag/Au/Ag/Au e Ag em função da largura da fenda incididos por um comprimento de onda λ= 488 nm.	89
Figura 42 -	Comparação entre as transmissões dos filmes de Ag/Au/Ag/Au e Ag em função da largura da fenda incididos por um comprimento de onda λ= 632.8 nm.	90
Figura 43 -	Comparação entre as transmissões dos filmes de Au/Ag/Au/Ag e Au em função da largura da fenda incididos por um comprimento de onda λ= 632.8 nm.	90
Figura 44 -	Comparação entre as transmissões dos filmes de Au/Ag/Au/Ag e Au em função da largura da fenda incididos por um comprimento de onda λ= 488 nm.	91
Figura 45 -	Simulações das transmissões ópticas dos filmes multicamada Ag/Au/Ag/Au e Au/Ag/Au/Ag para o comprimento de onda λ= 488 nm.	93
Figura 46 -	Simulações das transmissões ópticas dos filmes multicamada Ag/Au/Ag/Au e Au/Ag/Au/Ag para o comprimento de onda λ= 632.8 nm.	93
Figura 47 -	Representação do plano transversal ao eixo da fenda em formato de V.	95
Figura 48 -	Simulações da transmissão óptica em função da espessura do filme de prata a fim de comparar os casos da fenda ideal e de formato em V.	96
Figura 49 -	Simulações da transmissão óptica em função da espessura do filme de ouro a fim de comparar os casos da fenda ideal e de formato em V.	97
Figura 50 -	Imagens de microscopias confocal e de força atômica de fendas metálicas.	98

Figura 51 -	Esquematização que auxilia a compreensão do fenômeno da difração da luz por meio de uma abertura feita sobre um plano opaco.	109
Figura 52 -	Ilustração da fenda única e do anteparo no problema da difração.	116
Figura 53 -	Ilustração da fenda dupla e do anteparo no problema da difração.	119
Figura 54 -	Ilustração de um anteparo e quatro fendas feitas sobre um plano condutor opaco.	122
Figura 55 -	Representação da fenda para a compreensão da difração de Fresnel.	127
Figura 56 -	Desenho da discretização da malha aplicada na estrutura, com destaque na região interna à malha.	139
Figura 57 -	Comparação das dimensões dos elementos finitos para verificação da precisão da malha.	140
Figura 58 -	Ilustração da janela computacional adotada no trabalho.	142
Figura 59 -	Representação esquemática da incidência de uma onda plana sobre a região da PML	143
Figura 60 -	Destaques das portas de entrada e saída utilizadas na modelagem.	146
Figura 61 -	Comparação entre os campos elétricos incidente e espalhado plotados pelo COMSOL.	148

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 - Valores característicos de λ_{SPP} para ouro e prata 43

Tabela 2 - Valores correspondentes em frequência para os comprimentos de onda utilizados 50

Tabela 3 - Valores das permissividades da Prata (Ag) e do Ouro (Au) para $\lambda = 632.8\ nm$ 50

Tabela 4 - Valores das permissividades da Prata (Ag) e do Ouro (Au) para $\lambda = 488\ nm$ 50

Tabela 5 - Coeficientes da equação de Sellmeier referentes ao vidro BK7 52

Tabela 6 - Valores do coeficiente de absorção e da distância característica de atenuação para $\lambda = 488\ nm$ 91

Tabela 7 - Valores do coeficiente de absorção e da distância característica de atenuação para $\lambda = 632.8\ nm$ 92

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

SW…	Aberturas menores que o comprimento de onda (*subwavelength*).
TOE…	Transmissão óptica extraordinária.
CCD…	Charge coupled device.
SPP…	Surface plasmon polariton.
FIB…	Focused ion beam.
t..	Espessura do filme metálico.
w…	Largura da fenda.
c…	Velocidade da luz no vácuo.
ω…	Frequência da radiação eletromagnética.
λ…	Comprimento de onda da radiação eletromagnética.
ε_0…	Permissividade elétrica do vácuo.
ε_m…	Permissividade do metal.
ε_d…	Permissividade do dielétrico.
ε_1…	Parte real da permissividade do metal no modelo de Drude.
ε_2…	Parte imaginária da permissividade do metal no modelo de Drude.
σ…	Condutividade elétrica.
λ_{SPP}…	Comprimento de onda SPP.
L_{ef}…	Comprimento efetivo de propagação.
ω_p…	Frequência de plasma.
ω_o…	Frequência natural de oscilação dos elétrons no meio material.
γ…	Taxa de colisão dos elétrons no modelo de Drude.
$\vec{p}$	Momento de dipolo elétrico.
$\vec{P}$…	Polarização elétrica
MEF…	Método dos elementos finitos.
FDTD…	Finite difference time domain.
PML…	Perfectly matched layer

SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO 25
2. GERAÇÃO DE ONDAS DE SUPERFÍCIE 33

2.1 Equações de Maxwell na interface planar metal/dielétrico 33

2.2 Permissividade em metais – modelo de Drude 44

2.3 Permissividade em dielétricos 51

2.4 Consequência da análise da relação de dispersão dos plasmons 53
3. FABRICAÇÃO DE FENDAS EM SUPERFÍCES METÁLICAS 55
4. SIMULAÇÕES E RESULTADOS 63

4.1 Espectros de transmissão da fenda em filmes de Ouro e Prata 66

4.2 Transmissão em função da espessura (*t*) do filme 72

4.3 Transmissão em função da largura (*w*) da fenda 79

4.4 Multicamada metálica 85

4.5 Contribuição do formato em "V" da fenda na transmissão óptica 94

4.6 Redeposição de material 98

5. CONCLUSÕES 99

REFERÊNCIAS 101

APÊNDICES 107

Apêndice A: Lista de publicações 107

Apêndice B: Transmissão de radiação através de fendas 109

Apêndice C: Obtenção da permissividade elétrica a partir do modelo de Lorentz 135

Apêndice D: Simulações no software COMSOL Multiphysics 139

1 Introdução

Propriedades ópticas de aberturas *subwavelength* (SW) em filmes metálicos, isto é, orifícios ou fendas cujas dimensões são menores do que o comprimento de onda da radiação incidente (λ) a eles têm sido objeto de pesquisa de diversos grupos ao redor do mundo desde que o fenômeno da transmissão óptica extraordinária (TOE) foi descrito a pouco mais de uma década. (1)

TOE é um fenômeno óptico no qual uma estrutura contendo aberturas SW sobre uma superfície opaca transmite mais luz do que seria esperado segundo a teoria clássica da difração de Abbe, ou simplesmente do limite de difração, $\frac{\lambda}{2n}$ (onde n é o índice de refração do meio). Fenômeno semelhante foi descoberto para arranjos periódicos em duas dimensões de orifícios em metais (2). Surpreendentemente, tais arranjos podem, para determinados comprimentos de onda, apresentar eficiência na transmissão normalizada na área total dos orifícios que excedem a unidade. Em outras palavras, para estes comprimentos de onda um arranjo periódico de orifícios SW transmite mais luz do que um orifício macroscópico com a mesma área da soma de todos os pequenos buracos, como está esquematizado na figura 1. A surpresa é maior pelo fato de que uma única abertura SW geralmente transmite a luz com uma eficiência que é substancialmente abaixo da unidade. Esse aumento considerável na transmissão possui aplicações em fotolitografia, microscopia de campo próximo e dispositivos fotônicos. (3)

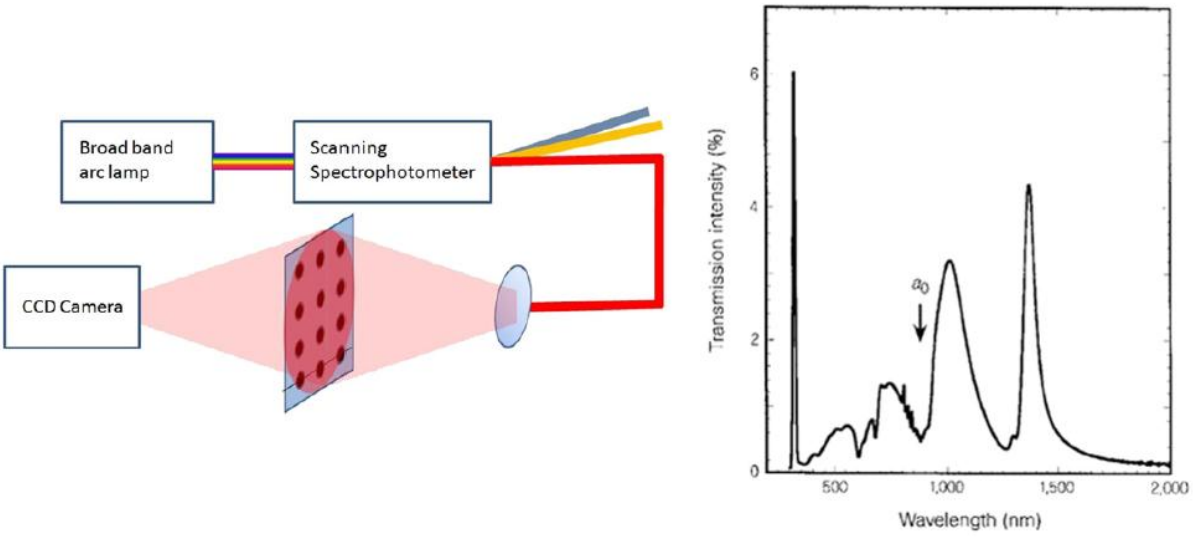


Figura 1 - No lado esquerdo há o esquema dos experimentos originais do espectro de transmissão. Uma fonte incoerente de luz é filtrada por um espectrômetro de varredura e focada sobre um arranjo de estrutura SW (buracos ou fendas). Uma câmera CCD (charge-coupled device) armazena a intensidade da transmissão através da estrutura como função do comprimento de onda da luz incidente. (4) No lado direito temos o espectro de transmissão de um arranjo de buracos feitos sobre um filme de prata (Ag) evaporado sobre um substrato transparente, como relatado por. (1) Aqui, a periodicidade do arranjo é de 900 nm, o diâmetro do buraco 150 nm e a espessura do filme de 200 nm. O ponto indicado por a_o no gráfico marca a periodicidade do arranjo.

Situações nas quais uma frente de onda incide sobre um obstáculo durante sua propagação são tratadas pela teoria escalar da difração de Kirchhoff (tratada com detalhes no apêndice B). O modelo mais simples que podemos conceber para a análise do problema da transmissão óptica, consiste de um orifício feito numa placa condutora infinita. A princípio, consideremos o regime no qual a abertura r do orifício seja ordens de grandeza maior que o do comprimento de onda (λ) incidente à placa, ou seja, fora do domínio SW. Efeitos quanto à polarização da luz são desprezados, dado que a teoria de difração é escalar. No caso da incidência normal de uma abertura circular, a quantidade infinitesimal da intensidade transmitida (dI) por unidade de ângulo sólido (dΩ) na região do campo próximo é expressa como:

$$I(\theta) \cong I_o \frac{k^2 r'^2}{4\pi} \left| \frac{2J_1(kr'\, sen\theta)}{kr'\, sen(\theta)} \right|^2 \qquad (1)$$

Percebemos que ao atravessar o orifício, a luz reproduz um padrão de intensidade dependente do ângulo (θ) entre a direção paralela ao feixe incidente original e um ponto arbitrário r' localizado no anteparo onde o padrão é observado como é esquematizado na

figura 2. $J_1(kr' sen\theta)$ é a função de Bessel de primeira espécie, k é o número de onda da radiação e I_o é a intensidade da luz referente ao máximo central.

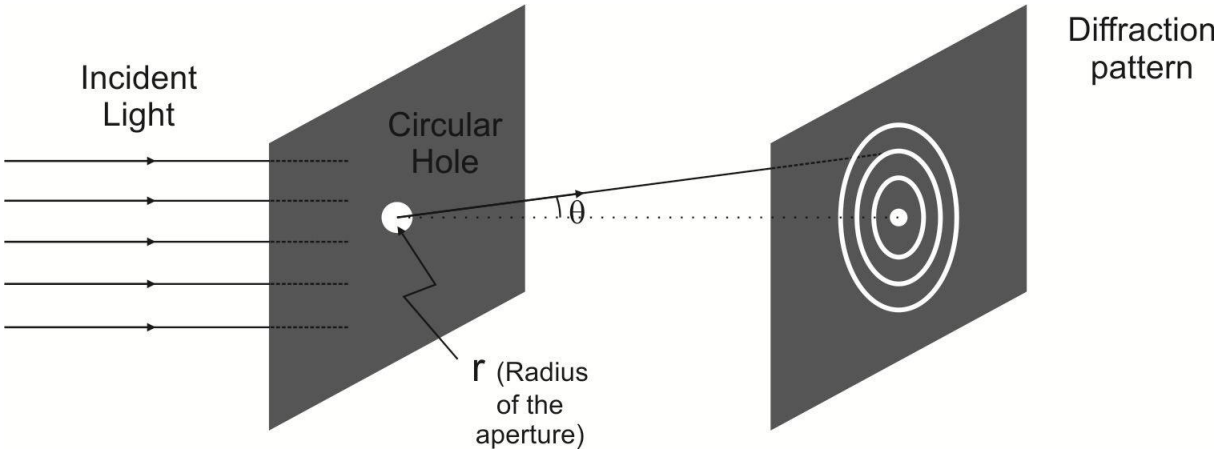


Figura 2 - Difração de um feixe de luz por um orifício circular de raio r. A luz incidente tem incidência normal (lado esquerdo) e, após passar pela abertura, reproduz o padrão de difração no anteparo (lado direito). (5)

O padrão de difração projetado no anteparo, resultado da interferência dos raios luminosos provenientes do orifício, é denominado padrão de Airy. Obtemos a transmissão total da luz (T) ao integrarmos sobre o ângulo sólido a razão $\frac{I(\theta)}{I_o}$.

Em contrapartida, no regime SW ($r \ll \lambda$) a transmissão é influenciada diretamente por efeitos de campo próximo. Para descrevermos de maneira correta o processo de transmissão nesse caso, precisamos utilizar a abordagem vetorial da luz, por meio das equações de Maxwell, mesmo se considerarmos a placa como sendo um condutor elétrico perfeito. Na teoria clássica da difração, a aproximação era a de que o campo eletromagnético na área da abertura deveria ser o mesmo na ausência da placa, caso no qual acarretaria na situação em que as componentes do campo elétrico tangente à placa deveriam ser nulas, condição de contorno fundamental quando tratamos de superfícies condutoras, não seria cumprida. Nas ocasiões em que a abertura é muito maior que λ, tal erro é imperceptível, dado que os campos difratados são pequenos quando comparados com aqueles que são transmitidos. Entretanto, no domínio SW os efeitos dessa aproximação deixam de ser irrelevantes. Esforços foram empreendidos para tentar resolver este problema. A descrição teórica bem sucedida foi fornecida por Bethe (6), no qual obteve uma solução analítica para a transmissão de luz através de um orifício circular SW, feito num plano condutor perfeito cuja espessura era extremamente pequena. Baseado no trabalho relatado na referência (6), outras publicações

similares vieram à tona como em. (7) No caso de incidência normal do feixe, o coeficiente de transmissão T para uma onda plana é dado por:

$$T = \frac{64}{27\pi^2}(kr)^4 \propto \left(\frac{r}{\lambda}\right)^4 \quad (2)$$

Comparado com resultado que seria obtido caso utilizássemos a teoria escalar da difração de Kirchhoff $\left(\frac{r}{\lambda}\right)^2$, percebemos que no regime SW, os efeitos da transmissão são bem pequenos. O resultado da equação anterior nos mostra que T é proporcional a λ^{-4}, em concordância com aquele associado ao espalhamento da luz devido a pequenos objetos descrito por Rayleigh. (8) O resultado de Bethe nos leva a considerar que caso a abertura r do orifício permaneça fixa, a transmissão óptica associada a ela será atenuada conforme aumentamos o comprimento de onda da radiação incidente.

Como vimos, tal resultado só é possível quando consideramos que a placa seja composta por um condutor perfeito, logo as componentes do campo elétrico tangentes a ela são nulas sobre a placa (porém, não nulas na região da abertura) e, além disso, sua espessura seja pequena. Entretanto, quando lidamos com aberturas reais, a condutividade dos materiais é finita e a espessura da placa (ou filme metálico) não é necessariamente pequena, quando comparada ao skin depth (δ) do material. Ao compararmos os resultados das medidas na transmissão óptica apresentada na referência (1) com aqueles previstos na referência (6), veremos que ela é centenas de ordens de grandeza maior no caso experimental em relação ao teórico. Assim o tratamento feito por Bethe não é mais válido, e é justamente frente a tais condições que os efeitos dos *plasmons de superfície*, ou mais conhecidos na literatura como *surface plasmons* (SP) são utilizados como argumento para compreender a transmissão óptica em aberturas SW, em especial para um arranjo periódico de buracos ou fendas.

Desde o primeiro relato experimental da TOE através de estruturas SW, esforços teóricos consideráveis têm sido empregados para interpretar a física envolvida em arranjos de fendas tais como (9-11). Embora a descrição detalhada do aumento da transmissão para tais situações ainda seja investigada, uma das hipóteses é de que a excitação dos plasmons de superfície possa contribuir no processo tal como reportado em (4). O fenômeno dos plasmons na literatura, embora inicialmente não tivessem esta designação, remonta aos trabalhos de Wood (12) nos quais relatavam que a transmissão da luz em redes de difração metálicas

aumentava para determinados comprimentos de onda, fato que a princípio não teve explicação. Independentemente à pesquisa de Wood, Sommerfeld (13) descreveu a presença de ondas evanescentes na interface entre um material condutor e outro dielétrico, consequência das condições de contorno para os campos elétrico e magnético, dado que era de interesse tecnológico à época, verificar as perdas de sinal elétrico em cabos telegráficos submarinos. Foi baseado nesse conceito que Fano (14) resolveu com sucesso o problema na anomalia da transmissão no experimento de Wood. O termo *plasmon* só viria décadas depois para designar a oscilação dos elétrons livres presentes na superfície dos metais, sendo que estes últimos oscilavam de tal maneira a dissipar a energia eletromagnética associada à incidência de luz. Por sua vez, a denominação de *surface plasmon* se refere ao confinamento da onda evanescente, originada da oscilação descrita anteriormente, na interface entre um condutor e um dielétrico, verificada por Powell. (15) Neste experimento filmes finos de alumínio (Al) foram bombardeados por elétrons de alta energia, e se observou a perda de energia dos mesmos. A presença de dois picos na intensidade dessas perdas foi interpretada como as contribuições dos plasmons de *bulk* e de superfície presentes na estrutura. Tais conceitos serão discutidos com detalhes no capítulo 2. O acoplamento entre os elétrons livres com a radiação eletromagnética na região visível do espectro (ou até mesmo no infravermelho e microondas) gera o *polariton*. Quando o acoplamento é tal que ele ocorra na superfície do metal, temos os chamados *surface plasmon polariton* (SPP), apresentados com esse nome pela primeira vez por Cunningham. (16)

Estudos experimentais subsequentes ao relato inicial da TOE também foram realizados, dos quais foi demonstrado um número surpreendente de efeitos. Neste caso, medidas no espectro de transmissão para um arranjo de orifícios (17) ou para uma única fenda (18) revelaram que tanto a supressão, quanto o aumento na transmissão, eram propriedades características da periodicidade dos orifícios no primeiro caso, ou das dimensões da fenda no segundo.

Além disso, estudos interferométricos tais como reportados em (19-21) demonstraram que a contribuição dos modos transientes de superfície difratados é tão importante quanto os modos SPP guiados nas regiões próximas ao objeto SW. Uma investigação mais recente conduzida por Weiner (22) com o intuito de resolver a questão de como o mínimo e o máximo na transmissão dependem da periodicidade do arranjo, demostraram que o mínimo na transmissão ocorria quando a separação entre as fendas era igual ao comprimento de onda do modo SPP, enquanto o máximo era verificado para múltiplos semi-inteiros desta quantidade.

Os estudos mencionados anteriormente dedicaram atenção nas propriedades ópticas de arranjos fabricados em filmes metálicos nas mais diversas formas. Porém, já foi mostrada que a fenda única é uma estrutura interessante visto que ela combina a compacidade de um defeito único com a direcionalidade de um arranjo de fendas. A dimensão estendida ao longo do eixo da fenda impõe direcionalidade do feixe de luz transmitido, sendo que a divergência do mesmo pode ser facilmente controlada. (23) Numa recente investigação utilizando uma única fenda SW (24) nosso grupo observou que a transmissão da fenda foi notadamente afetada pela espessura do filme, assim como crescia linearmente com o aumento da largura da fenda para uma espessura fixa do filme. Visto que trabalhos como o de Yang (25) relatam efeitos da TOE devido a uma única fenda, sugere que a presença de arranjos periódicos como os descritos inicialmente por (1) não seja um pré-requisito para o aumento na transmissão óptica.

Visto que fendas apresentam simetria distinta a de um orifício (ou um arranjo periódico deles), é razoável supor que o incremento na transmissão seja realizado de maneira diferente para as duas configurações. Enquanto no arranjo de orifícios os modos evanescentes do campo eletromagnético contribuem significativamente na formação da TOE, nas fendas os modos de propagação do campo são imprescindíveis na detecção do mesmo fenômeno. Como será relatada no capítulo 2, a fenda tem propriedades similares a um guia de onda, isto é, as componentes dos campos no seu interior se comportam como duas ondas: uma estacionária e outra propagante. Os plasmons correspondem aos modos de propagação desse guia e, ao se propagarem coletivamente na interface entre um condutor e um dielétrico, originariam a TOE. No caso em que as componentes do campo elétrico sejam perpendiculares ao eixo da fenda (vamos convencionar a partir de agora, e ao longo de todo o texto, o eixo *z* como sendo o eixo da fenda, tal como é esquematizado na figura 3), e a mesma seja incidida normalmente pela radiação eletromagnética, foi verificado nas regiões do infravermelho (10) e na de microondas (25), além do trabalho de Weiner (26) que a ressonância dos modos era semelhante a uma cavidade de Fabry-Pérot quando a espessura (*t*) do filme metálico era incrementada. Tais resultados sugerem razoavelmente que é possível, pelo ajuste das dimensões da nanoestrutura, estabelecer condições nas quais a transmissão óptica seja otimizada. Quando esses parâmetros se tornam relevantes na descrição da TOE também é interessante verificar que as alterações nas medidas da mesma, decorrentes dos defeitos do processo de fabricação das fendas, são fatores que influenciam as medidas. Nesse sentido, Bozhevolnyi (27) e Liu (28) analisaram em particular o problema do formato em V para fendas em filmes metálicos, por meio de

simulações computacionais comparando–as com resultados obtidos experimentalmente. Procedimento semelhante será abordado no capítulo 4

A escolha da fenda como estrutura SW não foi feita de maneira arbitrária, já que devido à sua simplicidade quanto à fabricação, ela garante a observância de efeitos desejados ao nosso propósito, como o comportamento dos campos elétrico e magnético e a transmissão da energia no interior da fenda, graças aos modos de plasmons. Ao considerar o modelo de Drude para os metais constituintes do filme, é de se supor que os elétrons estejam livres para se deslocar aleatoriamente quando nenhum campo externo é aplicado ao metal. No momento em que criamos uma lacuna (ou gap) na superfície metálica, como é o caso da fenda, temos uma restrição do movimento desses elétrons. Além disso, temos a formação de dipolos elétricos nas extremidades da fenda, de maneira que haja a presença de efeitos análogos ao de uma antena. Portanto, a contribuição dos efeitos dos campos devidos às bordas da fenda não podem ser negligenciadas na abordagem do nosso problema. Trabalhos recentes como os reportados nas referências (29-30) demonstram tal preocupação.

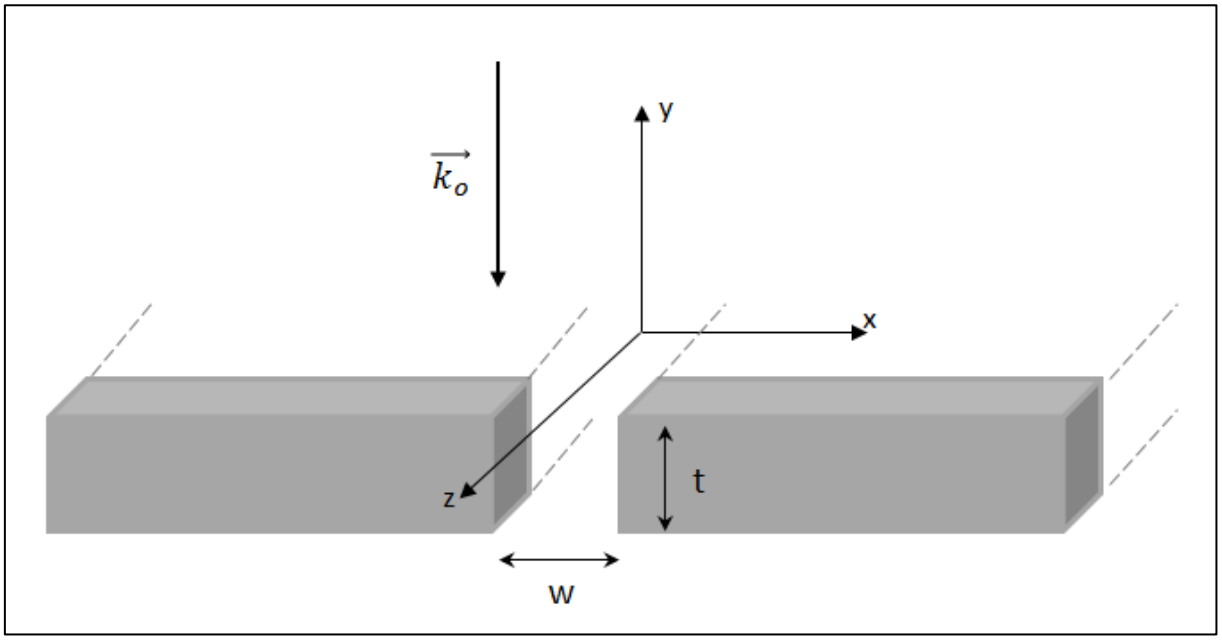


Figura 3 - Representação esquemática da fenda de largura (w) feita em filme metálico de espessura (t). O sentido da radiação incidente pode ser adotado como de cima para baixo (como no esquema acima), ou vice-versa, desde que o meio para onde a luz imerge seja o ar enquanto aquele na qual ela emerge seja o substrato.

O acoplamento dos plasmons de superfície depende estritamente das propriedades ópticas do meio. Portanto, é conveniente verificar qual a influência na transmissão devido à integração de diferentes classes de metais nobres, em especial ouro (Au) e prata (Ag), uma vez que tal adição deva reforçar os efeitos da transmissão, não apenas em estruturas similares

à fenda, mas também com outras geometrias, com aplicações em sensoriamento utilizando fibras ópticas como relatado por Sharma (31), Gupta (32) e Zynio. (33)

Nosso trabalho teve como objetivo principal explorar os efeitos de ondas SPP na transmissão óptica em fendas metálicas SW fabricadas diretamente sobre um filme metálico utilizando – se um feixe de íons, verificando as influências da geometria da fenda sobre as medidas. Filmes de Prata e Ouro foram depositados sobre um substrato de BK7 com espessuras variadas entre 100 a 450 nm. Os resultados experimentais obtidos evidenciam a oscilação na intensidade da radiação transmitida nas fendas. Simulações foram realizadas a partir de um software comercial (COMSOL Multiphysics® verificar no apêndice D), reproduzindo qualitativamente as oscilações observadas. Realizamos procedimento similar ao variar a largura da fenda em filmes de uma camada e de camadas alternadas de Prata e Ouro. A dissertação está dividida em 5 capítulos. No capítulo 2 apresentamos uma descrição teórica da formação de ondas SPP na interface metal-dielétrico; no capítulo 3 descrevemos a metodologia utilizada para a fabricação das estruturas SW; no capítulo 4 os resultados experimentais são confrontados com os resultados obtidos das simulações e por fim no capítulo 5 fazemos as considerações finais.

A dissertação feita ainda conta com quatro apêndices relacionados com temas básicos: as listas de publicações realizadas durante o período da pesquisa, teoria da difração escalar, modelo de Lorentz para a determinação da permissividade elétrica e aspectos gerais da metodologia utilizada no programa COMSOL.

2 Geração de ondas de superfície

O surgimento dos denominados *surface plasmons polaritons* (SPP), ou plasmons polariton de superfície, ocorre em condições específicas, consequência das condições de contorno dos campos elétrico e magnético, das propriedades ópticas dos materiais e da polarização da luz incidente. Portanto, não basta termos apenas a incidência de luz numa interface metal-dielétrico, pois muitas vezes não conseguiríamos detectar os efeitos devidos às ondas SPP. Ao resolver as equações de Maxwell para uma estrutura planar metal/dielétrico, representada no esquema da figura 4, tais condições virão à tona. É o que será feito a seguir.

2.1 Equações de Maxwell na interface planar metal/dielétrico

Vamos considerar a radiação eletromagnética incidente tendo uma dependência harmônica no tempo, ou seja, os campos $\vec{H}\, e\, \vec{E}$ são proporcionais a $e^{-i\omega t}$, em que ω corresponde à frequência da radiação. Além disso, iremos considerar que ambos os materiais são não magnéticos, isto é, suas permeabilidades são unitárias ($\mu = 1$) assim como sua magnetização é nula ($\vec{M} = \vec{0}$).

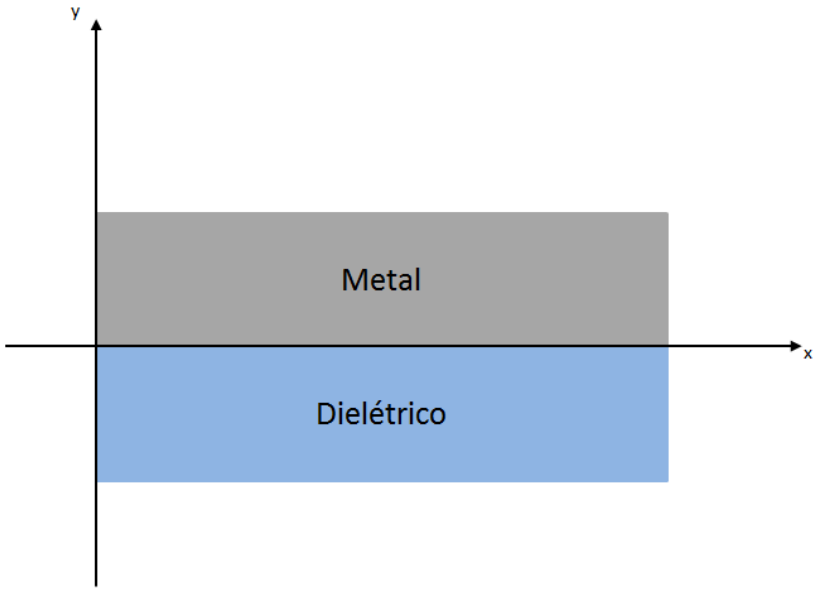


Figura 4 - Diagrama representativo da interface planar entre um metal e um dielétrico.

As leis de Faraday e de Ampère-Maxwell são escritas como:

$$\vec{\boldsymbol{\nabla}} \times \vec{\boldsymbol{E}} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = i\omega\mu_o\vec{H} \tag{3}$$

$$\vec{\boldsymbol{\nabla}} \times \vec{\boldsymbol{H}} = \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} = -i\omega\varepsilon_i\varepsilon_o\vec{E} \tag{4}$$

Nessas leis aplicamos o fato de que $\vec{B} = \mu_o\vec{H}$ e $\vec{D} = \varepsilon_i\varepsilon_o\vec{E}$. As quantidades μ_oe ε_o correspondem, à permeabilidade magnética e à permissividade elétrica do vácuo, respectivamente; já o índice *i* da equação 4 designa qual o material a onda de radiação permeia (dielétrico ou metal). Ao desenvolver o lado esquerdo da equação 3, obteremos a seguinte situação:

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} = \begin{vmatrix} \hat{x} & \hat{y} & \hat{z} \\ \partial/\partial x & \partial/\partial y & \partial/\partial z \\ E_x & E_y & E_z \end{vmatrix} = \left(\frac{\partial E_z}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial z}\right)\hat{x} + \left(\frac{\partial E_x}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial x}\right)\hat{y} + \left(\frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial y}\right)\hat{z}$$

Com isso, as componentes do rotacional de (3) ficam:

$$i\omega\mu_o H_x = \frac{\partial E_z}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial z} \tag{5.1}$$

$$i\omega\mu_o H_y = \frac{\partial E_x}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial x} \tag{5.2}$$

$$i\omega\mu_o H_z = \frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial y} \tag{5.3}$$

Procedendo de maneira análoga para a lei de Ampère-Maxwell:

$$-i\omega\varepsilon_i\varepsilon_o E_x = \frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z} \tag{6.1}$$

$$-i\omega\varepsilon_i\varepsilon_o E_y = \frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial x} \tag{6.2}$$

$$-i\omega\varepsilon_i\varepsilon_o E_z = \frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} \tag{6.3}$$

Os conjuntos das equações 5 e 6 representam a forma mais geral das equações de Maxwell. Quando especificamos a polarização da luz incidente nosso problema é simplificado, já que algumas componentes dos campos se anulam. É o que faremos.

2.1.1 Polarização TE

Na polarização TE (elétrica transversal da sigla em inglês), o campo elétrico é perpendicular ao plano de incidência. No nosso caso, este plano corresponde ao plano *xy* da figura 4. Concluímos, portanto, que E_x e E_y são nulos, e como consequência H_z também é nulo. Com isso, ficamos com a seguinte situação:

$$i\omega\mu_o H_x = \frac{\partial E_z}{\partial y} \tag{7.1}$$

$$i\omega\mu_o H_y = -\frac{\partial E_z}{\partial x} \tag{7.2}$$

$$-i\omega\varepsilon_i\varepsilon_o E_z = \frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} \tag{7.3}$$

Com isto simplificamos significativamente o nosso problema. Os plasmons se propagam ao longo da interface descritos por uma onda proporcional a $e^{i\beta x}$, onde β é denominado na literatura como *constante de propagação*. É de se supor então, que o operador $\frac{\partial}{\partial x}$ possa ser substituído por um fator $i\beta$ nas equações anteriores. As componentes do campo magnético podem ser escritas na forma:

$$H_x = -\frac{i}{\omega\mu_o}\frac{\partial E_z}{\partial y} \tag{8.1}$$

$$H_y = -\frac{\beta}{\omega\mu_o}E_z \tag{8.2}$$

Ao substituir esses resultados na equação 5.3:

$$\begin{cases} -i\omega\varepsilon_i\varepsilon_o E_z = -\dfrac{i\beta^2}{\omega\mu_o}E_z - \dfrac{\partial}{\partial y}\left[-\dfrac{i}{\omega\mu_o}\dfrac{\partial E_z}{\partial y}\right] \\ \dfrac{\partial^2 E_z}{\partial y^2} - \beta^2 E_z = -\omega^2\mu_o\varepsilon_o\varepsilon_i E_z = -\dfrac{\omega^2}{c^2}\varepsilon_i E_z \\ \dfrac{\partial^2 E_z}{\partial y^2} + (\varepsilon_i k_o^2 - \beta^2)E_z = 0 \end{cases}$$

Podemos reescrever esta última linha como:

$$\frac{\partial^2 E_z}{\partial y^2} - (\beta^2 - \varepsilon_i k_o^2) E_z = 0 \tag{9}$$

Repare que uma vez que resolvermos esta equação diferencial, todo o sistema estará solucionado. Para tal, devemos impor as condições de contorno dos campos elétrico e magnético nas interfaces metal/dielétrico.

Sabemos que as componentes dos campos paralelas à interface devem ser contínuas. Portanto, nesse caso:

$$E_z(y=0)_{dielétrico} = E_z(y=0)_{metal} \tag{10}$$

$$H_x(y=0)_{dielétrico} = H_x(y=0)_{metal} \tag{11}$$

Ao aplicar a condição 10:

$$Ae^{i\beta x} = Be^{i\beta x} \rightarrow A = B$$

E ao aplicar a condição 11:

$$\frac{ik_d}{\omega\mu_o} Ae^{i\beta x} = -\frac{ik_m}{\omega\mu_o} Be^{i\beta x} \rightarrow A\,(k_m + k_d) = 0$$

Nesta última já aplicamos o fato de que A=B. A segunda condição nos leva a duas conclusões: O coeficiente A é nulo ou o termo dentro do parêntesis o é. O confinamento de plasmons na interface é verificado quando $Re(k_m) > 0\ e\ Re(k_d) > 0$; para que isso ocorra o coeficiente A=0, o que implica na não existência dos campos! O que não é verdade. Portanto, concluímos que **não há modos SPP quando a polarização da luz incidente é do tipo TE.**

2.1.2 Polarização TM

Nesse tipo de polarização o campo magnético é perpendicular ao plano de incidência. Assim, a partir das equações de Maxwell, aquelas que nos interessa são as equações 5.3, 6.1 e 6.2. Ao aplicar as características do modo TM nessas equações, temos:

$$-i\omega\varepsilon_i\varepsilon_o E_x = \frac{\partial H_z}{\partial y} \tag{12.1}$$

$$-i\omega\varepsilon_i\varepsilon_o E_y = -\frac{\partial H_z}{\partial x} \tag{12.2}$$

$$i\omega\mu_o H_z = \frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial y} \tag{12.3}$$

Usamos novamente o argumento de que as ondas percorrem a interface num único sentido na direção paralela ao eixo x ($H_z \propto e^{i\beta x}, logo\ \frac{\partial}{\partial x} \propto i\beta$). As equações anteriores são então escritas como:

$$E_x = \frac{i}{\omega\varepsilon_i\varepsilon_o}\frac{\partial H_z}{\partial y} \tag{13.1}$$

$$E_y = \frac{\beta}{\omega\varepsilon_i\varepsilon_o} H_z \tag{13.2}$$

$$\frac{\partial^2 H_z}{\partial y^2} - (\beta^2 - \varepsilon_i k_o^2) H_z = 0 \tag{13.3}$$

Sendo $k_i = (\beta^2 - \varepsilon_i k_o^2)^{\frac{1}{2}}$ o número de onda no meio *i*, a solução da parte em y para o campo H_z é dada por: $Y(y) = Ce^{k_i y} + De^{-k_i y}$. Nesse caso, o índice i pode designar um metal ($i = m$) ou um dielétrico ($i = d$). Como procedido no caso do modo TE, os campos tanto no metal como no dielétrico não podem divergir. Portanto, os coeficientes *C* e *D* são nulos alternadamente conforme nos deslocamos ao longo da direção y. Logo, as soluções para os campos ao aplicar as definições são:

Para y < 0:

$$\begin{cases} H_z = Ce^{i\beta x}e^{k_d y} & (14.1) \\ E_x = \frac{ik_d}{\omega\varepsilon_d\varepsilon_o} Ce^{i\beta x}e^{k_d y} & (14.2) \\ E_y = \frac{\beta}{\omega\varepsilon_d\varepsilon_o} Ce^{i\beta x}e^{k_d y} & (14.3) \end{cases}$$

Para y > 0:

$$\begin{cases} H_z = De^{i\beta x}e^{-k_m y} & (15.1) \\ E_x = -\frac{ik_m}{\omega\varepsilon_m\varepsilon_o} De^{i\beta x}e^{-k_m y} & (15.2) \\ E_y = \frac{\beta}{\omega\varepsilon_m\varepsilon_o} De^{i\beta x}e^{-k_m y} & (15.3) \end{cases}$$

Mais uma vez aplicamos a condição de que as componentes dos campos paralelas à interface são contínuas (H_y e E_x):

$$H_z(y=0)_{dielétrico} = H_z(y=0)_{metal} \tag{16}$$

$$E_x(y=0)_{dielétrico} = E_x(y=0)_{metal} \tag{17}$$

Ao aplicar a condição de contorno 16, temos:

$$Ce^{i\beta x} = De^{i\beta x} \rightarrow C = D \tag{18}$$

Quando aplicamos a condição 17:

$$\frac{ik_d}{\omega\varepsilon_d\varepsilon_o}Ce^{i\beta x} = -\frac{ik_m}{\omega\varepsilon_m\varepsilon_o}De^{i\beta x} \tag{19}$$

Ao considerar a informação contida em 19, chegamos ao seguinte resultado:

$$\frac{k_d}{k_m} = -\frac{\varepsilon_d}{\varepsilon_m} \tag{20}$$

A equação 20 é de extrema importância, pois ela nos informa qual a condição que deverá ser satisfeita para que possamos confinar as ondas SPP em interfaces como a analisada no texto. Vemos que os sinais das permissividades elétricas do metal e do dielétrico devem ser contrários.

Podemos a partir de 20 encontrar a expressão para a constante de propagação β, também conhecida na literatura como número de onda k_{SPP}. Sabemos que:

$$k_d^2 = \beta^2 - \varepsilon_d k_o^2 \tag{21.1}$$

$$k_m^2 = \beta^2 - \varepsilon_m k_o^2 \tag{21.2}$$

Ao dividir membro a membro as duas últimas equações, temos:

$$\left(\frac{k_d}{k_m}\right)^2 = \frac{\beta^2 - \varepsilon_d k_o^2}{\beta^2 - \varepsilon_m k_o^2} = \left(-\frac{\varepsilon_d}{\varepsilon_m}\right)^2$$

E, após algumas manipulações algébricas, chegamos ao resultado abaixo:

$$\beta = k_o\sqrt{\frac{\varepsilon_m\varepsilon_d}{\varepsilon_m + \varepsilon_d}} \tag{22}$$

Quando obtemos β podemos extrair dele informações relevantes quanto à propagação dos plasmons; uma delas é o chamado comprimento de onda SPP, definido abaixo:

$$\lambda_{SPP} = \frac{2\pi}{Re(\beta)} \tag{23}$$

Em estruturas periódicas, tal quantidade serve como parâmetro para definir em quais situações ocorrerá máximo (ou mínimo) na transmissão óptica. Valores inteiros desse comprimento de onda correspondem ao mínimo de transmissão, enquanto os semi-inteiros ao máximo. Weiner (26) verificou tais fatos para um arranjo de duas fendas feitas em filmes metálicos. Verificamos a partir da análise dimensional do lado direito da equação 22 que β tem dimensão de número de onda e, por conveniência essa quantidade é representada na literatura como k_{SPP}. Na figura 5 é representado o esquema do acoplamento do plasmon na interface dos meios. Vemos da equação 23 que β é uma quantidade complexa, visto que a permissividade dos metais ε_m é complexa. Outra informação importante é o comprimento efetivo de propagação (L_{ef}):

$$L_{ef} = \frac{1}{2Im(\beta)} \tag{24}$$

Esse parâmetro corresponde à distância percorrida pelo campo associado às ondas SPP até ele perder por volta de 40% de sua intensidade inicial. No regime visível do espectro essa distância é da ordem de micrômetros ($10^{-6}\ m$).

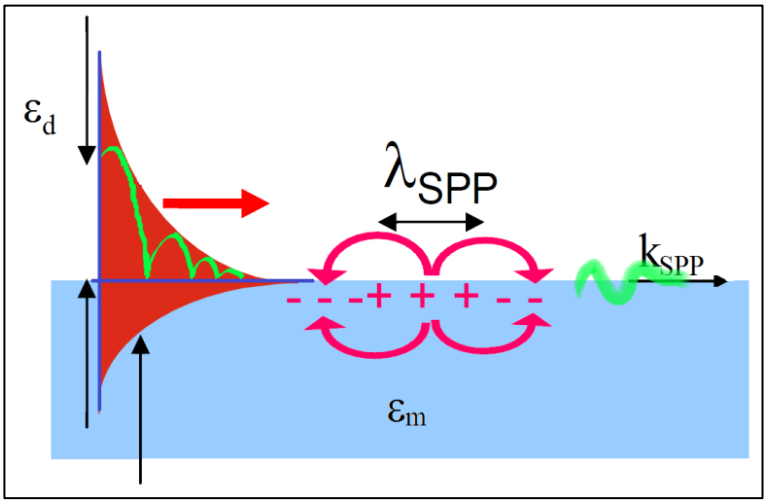


Figura 5 - Representação do acoplamento do plasmon na interface entre o metal e o dielétrico

A partir da expressão para k_{SPP}, percebemos que para termos a descrição completa do plasmon é necessário conhecermos a dispersão óptica dos materiais com os quais queremos lidar. Quando dizemos que certo meio é dispersivo significa que suas propriedades ópticas dependem explicitamente do comprimento de onda (ou da frequência) da radiação eletromagnética que se propaga nele. O modelo de Lorentz é convencionalmente utilizado na descrição de meios dispersivos; nele os elétrons que constituem o material se comportam como osciladores harmônicos amortecidos quando sujeitos a campos externos. A atuação desses campos gera uma força restauradora, proporcional ao deslocamento dos elétrons (representado pela quantidade complexa z_n na equação 25), que tende a realocá-los em suas posições de equilíbrio. Assumindo que o campo externo de amplitude E_o oscile harmonicamente com frequência ω, a equação de movimento do enésimo elétron é dada por:

$$\frac{d^2 z_n}{dt^2} + \gamma_n \frac{dz_n}{dt} + \omega_{o_n}^2 z_n = -\frac{e}{m} E_o e^{-i\omega t} \tag{25}$$

Nesse contexto, γ_n é a taxa de colisão do enésimo elétron com os demais elétrons do meio que num sentido mais amplo representa o amortecimento do sistema. Já ω_{o_n} corresponde à frequência natural de oscilação do elétron, que em casos como esses corresponde à ressonância. Ao resolver esta equação diferencial (para mais detalhes verifique o apêndice C) e considerando que como consequência da aplicação do campo o material adquire uma polarização, a permissividade elétrica relativa do mesmo será:

$$\varepsilon_r = \frac{\varepsilon(\omega)}{\varepsilon_o} = 1 + \frac{Ne^2}{\varepsilon_o m} \sum_n \frac{f_n}{\omega_{o_n}^2 - \omega^2 - i\gamma_n \omega} \tag{26}$$

Onde N é o número de elétrons por unidade de volume e f_n é a fração de elétrons do meio que apresentam frequência natural ω_{o_n}. Vamos considerar que a frequência da radiação incidente ao material seja ordens de grandeza maior do que a frequência de ressonância ($\omega \gg \omega_{o_n}$), de maneira que podemos desprezar efeitos de amortecimento ($\gamma_n \ll 1$). Com isso, a equação anterior é reescrita da seguinte forma:

$$\varepsilon_r \approx 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \tag{27}$$

A quantidade $\omega_p^2 = \frac{Ne^2}{\varepsilon_o m}\sum f_n$ é a denominada *frequência de plasma do metal*. Devemos nos ater ao fato de que além de todas as aproximações que fizemos até o momento, também temos de restringir nossa análise a materiais não magnéticos ($\mu = \mu_o$), onde μ_o é a permeabilidade magnética do vácuo. A partir deste resultado é possível obter a relação de dispersão para os elétrons localizados no interior do meio. Sendo que seu índice de refração é n, logo o vetor de onda no material será:

$$k = \frac{\omega}{c} n = \frac{\omega}{c}\sqrt{\frac{\varepsilon}{\varepsilon_o}} \tag{28}$$

O termo dentro da raiz corresponde à permissividade relativa (ε_r). Ao realizar algumas passagens algébricas, obtemos a relação de dispersão:

$$\omega^2 = (ck)^2 + \omega_p^2 \tag{29}$$

Ela também pode ser expressa em termos da frequência.

$$ck = \sqrt{\omega^2 - \omega_p^2} \tag{30}$$

A relação de dispersão acima nos fornece sob qual condição a radiação pode se propagar no interior do meio, também conhecida como relação de dispersão do plasmon de *bulk*, representada pelo ramo superior do gráfico presente na figura 6. Nesse caso ela é definida pela desigualdade $\omega \geq \omega_p$. Se tal condição não for satisfeita, não há propagação. Isto explica porque a maioria dos metais são altamente refletivos no espectro visível, uma vez que apresentam frequência de plasma na faixa do ultravioleta. Em meios não dispersivos, como é o caso do vácuo ($\varepsilon_r = 1$) não há esta restrição quanto à propagação da radiação, e a relação de dispersão é linear, também conhecida por linha de luz, que representa a propagação da luz no vácuo, esquematizada pela reta I da figura 6. Outro argumento, este mais físico, que justifica a existência dessa faixa de frequências proibidas está associado com a interação de uma onda eletromagnética plana com o meio. Ao incidir sobre o material, tal onda provoca o deslocamento de cargas que em resposta produzem outras duas ondas. A primeira se move no mesmo sentido da onda incidente e a segunda no sentido oposto; quando essas duas ondas possuem frequências abaixo da frequência de plasma, elas ficam fora de fase, resultando

numa interferência destrutiva, não havendo, portanto, a propagação. Daí a existência da zona proibida. Entretanto, quando as frequências estão acima de ω_p as ondas mudam de fase, fazendo com que as mesmas interfiram construtivamente com a radiação incidente.

Dentro desse intervalo permitido de frequências existem dois modos como os plasmons podem se propagar: o modo transversal e o longitudinal. No primeiro caso, como o próprio nome sugere, os plasmons oscilam nas direções perpendiculares a sua direção de propagação, sendo que a frequência deles é estritamente maior que ω_p; já no modo longitudinal, em que a direção de oscilação e a de propagação coincidem, os plasmons possuem frequência igual a ω_p, o que corresponde ao caso de permissividade nula ($\varepsilon_r = 0$).

Quando analisamos os plasmons de superfície (surface plasmon, ou SP), ou seja, aqueles localizados na interface entre um condutor e um dielétrico, reparamos que a relação de dispersão é diferente da dos plasmons de *bulk*, isso porque no primeiro caso há a presença de uma frequência limite para grandes números de onda, difundida na literatura como $\omega_{SP} = \frac{\omega_p}{\sqrt{1+\varepsilon_d}}$ (se considerarmos o vácuo como dielétrico temos que $\omega_{SP} = \frac{\omega_p}{\sqrt{2}}$.), como sugerido pelo modelo teórico desenvolvido por Ritchie. (34) Esse resultado foi significativo, pois demonstrou que era possível a propagação da onda em intervalo de frequências abaixo da frequência de plasma, desde que tal onda seja restrita à superfície, como evidenciado experimentalmente por Powell. (15). A relação de dispersão para os modos SP equivale à forma obtida pela equação 22. Existe o regime específico dos modos SP, os denominados *surface plasmon polariton* (SPP), formados quando a radiação eletromagnética apresenta baixa frequência (ω), ou número de onda (k) pequeno. Quando afirmamos baixa frequência, consideramos as regiões do visível, infravermelho e microondas do espectro. Ao observar o gráfico da figura 6, vemos que isso ocorre justamente na região em que a reta II, representação da luz que se propaga no dielétrico, tangencia a curva de dispersão dos modos SP. Note que no regime SPP é mais fácil estabelecer o acoplamento entre a luz que se propaga no dielétrico com aquela presente na superfície do metal, quando comparado ao caso de grandes números de onda.

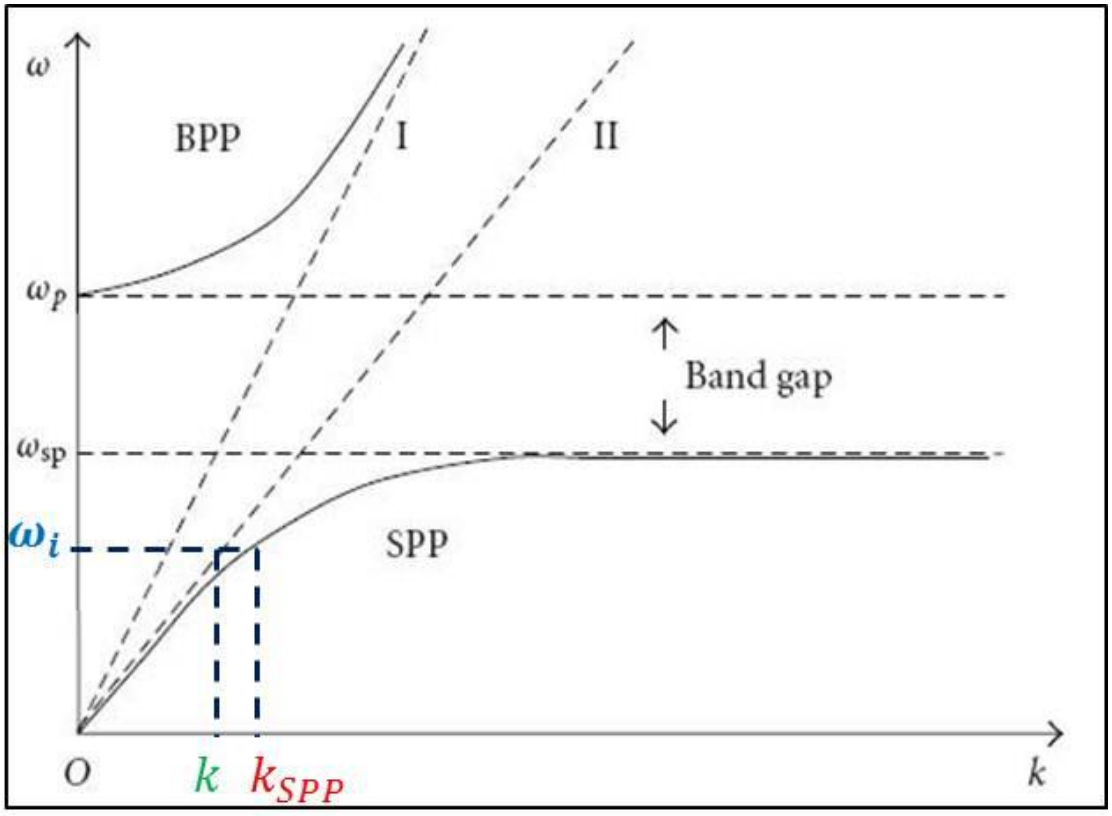


Figura 6 - Relação de dispersão para o plasmon de *bulk* (ramo superior) e para o plasmon de superfície (ramo inferior). A reta I representa a dispersão da luz no vácuo ($\omega = kc$). Na reta II temos a dispersão num dielétrico. Para uma mesma frequência ω_i temos que o número de onda do modo SPP é maior quando comparado àquele relacionado com a luz se propagando no interior do dielétrico.

O número de onda do modo SPP, ou simplesmente k_{SPP}, é maior do àquele que se propaga no dielétrico k para determinado valor de frequência (ω_i). Consequentemente, quando comparamos o comprimento de onda da radiação incidente λ com o comprimento de onda λ_{SPP}, vemos que $\lambda_{SPP} < \lambda$. Para elucidar tal fato, utilizamos como exemplo a tabela abaixo que mostra o caso dos comprimentos de onda 488 nm e 632.8 nm que incidem sobre superfícies de prata e ouro, respectivamente, e comparados com seus equivalentes λ_{SPP}.

Tabela 1 – Valores característicos de λ_{SPP} para ouro e prata.

Metal	**λ (nm)**	**λ_{SPP} (nm)**	**λ_{SPP}/λ**
Ouro	632.8	393.2	0.62
Prata	488	287.2	0.59

Vemos que para esses casos, λ_{SPP} corresponde por volta de 60% do comprimento de onda da radiação incidente ao metal.

2.2 Permissividade em metais – modelo de Drude

É plausível supor que a resposta do meio frente à atuação do campo externo seja diferente conforme ele seja um dielétrico ou um condutor. No primeiro caso os elétrons estão fortemente ligados aos íons, de maneira que a força restauradora (relacionada com a frequência de ressonância ω_{o_n}) é considerável. Em contrapartida, nos condutores os elétrons estão livres para se deslocarem ao longo do material; por isso mesmo nesse caso podemos impor $\omega_{o_n} = 0$ na expressão geral para ε_r (correspondente a termos livres). Além disso, os efeitos do amortecimento em condutores (γ_n), associados à absorção de energia, não são mais desprezíveis, uma vez que, ao resolver as equações de Maxwell para um condutor, obtemos um termo de amortecimento proporcional à condutividade elétrica (σ). Como consequência, vemos que em metais a permissividade é uma quantidade complexa, como está descrita na equação abaixo:

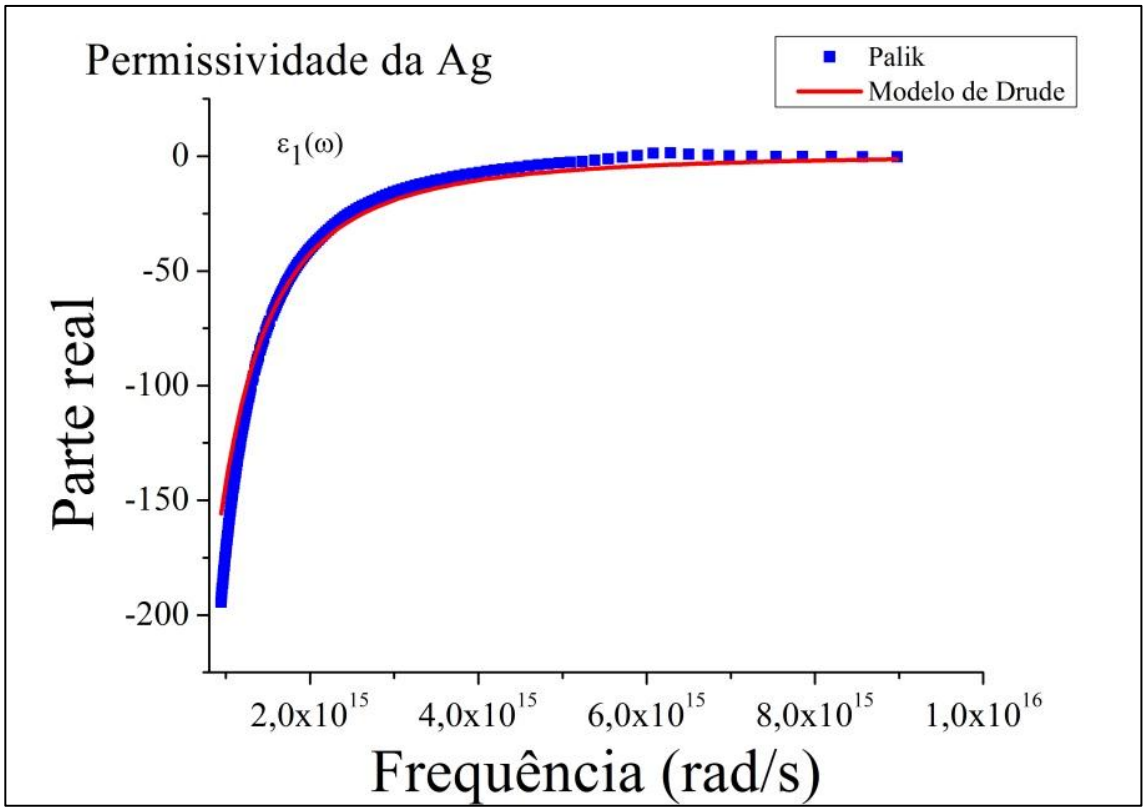
$$\varepsilon_r = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\gamma)} \tag{31}$$

O modelo de Drude é definido por meio das aproximações citadas até aqui. Podemos representar a permissividade por meio de suas partes real e imaginária:

$$\varepsilon_1(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + \gamma^2} = Re[\varepsilon_r] \tag{32}$$

$$\varepsilon_2(\omega) = \frac{\gamma\omega_p^2}{\omega(\omega^2 + \gamma^2)} = Im[\varepsilon_r] \tag{33}$$

A depender do metal, o modelo de Drude descreve razoavelmente bem o comportamento da permissividade na região visível do espectro eletromagnético. Porém, ao compararmos os dados experimentais fornecidos por Palik (35) com esse modelo, veremos uma discrepância nos valores de ε_1 e ε_2, sobretudo para a parte imaginária. Medidas da permissividade em metais de nosso interesse (Ag e Au) comprovam isso, como esquematizado nas próximas páginas.



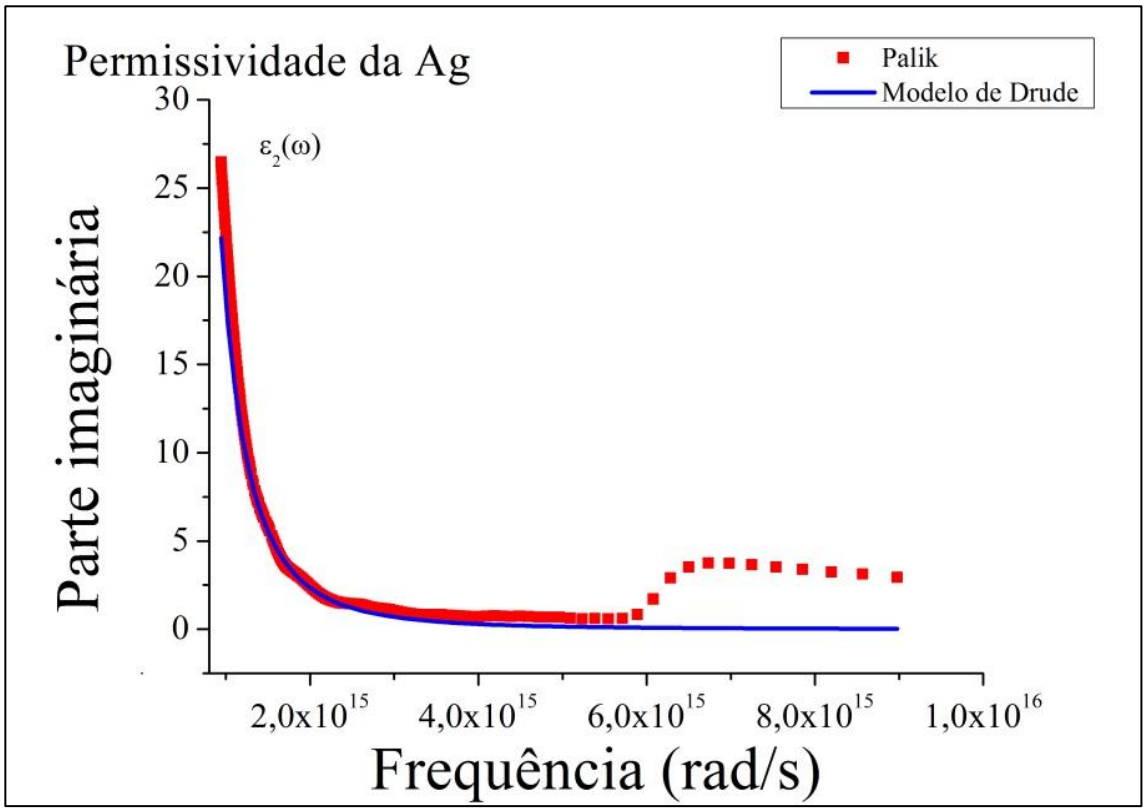


Figura 7 - Comparação entre os dados tabelados (pontos) e o modelo de Drude (linhas) para a permissividade da prata. No gráfico acima temos a parte real e abaixo a parte imaginária.

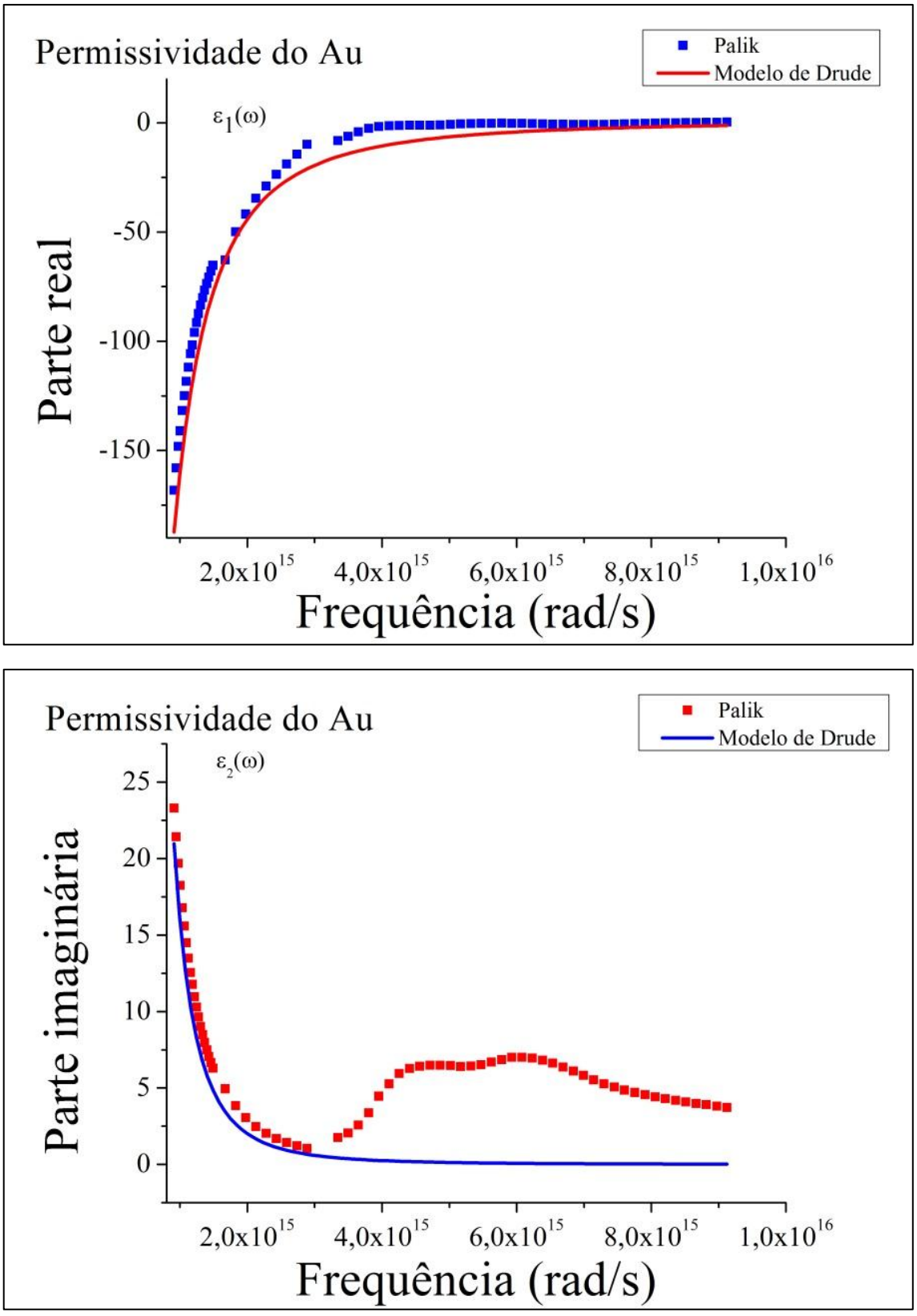


Figura 8 - Comparação entre os dados tabelados (pontos) com o modelo de Drude (linhas) para a permissividade do ouro. A parte real está plotada no gráfico superior e a imaginária no gráfico inferior.

Percebemos, a partir da análise dos gráficos anteriores, que para obtermos uma descrição correta do plasmon num espectro considerável de frequências (em especial o do visível), não podemos nos valer completamente do modelo de Drude, visto que Drude desenvolveu sua teoria antes do advento da mecânica quântica, e sem levar em conta fenômenos desta natureza como, por exemplo, as transições que os elétrons realizam entre as bandas de energia. Quando eles transitam de uma banda à outra podem absorver (ou emitir) fótons, de maneira a mudar a permissividade prevista teoricamente. Verificamos tal fato ao observar as partes imaginárias de ε_r, em especial para o ouro: a presença de dois picos, quase imperceptíveis entre $4.10^{15}\ rad/s$ e $6.10^{15} rad/s$, sugere duas transições realizadas pelos elétrons. Fazer o ajuste (*fitting*) dessa curva não é uma tarefa trivial dependendo do metal, pois pode haver mais do que uma transição. Devido a isso, a princípio é conveniente considerarmos a incidência de uma onda monocromática, cuja frequência (ou comprimento de onda) esteja razoavelmente de acordo tanto com o modelo teórico de Drude quanto para os valores tabelados experimentalmente. Ao plotarmos as permissividades em função do comprimento de onda, podemos escolher a fonte laser adequada para evitar problemas em relação às transições eletrônicas, como estão esquematizadas nas figuras 9 e 10.

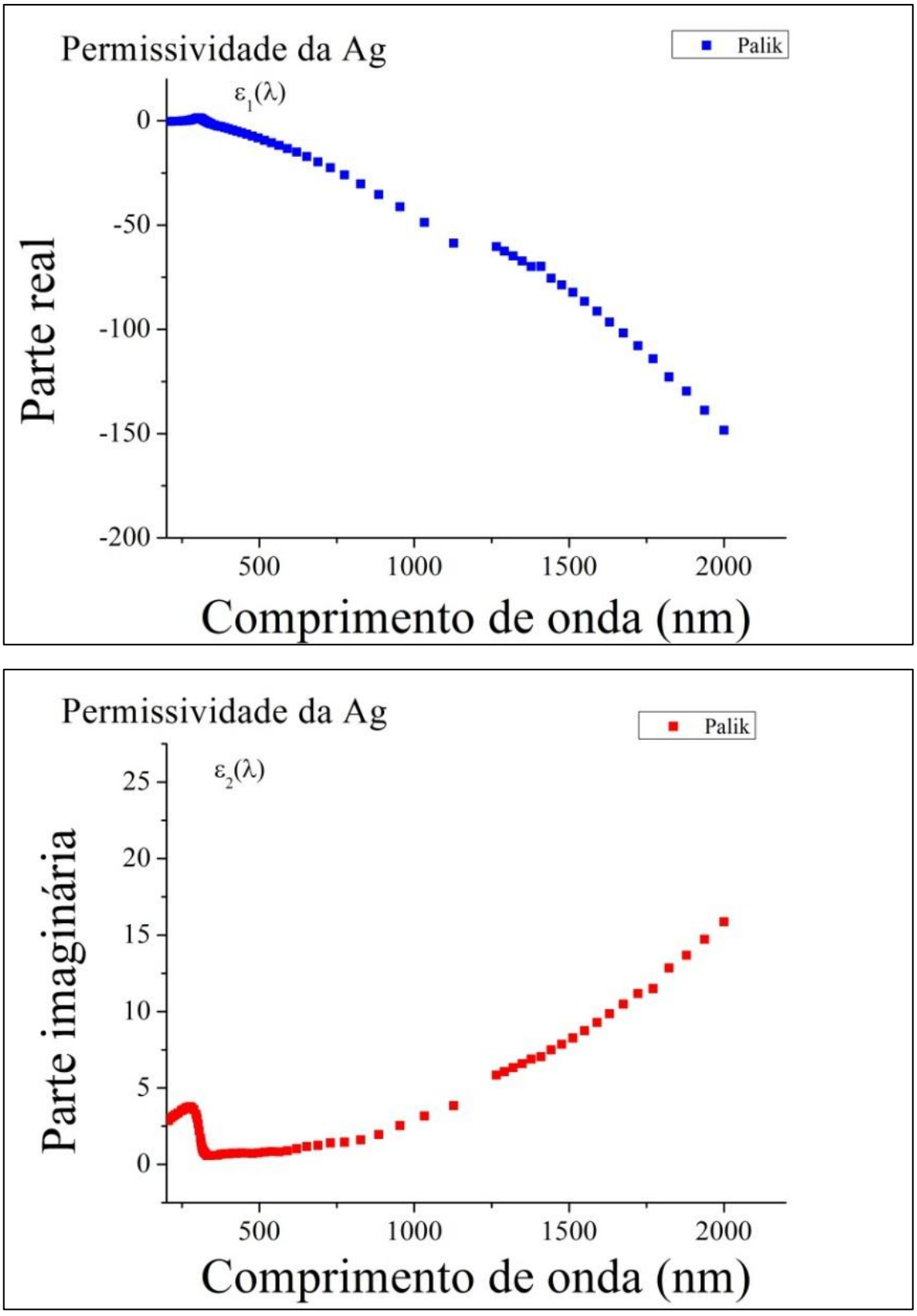
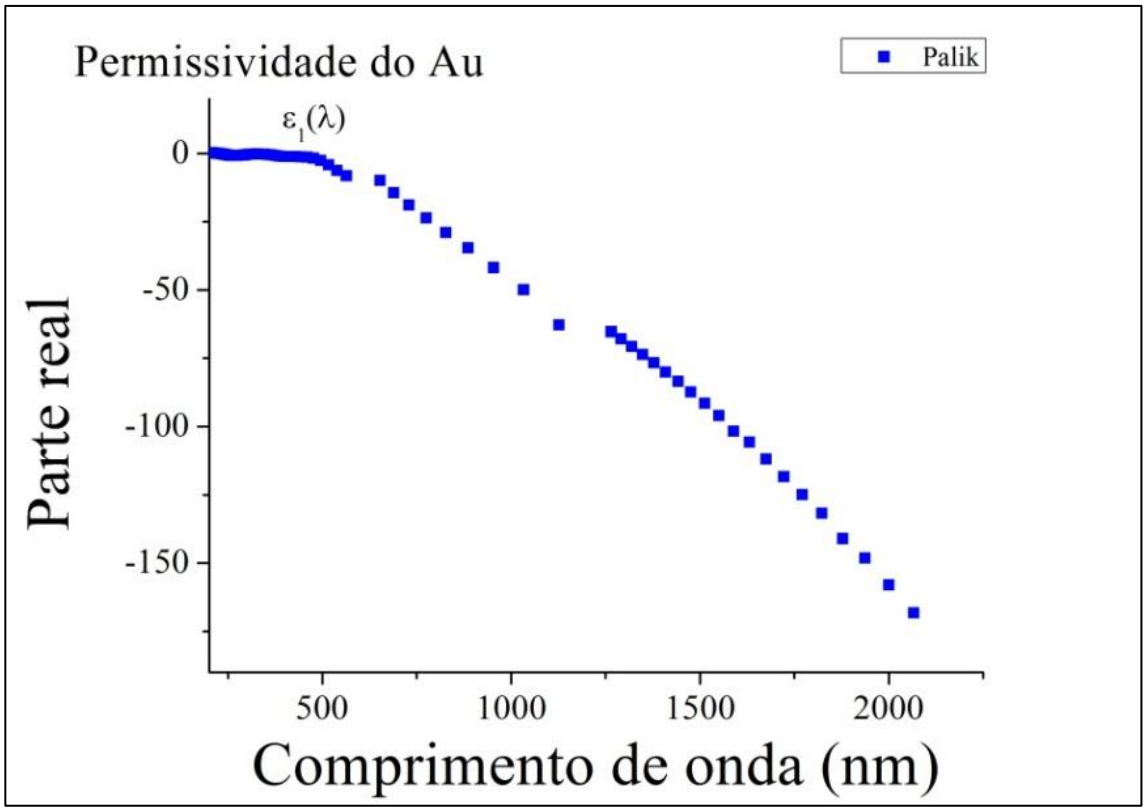


Figura 9 - Plotes das partes real (acima) e imaginária (abaixo) da permissividade da prata em função do comprimento onda (λ) para os dados tabelados (Palik, 1985).



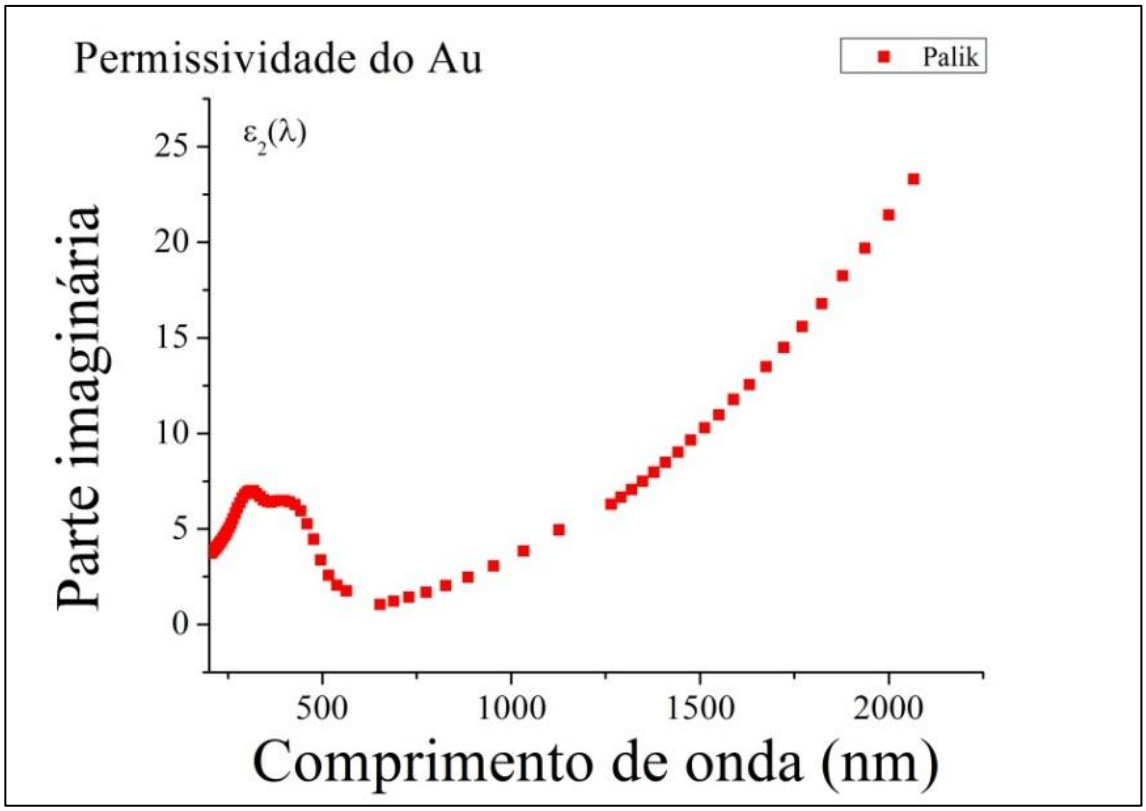


Figura 10 - Plotes das partes real (acima) e imaginária (abaixo) da permissividade do ouro em função do comprimento de onda (λ) para os dados tabelados. (35)

Durante nosso estudo utilizamos duas fontes de laser com comprimentos de onda $\lambda = 632.8\,nm$ e $\lambda = 488\,nm$. Quando convertemos tais valores em termos da frequência angular verificamos qual a melhor fonte a ser utilizada ao iluminarmos os filmes de Au e Ag. A tabela abaixo fornece os dados necessários para a análise.

Tabela 2 - Valores correspondentes em frequência para os comprimentos de onda utilizados

Comprimento de onda (nm)	**Frequência angular (rad/s)**
488	3.863×10^{15}
632.8	2.978×10^{15}

Localizamos tais valores no intervalo de frequências, e vimos que a fonte de 632.8nm se adequa melhor para o Au, enquanto que para a Ag, ambas as fontes são boas escolhas. Para efeitos de comparação, adotamos a fonte de comprimento de onda 632.8 nm para estudar o filme de Au, e a de 488 nm para a Ag. Abaixo seguem as tabelas contendo os valores das partes real e imaginária, tanto do índice de refração (η e κ, respectivamente), quanto da permissividade, retirados de (Palik, 1985) para Au e Ag nos comprimentos de onda mencionados.

Tabela 3 - Valores das permissividades da Prata (Ag) e do Ouro (Au) para $\lambda = 632.8\,nm$ (35)

Metal	$\boldsymbol{\eta}$	$\boldsymbol{\kappa}$	$\boldsymbol{\varepsilon_1}$	$\boldsymbol{\varepsilon_2}$
Ouro	0.19715	3.0899	-9.51	1.22
Prata	0.13455	3.9865	-15.9	1.07

Tabela 4 - Valores das permissividades da Prata (Ag) e do Ouro (Au) para $\lambda = 488\,nm$ (35)

Metal	$\boldsymbol{\eta}$	$\boldsymbol{\kappa}$	$\boldsymbol{\varepsilon_1}$	$\boldsymbol{\varepsilon_2}$
Ouro	1.051547	1.8217	-2.21	3.83
Prata	0.13083	2.8135	-7.89	0.74

As quantidades η e κ estão relacionadas com ε_1 e ε_2, por meio da equação $n^2 = \varepsilon$ que resulta em:

$$\begin{cases} \varepsilon_1 = \eta^2 - \kappa^2 & (34.1) \\ \varepsilon_2 = 2\eta\kappa & (34.2) \end{cases}$$

Existem situações em que desejamos simular as propriedades plasmônicas de determinada estrutura para um espectro de comprimentos de onda. Como vimos, se considerarmos apenas o modelo de Drude para descrever a permissividade dos metais, cometemos o erro de não levar em conta os efeitos das transições eletrônicas. Para evitar esse tipo de problema, ajustamos as curvas para ε_1 e ε_2.

2.3 Permissividade em dielétricos

Diferentemente do que ocorre em condutores, nos dielétricos os elétrons estão fortemente ligados aos íons que constituem o meio. Desta maneira, podemos desprezar a contribuição da condutividade na dispersão óptica em dielétricos; isso quer dizer que o termo de amortecimento é pequeno ($\gamma_n \ll 1$) frente à influência da força restauradora (relacionada com a frequência ω_{o_n}). Com tais considerações, percebemos que a expressão para a permissividade obtida no começo do capítulo se reduz a uma quantidade real.

$$\varepsilon_r = 1 + \frac{Ne^2}{\varepsilon_o m}\sum_n \frac{f_n}{\omega_{o_n}^2 - \omega^2} \tag{35}$$

É comum apresentar a permissividade de dielétricos (sólidos ou líquidos) em termos do comprimento de onda, por meio da equação de Sellmeier, derivada da expressão anterior:

$$\varepsilon_r(\lambda) = A + \frac{B}{1 - \frac{C}{\lambda^2}} + \frac{D}{1 - \frac{E}{\lambda^2}} = n^2(\lambda) \tag{36}$$

Os coeficientes de A até E são tabelados, pois variam conforme o material. Outra informação relevante é que a equação de Sellmeier, da maneira de como foi apresentada, está definida para comprimentos de onda da ordem de micrometros ($\lambda \propto \mu m$). Discussões mais detalhadas a respeito da dispersão óptica em dielétricos, em especial para vidros, são feitas por. (36) Modelamos os filmes metálicos depositados em vidro BK7, pois este apresenta pouca variação no índice de refração na região do visível do espectro eletromagnético. Evidenciamos isso ao observar o gráfico da equação de Sellmeier para o BK7 esquematizado na figura 11. Os valores específicos dos coeficientes de A até E, referentes a esse dielétrico

estão na tabela 4. Os coeficientes C e E apresentam dimensão de área (m^2) para preservar a característica adimensional do índice de refração.

Tabela 5 - Coeficientes da equação de Sellmeier referentes ao vidro BK7 (36)

A	B	C	D	E
1.43131380	0.84014624	$1.28897582 \times 10^{-2}$	0.97506873	100

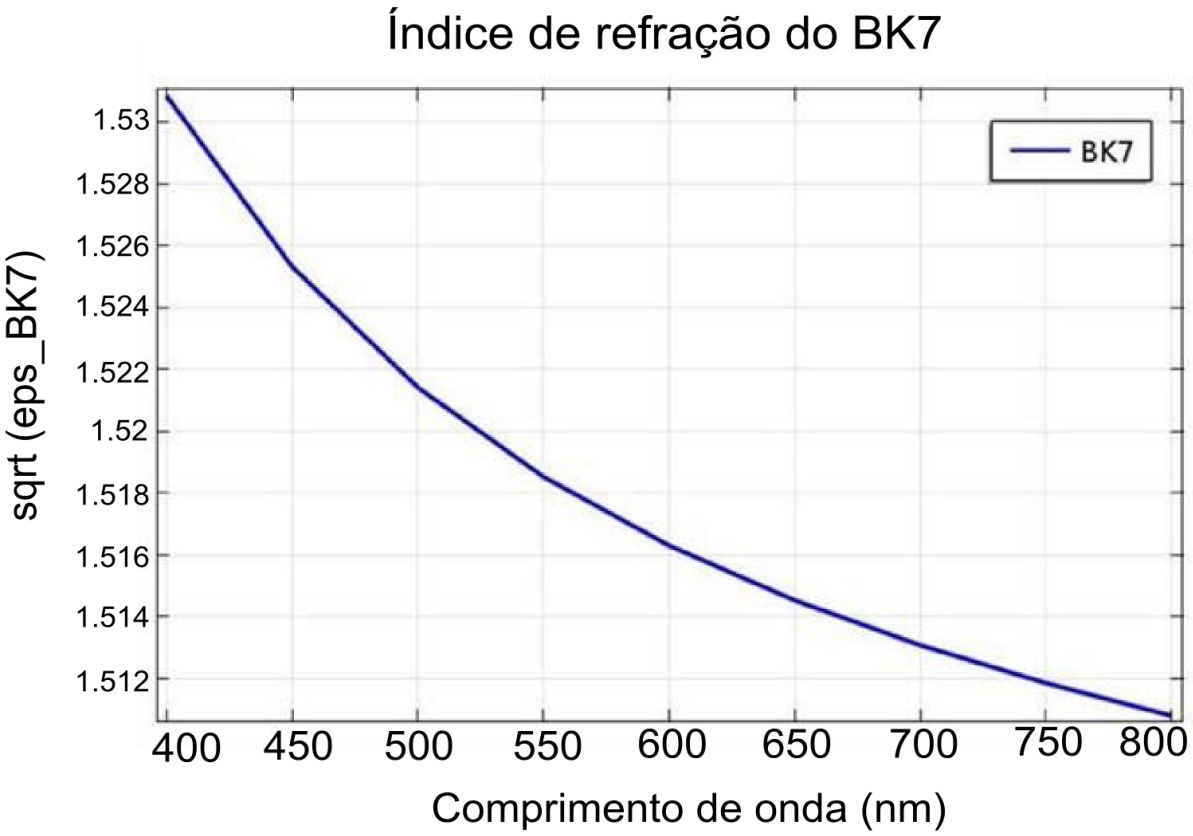


Figura 11 - Índice de refração do vidro BK7 na região do visível obtido a partir da equação de Sellmeier

2.4 Consequência da análise da relação de dispersão dos plasmons

Uma vez que compreendemos a relação de dispersão dos plasmons de *bulk* e de superfície em metais e a permissividade em dielétricos, é possível obter informações relevantes a respeito do trabalho de Ebbesen (1) que é referência de muitos trabalhos na área da plasmônica. A figura 12 corresponde a uma versão adaptada do gráfico da transmissão óptica para a estrutura periódica de (1) apresentada no início do capítulo 1. O pico da esquerda localizado em λ= 326 nm corresponde aos efeitos devidos ao plasmon de *bulk*, uma vez que ele está presente na faixa de pequenos comprimentos de onda, ou altas frequências, justamente a região do ramo superior da relação de dispersão da figura 6. Em contrapartida, os dois picos da direita, são o resultado da ação dos plasmons de superfície. Os picos estão definidos em intervalos de grandes comprimentos de onda, ou baixas frequências, o que corresponde ao ramo inferior da relação de dispersão da figura 6. A transmissão óptica extraordinária é devida justamente aos plasmons de superfície, uma vez que foi possível detectar um máximo de transmissão mesmo para comprimentos de onda quase dez vezes maiores que a abertura dos orifícios (da ordem de 150 nm)

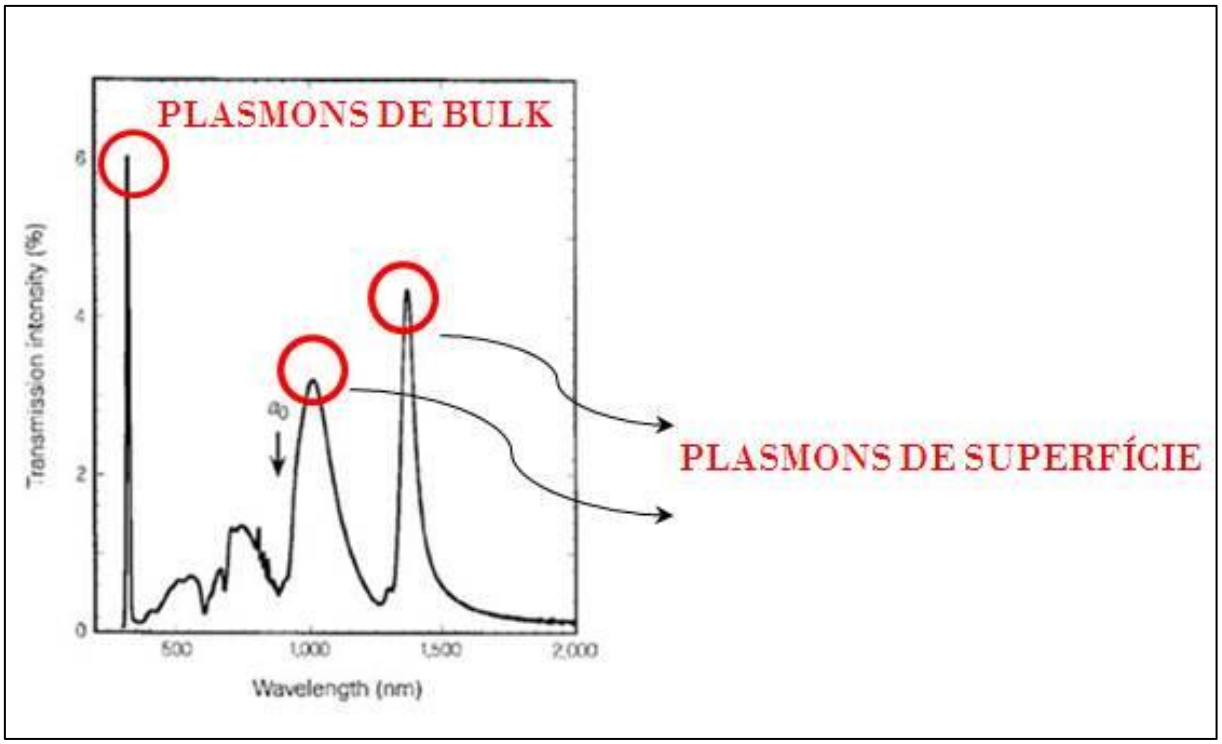


Figura 12 – Gráfico da intensidade de transmissão óptica para um arranjo periódico de orifícios em um filme de prata. À esquerda o pico de transmissão é devido aos plasmons de *bulk*, enquanto os picos da direita são resultados da ação dos plasmons de superfície. (Adaptado de (1))

3 Fabricação de fendas em superfícies metálicas

Neste capítulo iremos fazer uma descrição sobre os processos de fabricação das estruturas utilizadas no desenvolvimento deste trabalho. Serão também descritas as técnicas de caracterização estrutural e medidas de transmissão através das estruturas SW.

Estruturas plasmônicas podem ser obtidas por diversas técnicas convencionais, dentre elas temos: litografia óptica, litografia de feixe de elétrons, litografia de feixe de íons, também conhecida como focused-ion beam (FIB). Considerando que no presente trabalho a litografia via FIB foi extensivamente utilizada, vamos discutir brevemente apenas essa técnica de fabricação. Uma discussão abrangente das outras técnicas mencionadas (assim como da litografia via FIB) está bem apresentada no trabalho de Lindquist et al. (37)

A litografia via FIB tem sido extensivamente empregada para fabricação de nanoestruturas metálicas, por meio de padrões feitos em substratos (38-40), demonstram isso. Ela também pode ser utilizada para deposição de vários metais por meio do uso da deposição induzida por feixe de íons (41), para dopagem de semicondutores (38, 42), e na preparação de amostras em microscópios eletrônicos de transmissão (TEM). (43-44) Tais métodos provaram ser eficientes em fazer testes de projetos de dispositivos e geometrias, corrigir máscaras ou traços elétricos, ou até produzir imagens de alta resolução de feixe de íons, e tem sido uma ferramenta essencial para o desenvolvimento da plasmônica.

A interferência do FIB sobre certa superfície oferece uma diferente forma de padronização em nanoescala comparada com outros métodos convencionais que utilizam resiste, exposição ou revelação. Em geral, o potencial acelerador dos íons é da ordem de dezenas de keV, e o intervalo da corrente dos feixes varia de muitas ordens de magnitude, desde pico ampères até alguns nano ampères. Dependendo da coluna óptica, da fonte de íons e da corrente do feixe, o tamanho do *spot* do feixe pode variar desde aproximadamente 5 nm até 1micrometro. (1μm). Várias espécies de íons podem ser utilizadas na montagem, tais como Al, Au, B, Be, Cu, Ga, Ge, Fe, In, Li, P, Pb e Si, sendo os semicondutores dopantes os mais comumente usados como relatados em. (38-39) Em particular, Ga é vastamente utilizado devido à sua baixa temperatura de fusão (30 °C), baixa volatilidade e baixa pressão de vapor. (45)

O sistema FIB é baseado em uma fonte de íon líquido-metal a qual é utilizada para produzir um feixe de íons. (45) A fonte de metal é aquecida, de tal modo que ela escorra e umedeça uma fina agulha de tungstênio. Uma voltagem de extração aplicada entre a fonte metálica e uma abertura de extração força o metal na fase líquida a ser puxado para o interior do cone de "Taylor–Gilbert" extremamente afiado. (45-46) O equilíbrio entre a força eletrostática produzida pela voltagem de extração e as tensões superficiais presentes no líquido (39), conferem à fonte líquida o tamanho de ponta da ordem de alguns nanômetros. (38) Então, os íons são extraídos da ponta desse cone por emissão de campo. Como oposição aos sistemas de imagem via feixe de elétrons, as "lentes" empregadas no FIB são eletrostáticas e não magnéticas. Tal fato ocorre porque a força de Lorentz sobre íons pesados, como aqueles mencionados, é muito menor do que em elétrons com a mesma energia cinética. (45) Algumas semelhanças e diferenças nestes dois tipos de sistemas estão apresentadas na parte (a) da figura 12. Para produzir padrões no FIB é utilizado um feixe de rápida exposição e baixa intensidade, caso contrário existe a possibilidade de danificar os padrões a serem fabricados. Em sistemas comerciais muitos modelos podem ser desenhados pelo uso de arquivos pré-desenvolvidos em formato CAD, ou utilizando opções dentro do próprio software. O tamanho final e a resolução do feixe focado podem, em geral, ser afetados por aberração cromática, isto é, a energia de dispersão dos íons no feixe, com uma boa aproximação pode ser considerada como um perfil gaussiano. O tamanho mínimo do feixe está na ordem de 5 nm. O esquema da fonte de íons é representado na parte (b) da figura 12.

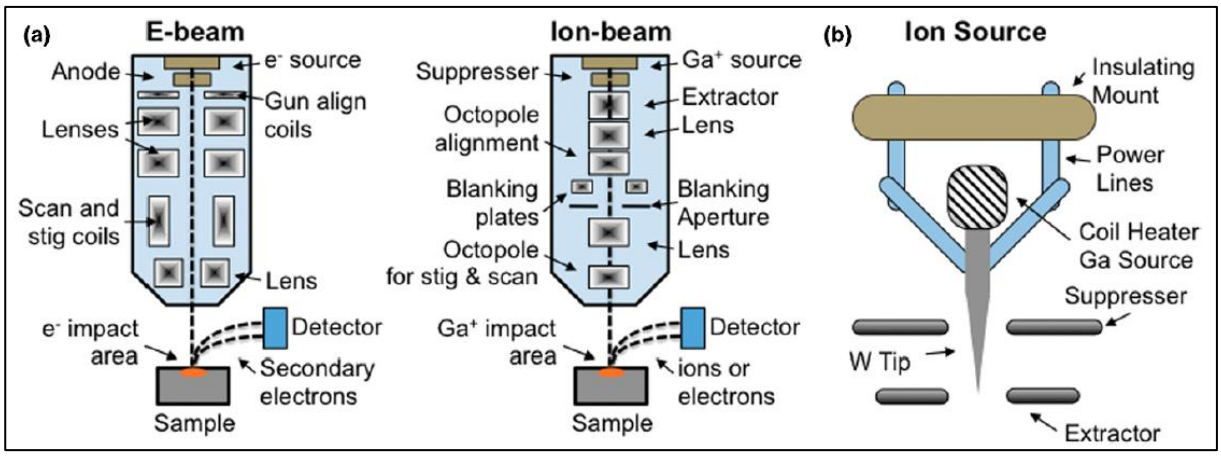


Figura 13 - **(**a) Esquema no qual são mostradas as similaridades e diferenças entre um sistema de feixe de elétrons (à esquerda) e outro de feixe de íons (à direita). (b) Representação da fonte metal-líquido de Gálio. (37)

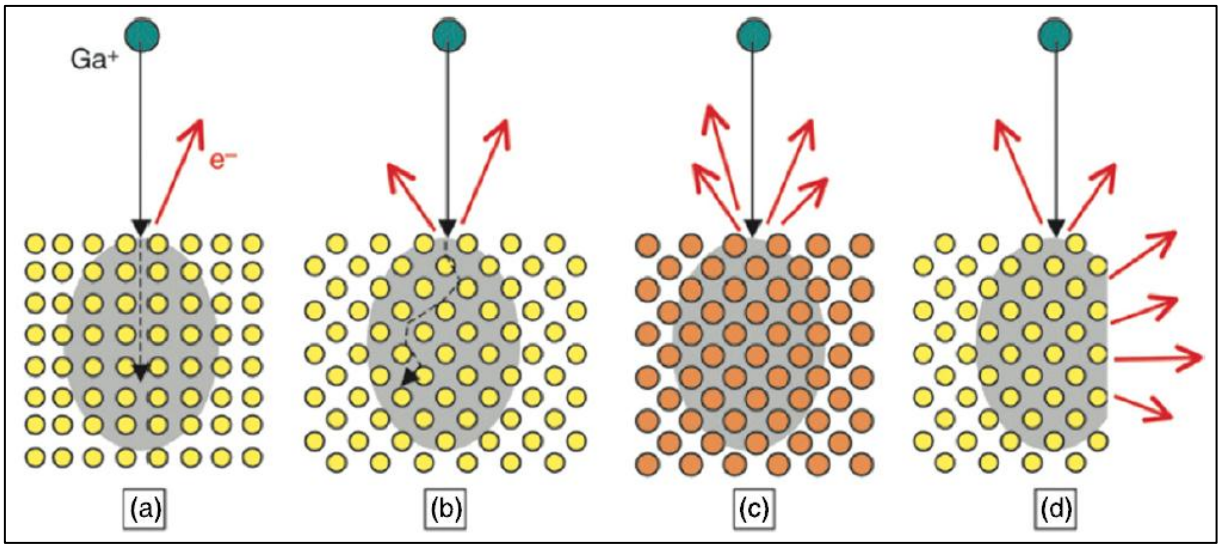


Figura 14 - A orientação cristalina da amostra pode afetar as taxas de *sputtering* do FIB, como mostrado em (a) e (b). (c) A taxa de *sputtering* também pode ser afetada pela massa dos átomos e (d) por efeitos de localidade da amostra. (45)

No processo de fabricação de um substrato utilizando FIB, muitos efeitos podem ser produzidos, com, aproximadamente, de um a cinco átomos por íon incidente, dependendo da energia do mesmo ou do substrato. É possível também deslocar átomos de suas posições de equilíbrio, induzir reações químicas e usar os elétrons que emergem da colisão com o feixe, em processos de formação de imagens. O perfil gaussiano do feixe não é o único fator do qual a forma da ranhura depende. (38) Efeitos de redeposição e auto focalização podem induzir diversas formas geométricas distintas, dependendo do modelo projetado, seja ele feito em um único ou em múltiplos passos, ainda que com a mesma dose total. Além disso, fabricar uma ranhura com altas quantidades de íons desvia o feixe de um perfil gaussiano, resultando em profundidades inesperadas como, por exemplo, ranhuras no formato de V. (38) O processo de fabricação do FIB depende de muitos aspectos, tais como o material a ser modelado, o ângulo de incidência do feixe de íons e a redeposição dos materiais espalhados, mesmo aqueles com orientação cristalina, como esboçado na figura 14. A dependência da orientação do material espalhado pelo FIB também pode acarretar diversas rugosidades nas superfícies de amostras poli-cristalinas. Entretanto, com a cautela necessária, é possível produzir estruturas bem definidas. (37)

O FIB também pode ser utilizado na deposição de vários metais (tais como W, Pt, e Au) via deposição química por vapor, ou CVD (da sigla em inglês para *chemical vapour deposition*), isso pode ser feito pelo uso do sistema de injeção de gás , ou GIS (também da sigla em inglês para *gas injection system*). (45) Uma alta eficiência na deposição pode ser

alcançada, com taxas de acumulação por volta de 1 μm por minuto, pelo ajuste das taxas de fluxo de gás e pela densidade de corrente do feixe de íon. A reação dos feixes de íon com os materiais precursores oferece a habilidade de soldar micromanipuladores em partes específicas de um substrato *in situ*. Com o subsequente corte e desbaste do FIB, tais partes são retiradas, e geralmente montadas em uma grade de imagem de microscopia eletrônica de transmissão (TEM). (44) Uma deficiência neste tipo de sistema é que metais depositados via FIB apresentam alta contaminação por carbono. Também pode ser usado em outros sistemas GIS ao invés de deposição de metais, para aumentar a taxa de corrosão inerente ao FIB.

Os sistemas FIB oferecem vantagens significativas, como uma escrita direta, nano fabricação de alta resolução com habilidade de espalhamento, imagem, análise e depósito. Também é possível desenhar modelos em 2D e 3D. (40) Entretanto, há certas limitações em sua utilização como ferramenta de padronização, particularmente para metais. O corte feito em FIB é uma técnica de litografia em série, tal como a litografia por feixe de elétrons, modelando apenas um spot ou dispositivo por vez, diferente da litografia óptica na qual os modelos do *wafer* são expostos de uma única vez. Uma grande área de padronização não é factível. Para modelos com características de alta resolução (< 100 nm), o corte em FIB também pode ser lento, desde que correntes consideravelmente baixas (~ pA) sejam utilizadas. Juntamente com os danos na amostra induzidos pelo FIB (44), os íons de Ga são implantados em frações atômicas de 1-50% próximo à superfície da amostra. (45) As propriedades plasmônicas dos modelos metálicos dos filmes podem ser reduzidas a esse processo. As vantagens e desvantagens da fabricação em FIB devem ser consideradas quando desenvolvemos novos dispositivos ópticos e eletrônicos, pois tais características podem interferir nas medidas de propriedades físicas relevantes. Em superfícies metálicas, por exemplo, o comprimento de propagação SPP é drasticamente reduzido devido à alta rugosidade da amostra. (37). Quando combinado a uma técnica de remoção, muitos dos problemas relacionados à rugosidade e contaminação são minimizados, visto que o FIB é empregado apenas como um modelo padrão reutilizável, deixando lisos os filmes metálicos resultantes e livres de contaminação. (37) Nas próximas figuras seguem as imagens em microscopia eletrônica de varredura de algumas amostras de filmes utilizadas ao longo do trabalho.

As fendas utilizadas no nosso trabalho foram fabricadas com um FIB FEI Quanta 3D-200 i (*dual beam*). O feixe de Ga^+ pode ser acelerado a uma energia de 30 keV a correntes de 1,5 pA a 1,0 nA. A fabricação das fendas foi feita a partir de filmes de Au e Ag que foram

depositados num substrato comercial de BK7 de 100 μm. A superfície do substrato de BK7 foi preparada com a deposição de 2μm de SiO_2 para eliminar imperfeições do substrato.

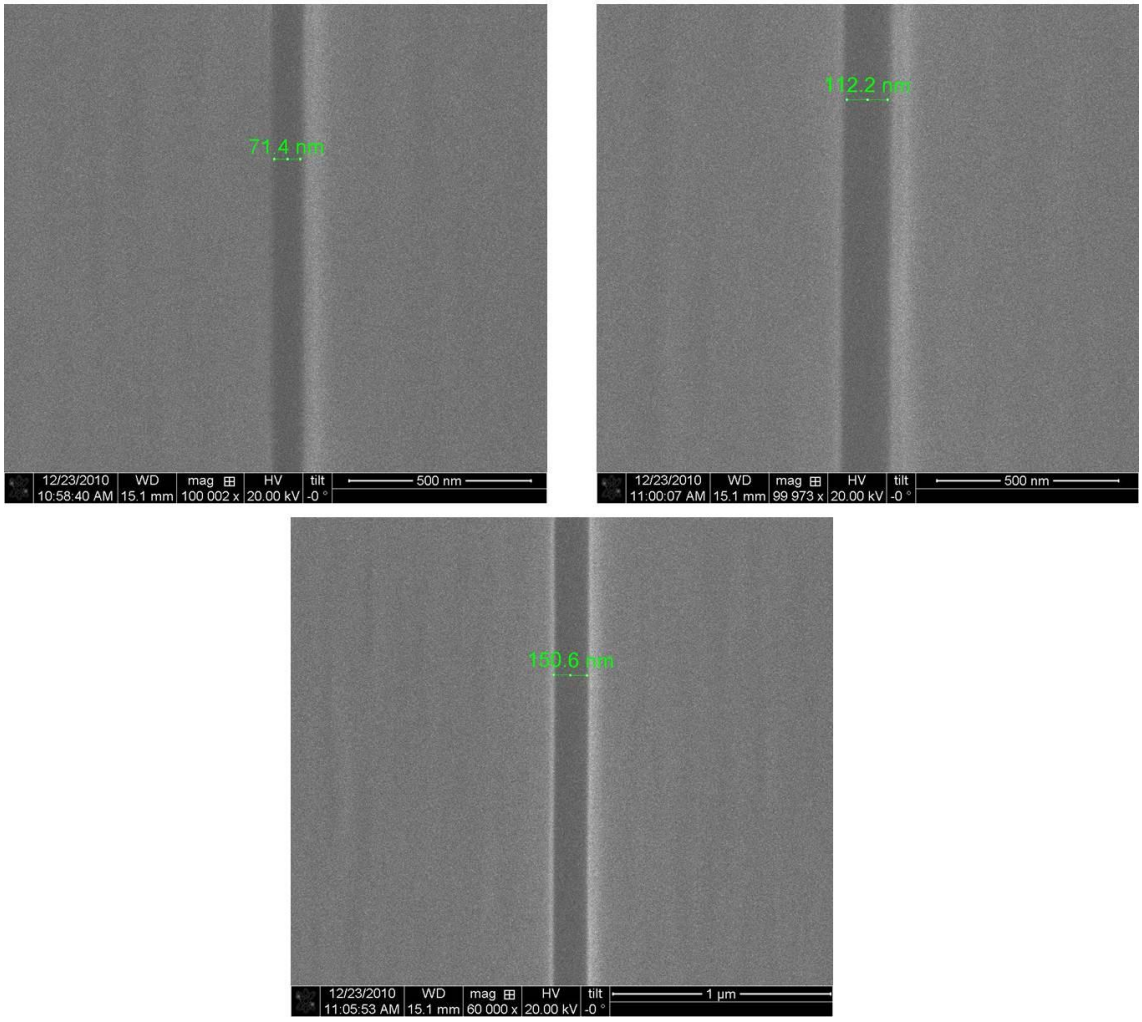


Figura 15 – Sequência de imagens obtidas por microscopia eletrônica de varredura de três fendas fabricadas sobre um filme de prata de 120 nm de espessura.

Os filmes de Ag e Au foram depositados pela técnica de evaporação térmica numa evaporadora Balzer BAE 2 SOT. A espessura do filme foi determinada *in situ* e aferida com um perfilômetro de contato.

A fabricação dos conjuntos de fendas em um mesmo filme foi realizada com o FIB. O comprimento total das fendas foi de 20 μm e a largura variou entre 70 e 270 nm. Para fabricação utilizou – se correntes de 30 pA. As figuras 14 e 15 mostram imagens obtidas com o feixe de elétrons de fendas em filmes de Ag e Au, respectivamente. Uma série de filmes de

Ag com espessuras de 120, 160, 200, 270 e 330 nm e outra série de filmes de Au com espessuras de 120, 180 260, 360 e 450 nm foram depositadas conforme o procedimento descrito anteriormente.

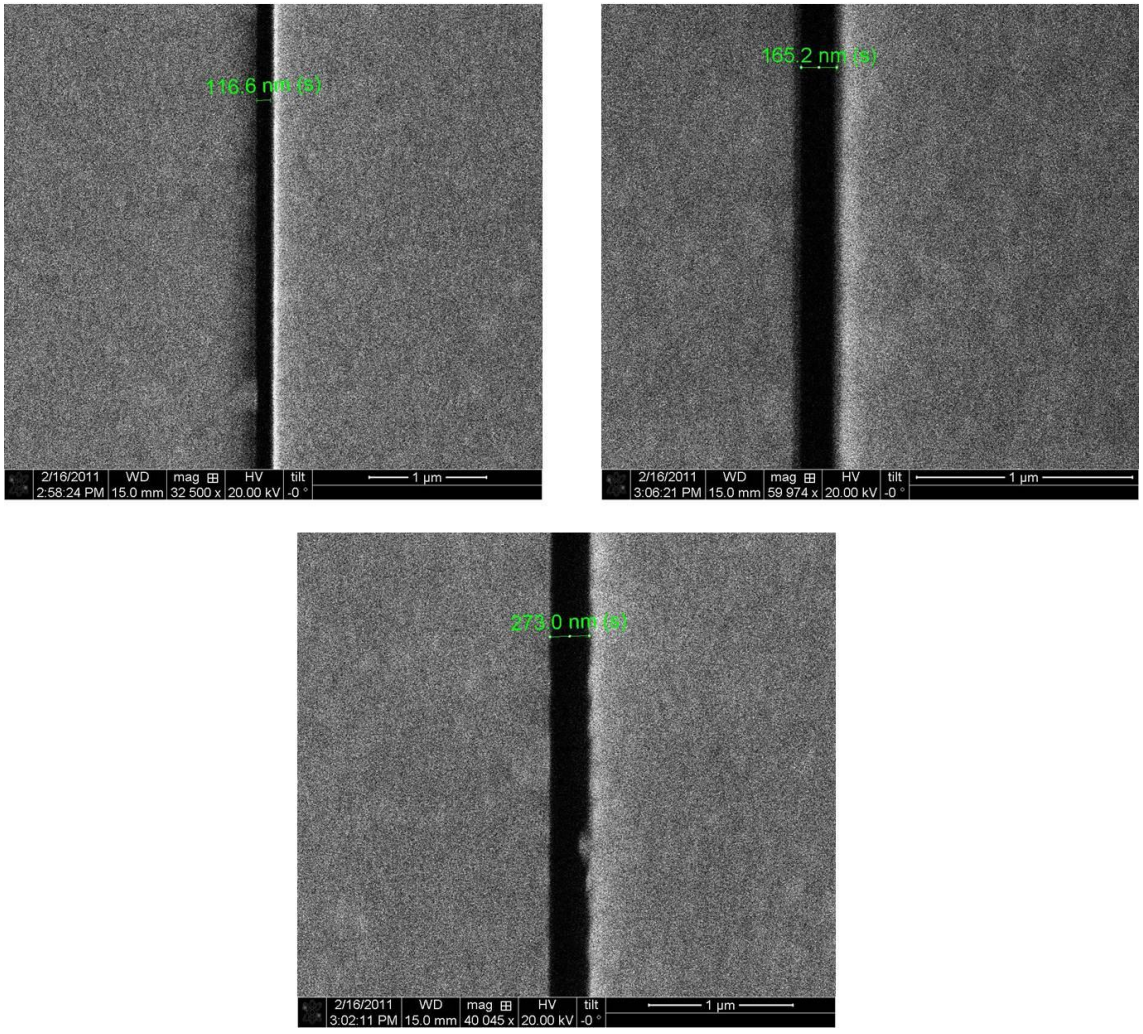


Figura 16 – Sequência de imagens obtidas por microscopia eletrônica de varredura de três fendas fabricadas sobre um filme de ouro de 360 nm de espessura.

Foram fabricadas fendas nos filmes de Ag com larguras entre 70 e 150 nm (vide figura 14) e nos filmes de Au com larguras entre 120 e 270 nm (vide figura 15).

As medidas de transmissão foram feitas com microscópio Leica acoplado a um sistema Raman Renishaw RM 2000 conforme esquematizado na figura abaixo. As medidas de transmissão foram realizadas com comprimentos de onda de 488 nm (para filmes de Ag) e 632,8 nm (para filmes de Au) derivados de lasers de Argônio (Ar) e Hélio-Neônio (HeNe) com potência fixa de 1 μW. O feixe do laser é focalizado na superfície da amostra por uma

objetiva de 20x (de abertura numérica 0.4) na polarização TM (campo magnético paralelo ao eixo da fenda). A intensidade da luz transmitida pela fenda foi coletada por uma fibra óptica e conectada a uma CCD. A intensidade emitida foi obtida integrando-se toda a luz incidente, subtraindo-se posteriormente a intensidade de fundo, correspondente à transmissão do filme. Nesta configuração a detecção é feita no campo longínquo. O alinhamento da fenda com o feixe de laser, para a maximização do sinal é feito com um estágio de translação xy.

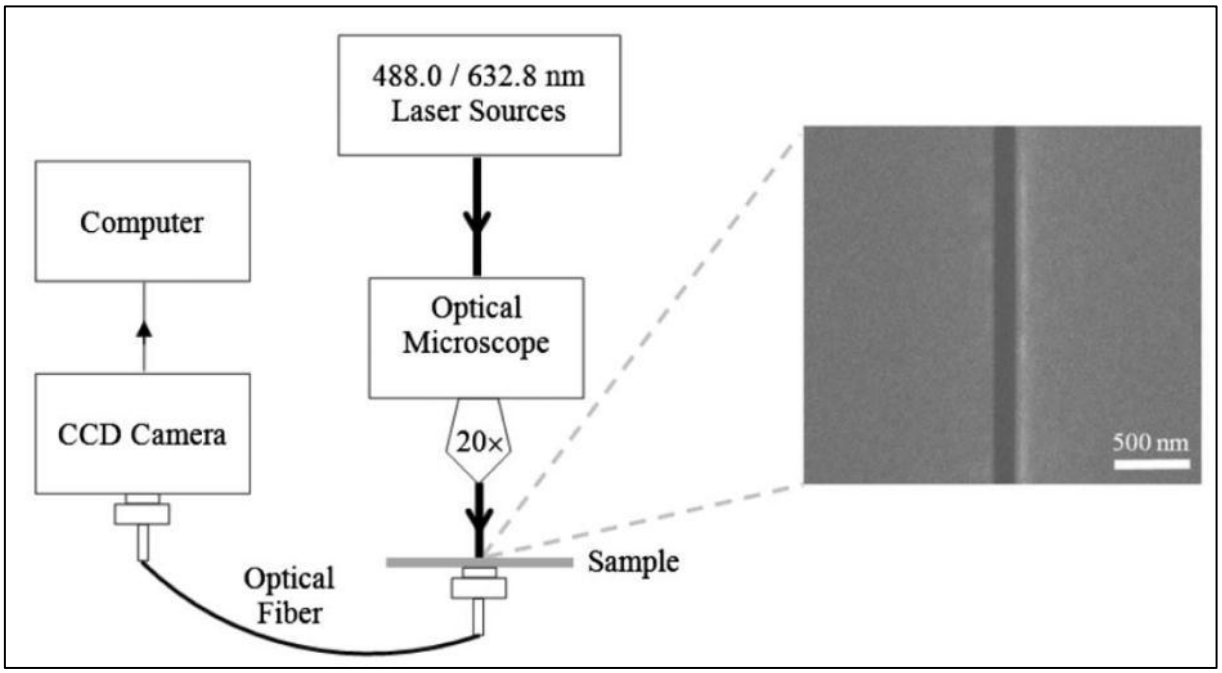


Figura 17 – O painel à esquerda mostra o esquema do experimento da transmissão óptica. 488,0 nm (para Ag) e 632,8 nm (para Au) de fontes de luz laser de Ar e HeNe, respectivamente, são focalizadas perpendicularmente sobre a superfície das amostras por lente objetiva de 20x. Uma câmera CCD registra a intensidade da transmissão através das fendas assim como a superfície da amostra foi formada. O painel da direita mostra uma imagem de microscopia eletrônica de varredura (com magnificação de 40000x) de uma estrutura típica. A fenda considerada possui aproximadamente 150 nm de largura e foi fabricada via FIB através de uma camada de Ag com 200 nm de espessura. Nos experimentos, as espessuras dos filmes de Ag e Au variaram no intervalo de 100-450 nm. As larguras variaram de 70 a 270 nm. (24)

4 Simulações e Resultados

No início do capítulo 2 resolvemos as equações de Maxwell para uma onda plana que incidia sobre determinado filme metálico em contato com certo dielétrico planar. Como relatamos anteriormente, a geração e o acoplamento do plasmon na interface entre esses dois meios dependem, além das propriedades ópticas dos mesmos como a permissividade e a condutividade elétrica, mas também da polarização da onda incidente. É de nosso interesse conhecer, por meio de simulações computacionais, se tais condições são estendidas no caso em que fazemos uma fenda no filme metálico, cuja largura *w* apresente valores abaixo do limite de difração, isto é, vamos conceber a fenda como uma estrutura SW. Admitindo incidência normal à fenda e que o plano de incidência seja o plano *xy*, estudamos os dois casos de polarização mencionados anteriormente: TE e TM.

Quando a polarização da onda eletromagnética é TE, as componentes não nulas dos campos são dadas pelo conjunto (E_z, H_x e H_y). Vamos partir do caso em que não há fenda feita sobre o filme. Pelas condições de contorno dos campos, E_z que é paralela à superfície metálica, tem de ser contínua na travessia de um meio para o outro. Como o campo elétrico dentro de um condutor é nulo, logo, concluímos que E_z é zero na interface ar-metal. A presença desta componente do campo induz uma densidade de corrente de condução de módulo J_z, de maneira que H_x (componente que junto com E_z constitui a onda incidente) não seja contínua na interface. Quando a frente de onda incide sobre o metal a maior parte da radiação é refletida, gerando uma onda que se desloca no sentido oposto à onda original. Ao criarmos uma fenda no metal, não temos mais a presença das correntes no espaço deixado por ela. Tais correntes se localizarão apenas nas paredes e nas quinas da fenda, o que originará, pela lei de Ampère, a componente H_y do campo magnético. O fato da transmissão da fenda ser atenuada quando a polarização da onda for TE se deve à diferença de fase de $\frac{\pi}{2}$ entre o campo elétrico incidente E_z com as correntes J_z, ao passo que as componentes do campo magnético e J_z oscilam em fase. A contribuição da oscilação de H_x e H_y com as correntes para a transmissão não é significativa, dado que o campo magnético é ordens de grandeza menor ($\sim 10^{-8}$) comparado com o campo elétrico. A transmissão óptica neste caso será detectada apenas quando a abertura *w* da fenda tiver dimensão da ordem (ou maior que) $\frac{\lambda}{2}$, isto é, quando o limite de difração for atingido.

Em contrapartida, no caso em que a polarização da onda seja TM são as componentes H_z e E_x que definem a direção e o sentido da radiação incidente. As paredes e as quinas da fenda terão um acúmulo de cargas elétricas, originadas pela presença da densidade de corrente J_x; como E_x oscila no tempo, da mesma forma tal corrente também o fará. As cargas das quinas oscilarão como um dipolo elétrico, dado que haja troca de seus sinais de um lado para o outro. Portanto, vemos que nesse caso a fenda se comporta como uma antena; evidenciamos isso na figura 17 o plote da componente y do campo elétrico, proporcional às cargas presentes na superfície do filme. No caso das paredes da fenda, E_x está relacionada com as cargas superficiais. Estas cargas, além das correntes presentes nas paredes, conduzem a radiação para baixo. Ao atingir o substrato de vidro, um segundo dipolo é gerado.

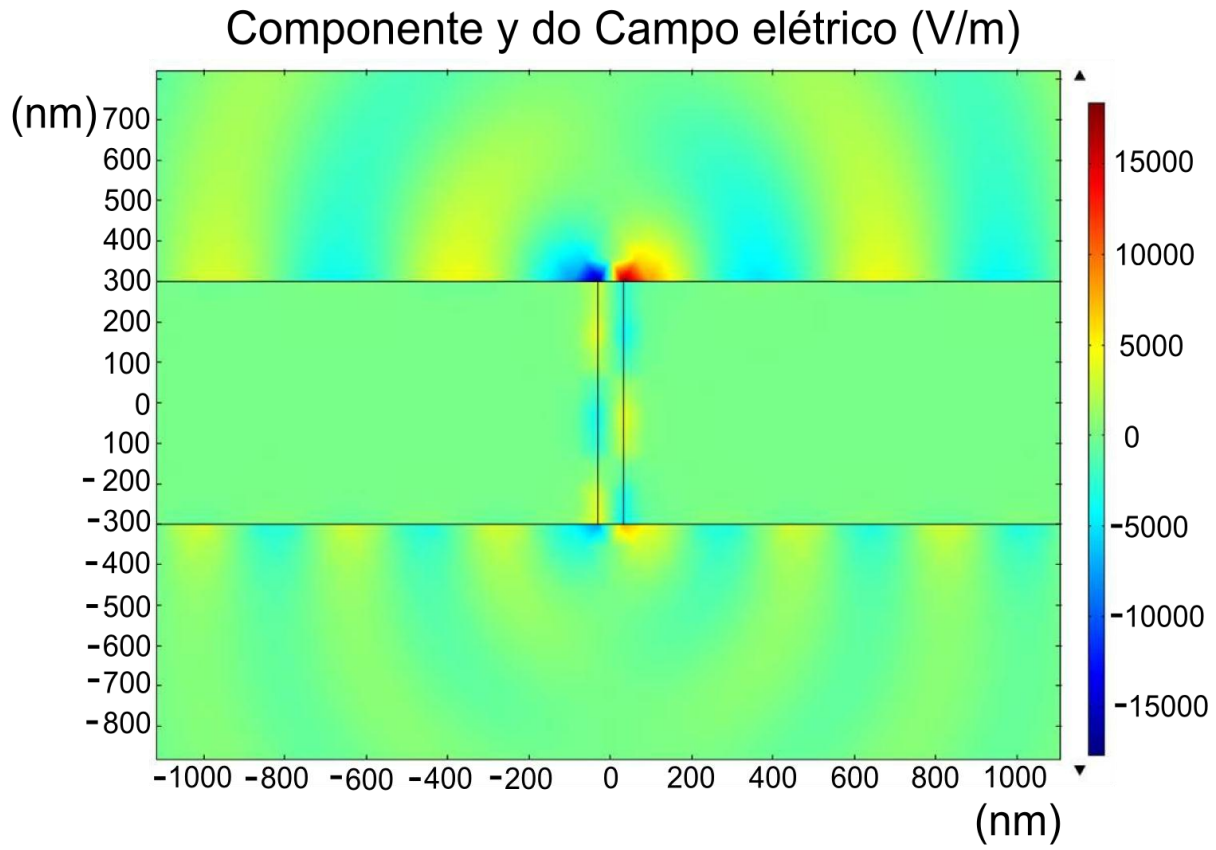


Figura 18 - Perfil da componente *y* do campo elétrico ao incidir na fenda em filme de ouro. A partir deste plote notamos a distribuição de cargas, proporcional ao campo, nas superfícies superior e inferior do filme. Além disso, é notória a formação do dipolo elétrico nas quinas da fenda. A espessura do filme (*t*) e a largura (*w*) da fenda valem 600 nm e 63 nm, respectivamente. O comprimento de onda (λ) do feixe incidente é de 633 nm.

Sendo que a componente do deslocamento elétrico ($\vec{D}$) normal às paredes da fenda é proporcional à densidade superficial de carga (ς) presente nelas, tal vetor serve de parâmetro para atribuirmos informação a respeito do comportamento das cargas, não apenas nas paredes da fenda, mas também nas interfaces ar-metal e metal-vidro. Observamos a partir da figura 18, que existe uma diferença de fase de $\frac{\pi}{2}$ entre as correntes e as cargas no interior da fenda. Quando a corrente é máxima, a carga é mínima e vice-versa, o que está de acordo com a equação da continuidade. Vemos que a diferença de fase entre correntes e cargas na parte inferior do filme é menos expressiva.

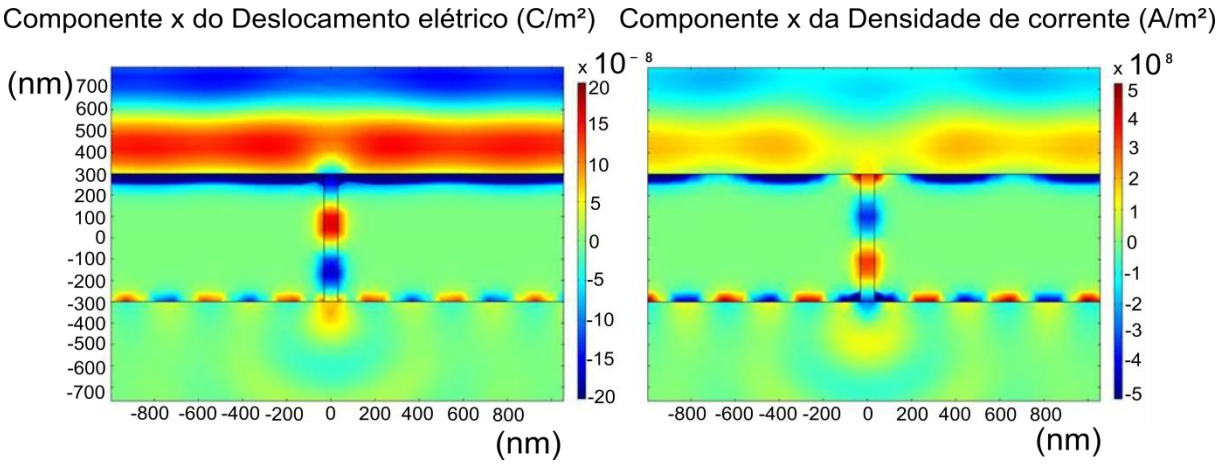


Figura 19 - Plotes da componente x do deslocamento elétrico (D_x), perpendicular às paredes da fenda (à esquerda) e da densidade de corrente (à direita). Vemos que no interior da fenda as correntes e as cargas, proporcionais a D_x, estão fora de fase. Nesta simulação temos um filme de ouro com 600 nm de espessura (t) e 63 nm de largura (w), incidido por feixe com 633 nm de comprimento de onda (λ).

A detecção da transmissão óptica é possível nesse caso graças ao deslocamento das cargas e correntes superficiais presentes nas paredes da fenda, mesmo para aquelas cujas aberturas sejam muito menores do que o comprimento de onda da radiação incidente.

A seguir discutiremos qual a influência das dimensões de nossa nanoestrutura na detecção da transmissão óptica, como a espessura do filme e a largura da fenda.

4.1 Espectros de transmissão da fenda em filmes de Ouro e Prata

Uma vez que conhecemos em quais situações os plasmons são gerados e qual a origem da transmissão óptica por fendas SW, é interessante saber primeiramente o espectro de transmissão de tais estruturas. Essa informação é essencial, pois, a partir dela, encontraremos para quais valores de comprimento de onda obteremos maior eficiência na transmissão. Do ponto de vista da nanofabricação, veremos que esse espectro nos oferece também, com certa aproximação, quais dimensões da estrutura (espessura do filme ou largura da fenda) possam otimizar ou influenciar nas medidas. O interesse de obter o espectro de tal estrutura não é recente; trabalhos como reportado na referência (18) revelam isso. O que faremos a seguir será adaptar as simulações da transmissão a partir das dimensões das fendas que conseguimos obter experimentalmente. Elas servirão de parâmetro ao compararmos uma transmissão com a outra.

Faremos nossa análise com os filmes de prata e ouro depositados em substrato constituído de vidro BK7. Na simulação computacional em que utilizamos o software COMSOL Multiphysics®, escolhemos variarmos o comprimento de onda da radiação incidente entre 400 nm e 1600 nm, devido ao fato de que esse intervalo abrange boa parte das fontes de luz laser no visível e no infravermelho que podem ser reproduzidos experimentalmente.

4.1.1 Influência da espessura do filme no espectro de transmissão da fenda

Observamos primeiramente qual a influência da espessura (*t*) do filme de prata no espectro de transmissão da fenda. Para isso, fixamos um valor de 70 nm de largura (*w*) e simulamos para quatro espessuras diferentes. Na figura a seguir conferimos que quando o filme possuir 160 nm de espessura obteremos um pico na transmissão quando o comprimento de onda for próximo de 800 nm.

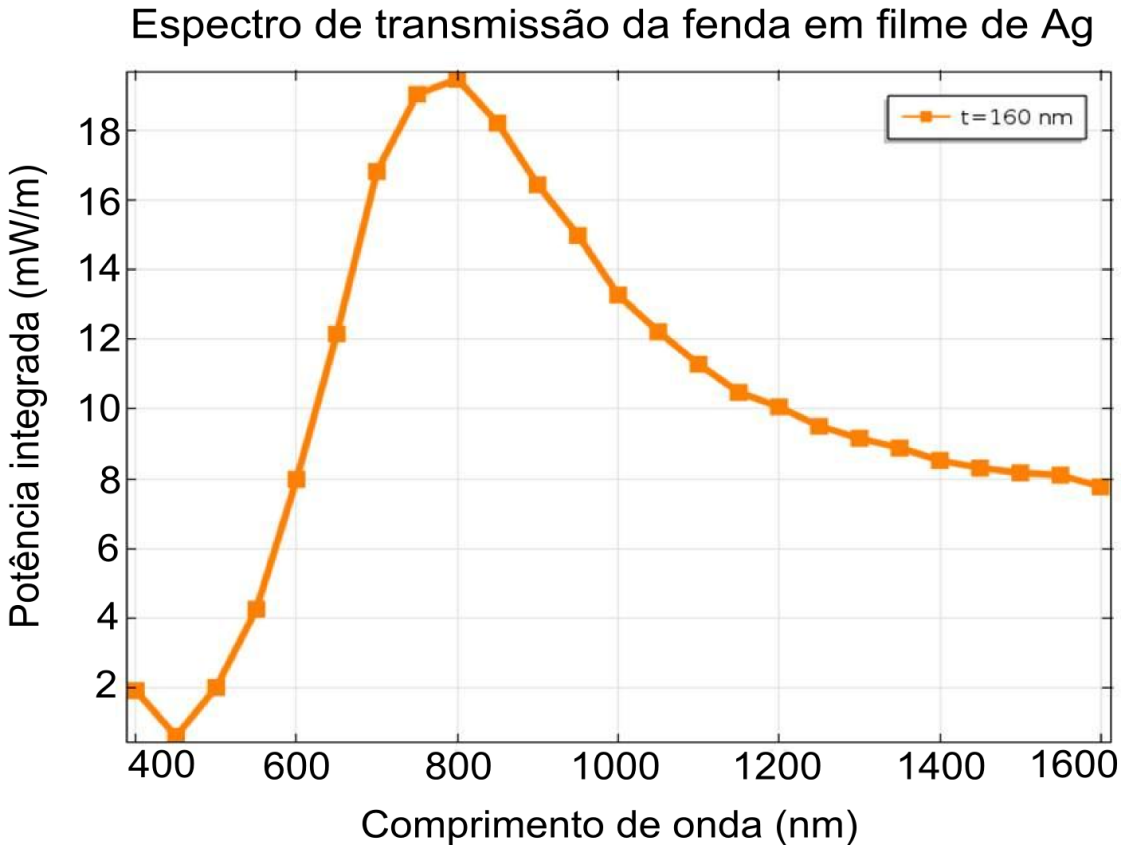


Figura 20 - Espectro de transmissão da fenda feita em filme de prata de espessura (*t*) 160 nm com 70 nm de largura (*w*). Vemos que há ressonância na transmissão quando o comprimento de onda (λ) é da ordem de 800 nm. Em contrapartida, entre 400-500 nm quase todo feixe incidente é refletido.

Conforme incrementamos a espessura, o máximo na transmissão óptica desloca-se nas regiões do infravermelho; isso é evidenciado quando sobrepomos os gráficos da transmissão para quatro diferentes valores de espessura, como esquematizado na figura 21. Tal resultado sugere que filmes menos espessos se ajustam melhor na região do visível do espectro eletromagnético caso desejarmos obter uma transmissão mais pronunciada da fenda; em contrapartida, filmes com espessura maiores do que 200 nm apresentam melhor transmissão no infravermelho. Apesar disso, vemos que mesmo para filmes razoavelmente espessos, como é o caso daqueles de espessura 270 e 330 nm, existe uma segunda ressonância no visível. Podemos aproveitar esse fato como argumento para o uso dos lasers de He-Ne (λ= 632.8 nm) e Ar (λ= 488 nm). Obtemos resultados similares quando consideramos os filmes de ouro, porém, nesse último caso estendemos o intervalo de comprimento de onda para até 2000 nm, pois lidamos com filmes mais espessos.

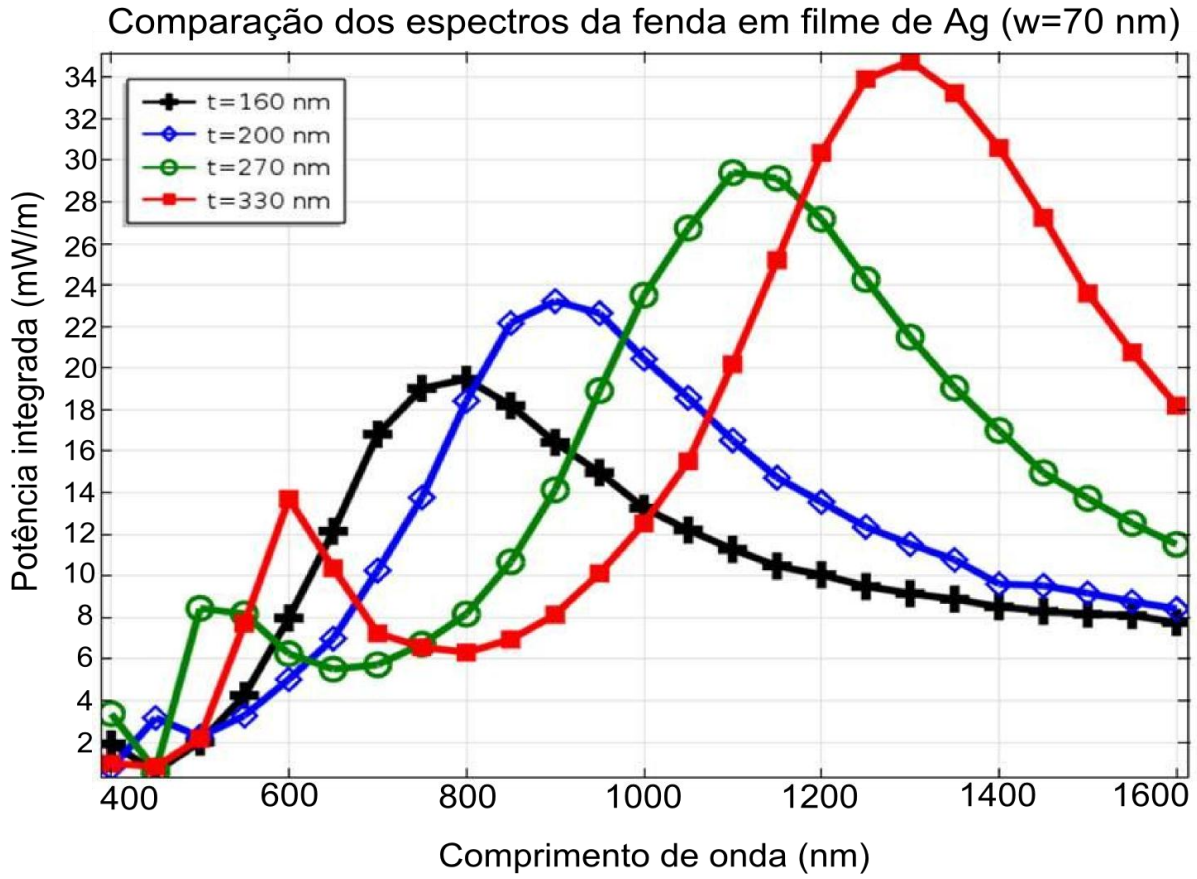


Figura 21 - Espectros de transmissão da fenda de largura 70 nm para quatro valores diferentes de espessura do filme de prata. Os picos ocorrem em λ=800 nm (t= 160 nm), λ=900 nm (t=200 nm), λ=1100 nm (t=270 nm) e λ=1300 nm (t=330 nm).

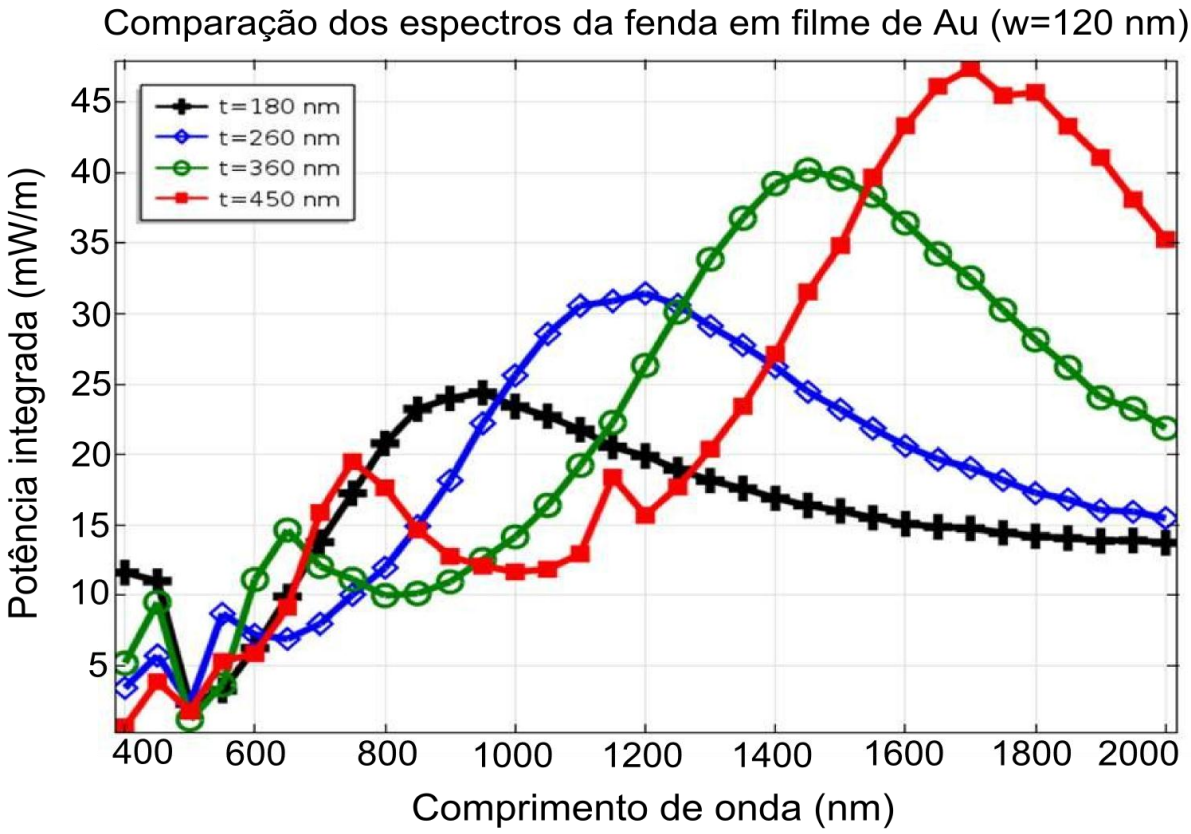


Figura 22 - Curvas do espectro de transmissão da fenda do filme de ouro com largura (*w*) fixa de 120 nm. As espessuras *t* de cada filme estão representadas na legenda à esquerda. Os picos estão localizados em λ= 950 nm (t=180 nm), λ=1200 nm (t=260 nm), λ=1450 nm (t=360 nm) e λ=1700 nm (t=450 nm).

4.1.2 Influência da largura da fenda no espectro de transmissão

Enquanto a espessura do filme está relacionada com a localização do pico da transmissão, quando modificamos a largura da fenda, aumentamos a largura da curva de ressonância. Os gráficos das figuras 23 e 24 constatam isso. No primeiro temos o espectro de transmissão de três filmes de prata com larguras de fenda distintas. No gráfico seguinte foi realizada a mesma sistemática, porém, com o filme de ouro (a espessura de ambos foi de 200 nm).

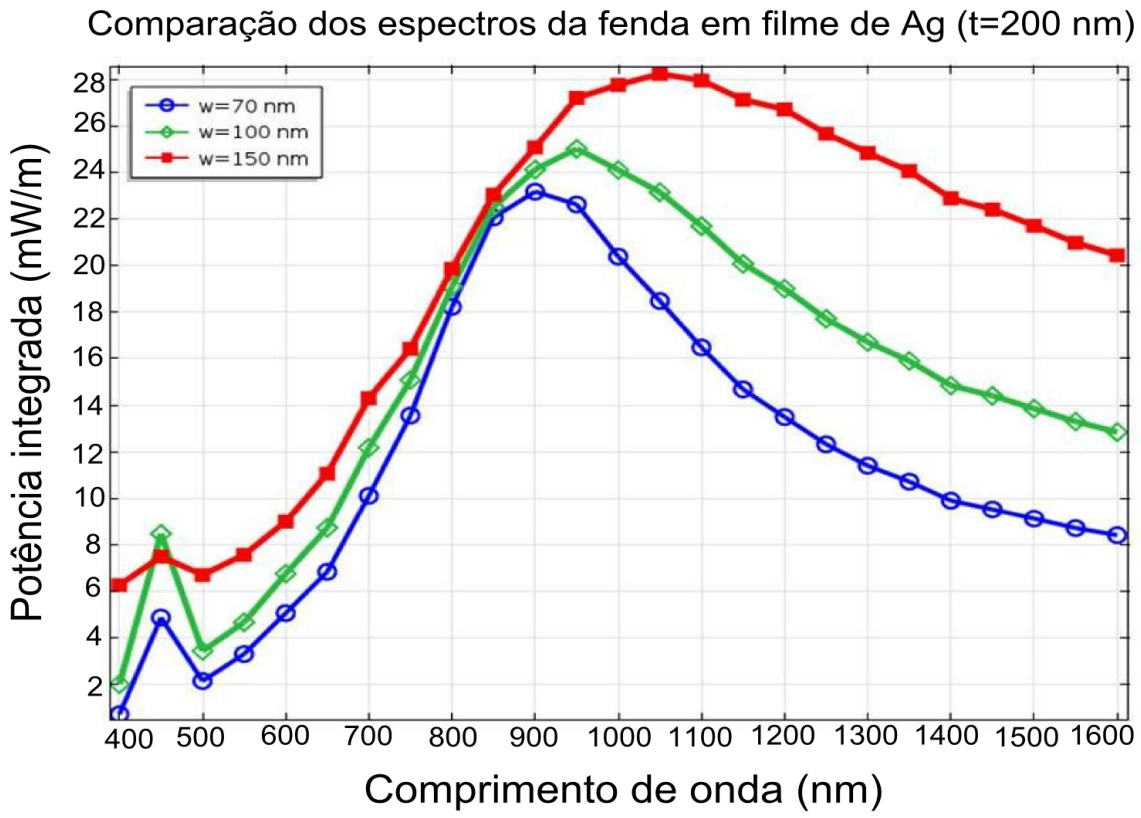


Figura 23 - Espectros de transmissão óptica para três diferentes larguras (*w*) de fenda em filme de prata. A espessura (*t*) para ambos os casos foi de 200 nm.

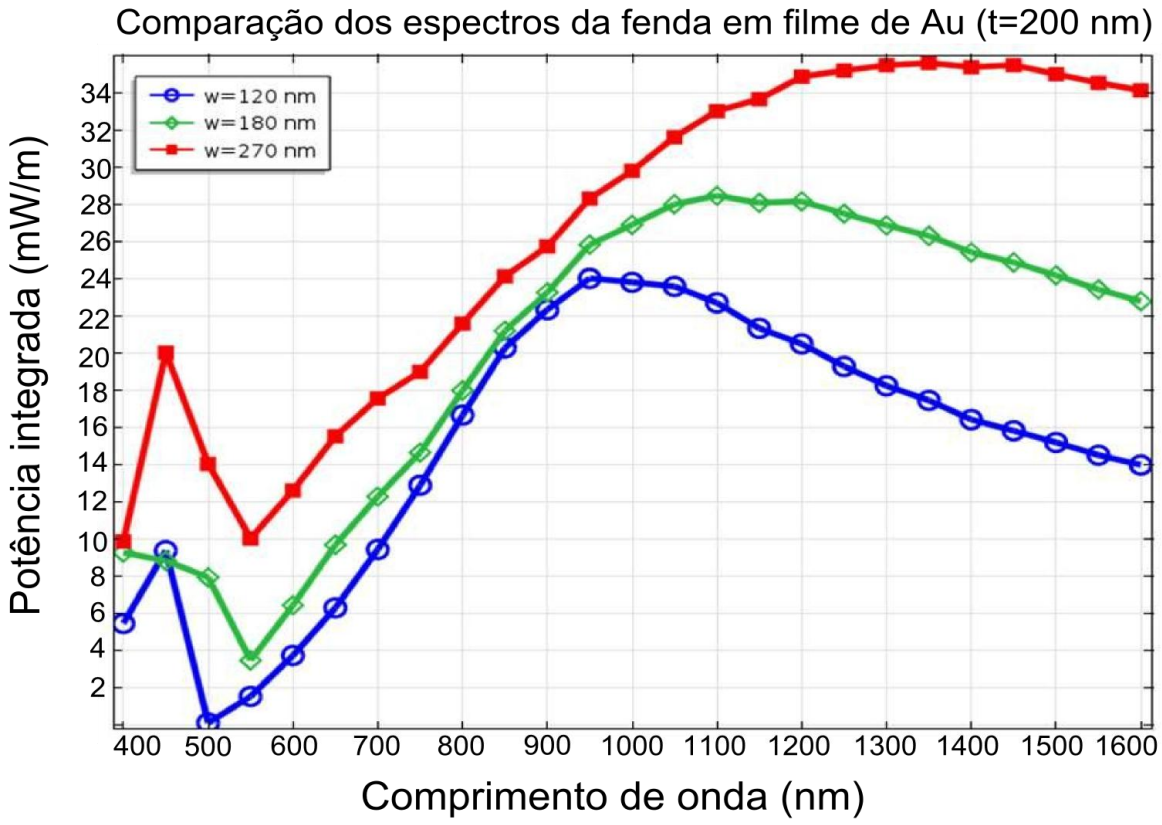


Figura 24 - Espectros de transmissão para três fendas em filme de ouro com larguras distintas. Assim como no caso do ouro, a espessura (*t*) do filme foi mantida constante em 200 nm.

As larguras das fendas que tínhamos disponíveis eram relativamente grandes para esta análise, apesar de ainda serem estruturas SW. Para uma melhor verificação dos efeitos da largura sobre o espectro de transmissão, simulamos os casos de fendas mais estreitas. De maneira similar aos exemplos anteriores, adotamos filmes que apresentavam espessura de 200 nm. O resultado apresentado na figura 25 foi obtido para a Prata.

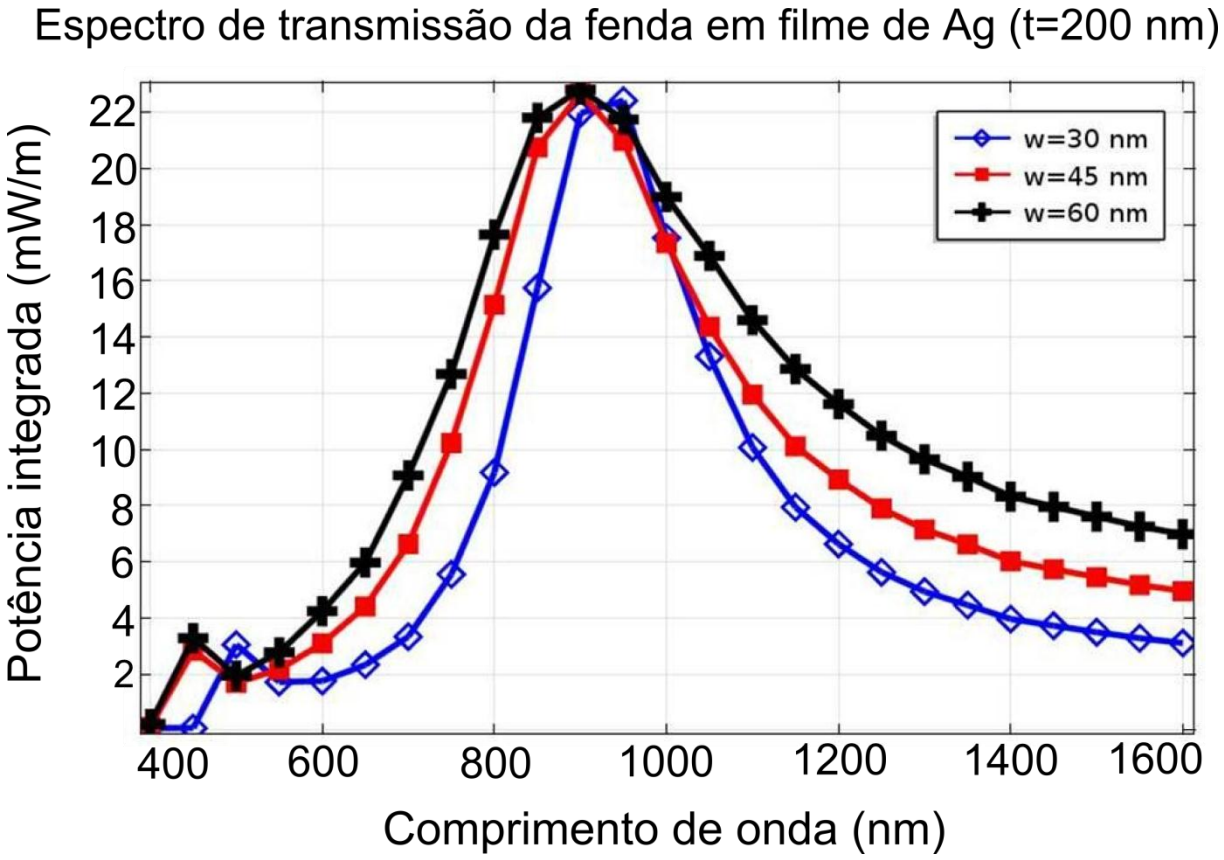


Figura 25 - Espectro de transmissão da prata para fendas mais estreitas. Os valores de largura estão representados no quadro superior direito. A espessura de ambos os filmes é de 200 nm.

Como no caso anterior, vemos que conforme incrementamos a largura da fenda, aumentamos também a abertura da curva do espectro de transmissão. Resultado similar (representado na figura 26) foi obtido para o filme de ouro.

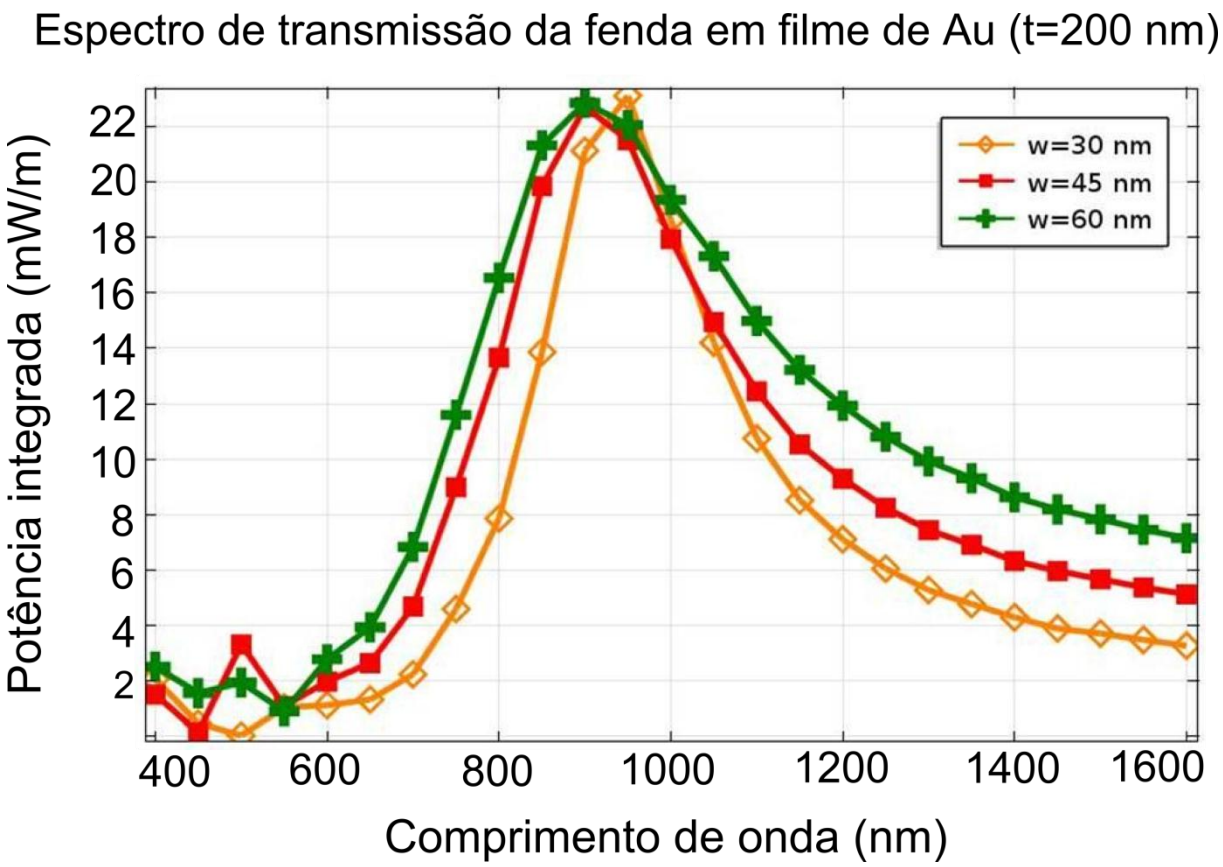


Figura 26 - Plotes dos espectros de transmissão para fendas mais estreitas comparadas ao caso original feitas em filme de ouro. A espessura do mesmo foi de 200 nm para todos os casos. Como no exemplo da prata, temos uma diferença na localização do máximo de transmissão para uma fenda extremamente estreita de 15 nm de largura.

4.2 Transmissão em função da espessura (*t*) do filme

Na seção anterior discutimos como o espectro de transmissão de nosso sistema é alterado quando modificamos suas dimensões (largura da fenda ou espessura do filme). Para identificar a influência destes parâmetros no espectro fixamos um e variamos o outro. Porém, também foi de nosso interesse conhecer como a transmissão óptica se comportava quando incidíamos perpendicularmente sobre a fenda não um espectro de radiação, mas uma onda monocromática. Tomamos como base as fontes laser que tínhamos disponíveis experimentalmente: uma de Argônio (Ar) de comprimento de onda λ= 488 nm e outra de Hélio-Neônio (He-Ne) com λ= 632.8 nm. Comparamos os resultados das medidas realizadas com as simulações computacionais. Esta sistemática foi estabelecida nestas e nas próximas

seções. Primeiramente, verificamos o caso no qual variamos a espessura (*t*) do filme para valores fixos de largura (*w*) da fenda usando a mesma metodologia descrita no capítulo 3.

Na figura 27 temos representados os gráficos da transmissão óptica das fendas para os filmes de prata e ouro, obtidos experimentalmente de acordo com o procedimento descrito no capítulo anterior.

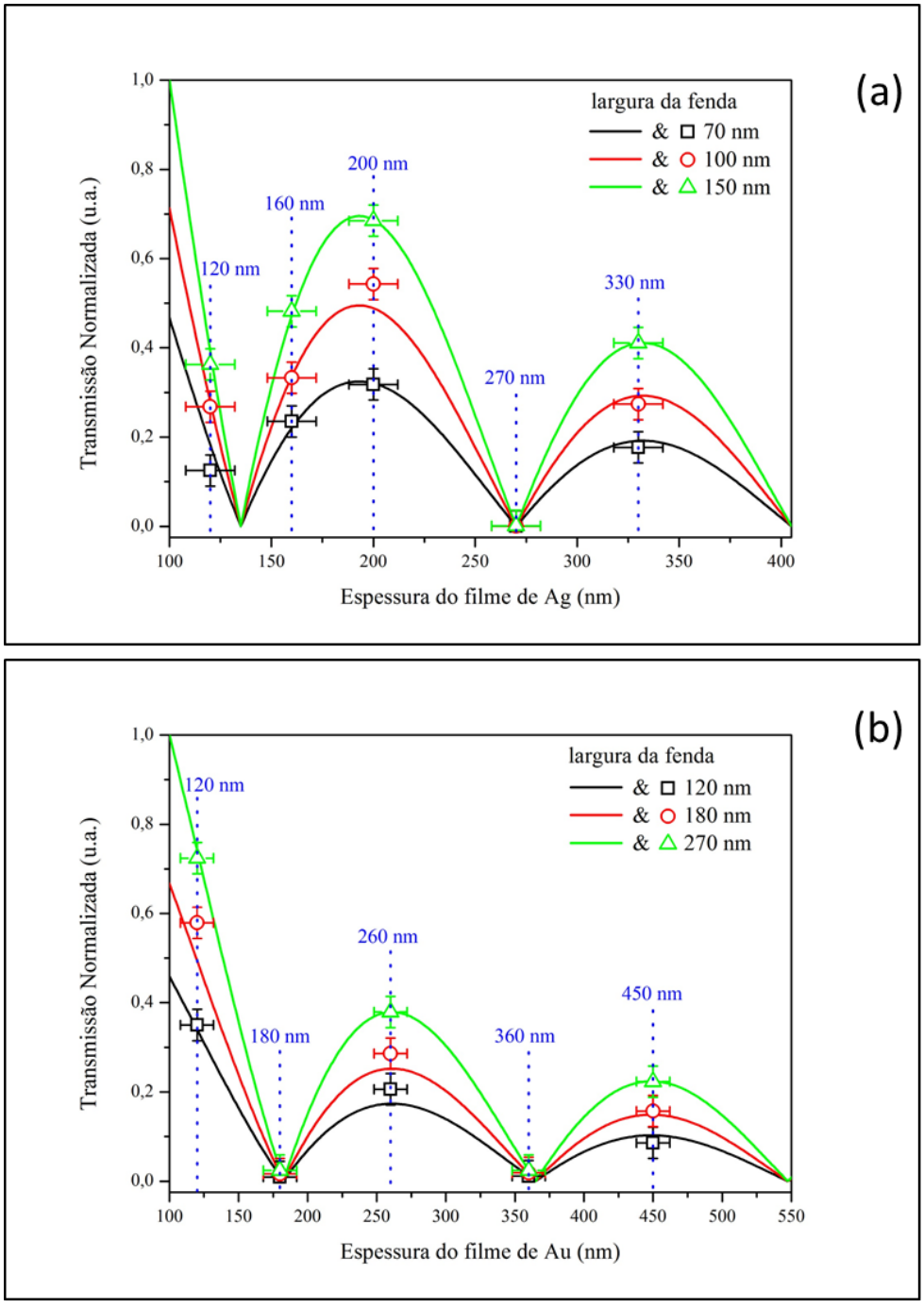


Figura 27 - Medidas experimentais da transmissão óptica da fenda em filmes de prata (a) e ouro (b) em função da espessura do filme. Cada curva corresponde a certo valor fixo de largura da fenda. As amostras de prata foram analisadas com fonte de λ=488 nm, enquanto as de ouro pela de λ=632.8 nm.

Nota-se que há claramente espessuras de filmes para uma mesma largura da fenda com diferentes valores normalizados de transmissão.

Simulamos as estruturas para situações similares às encontradas experimentalmente. Variamos a espessura de ambos os filmes no intervalo de 100-600 nm.

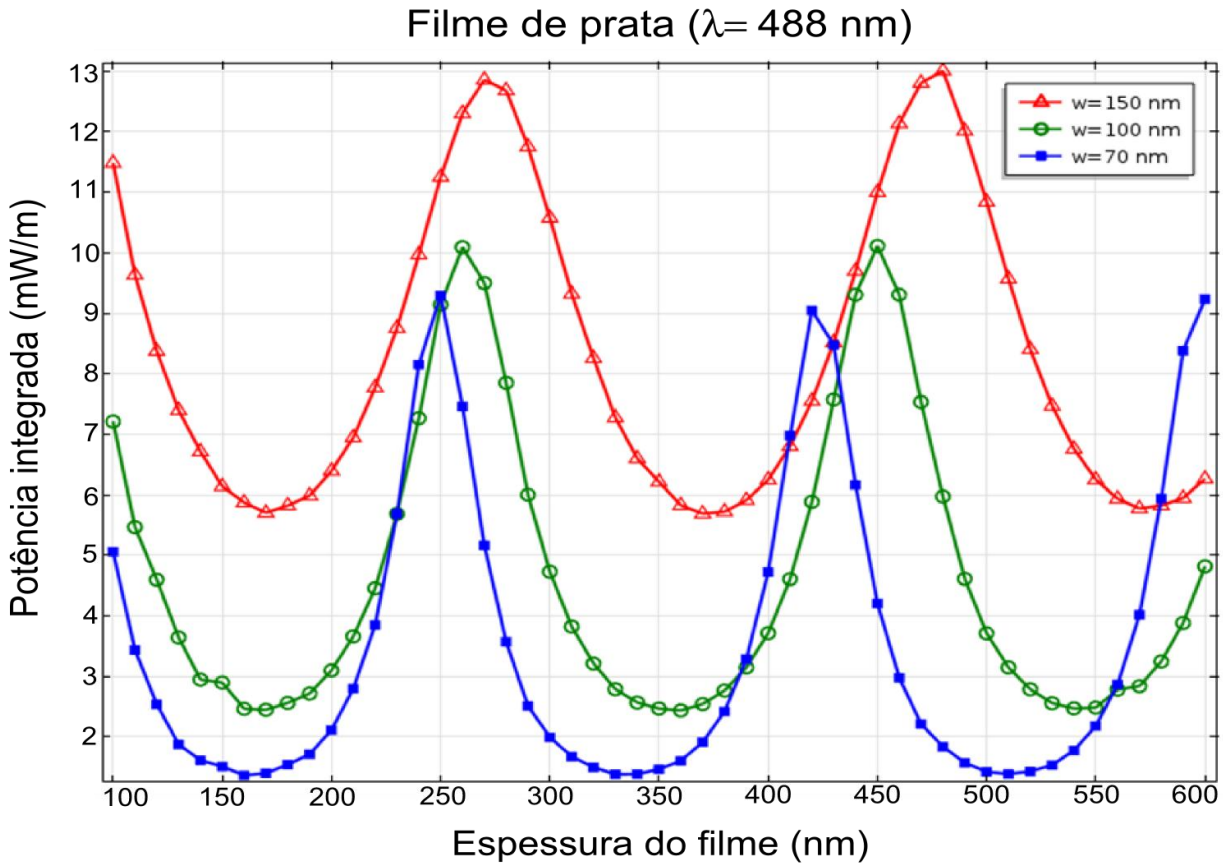


Figura 28 - Simulação da transmissão óptica da fenda como função da espessura do filme de prata. No caso acima comparamos três fendas de larguras (*w*) distintas, representadas no quadro superior à direita.

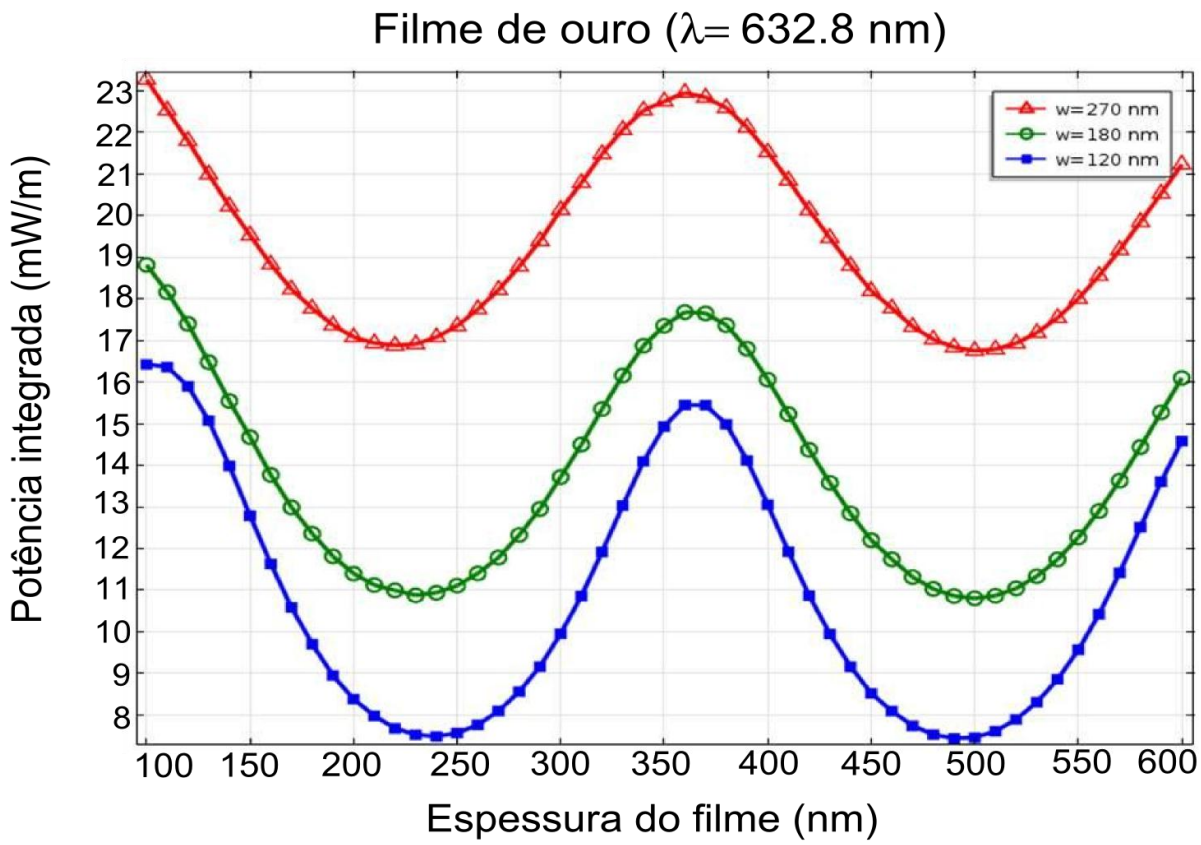


Figura 29 - No gráfico acima temos a simulação da transmissão óptica da fenda como função da espessura do filme de ouro também para três fendas diferentes.

Notamos que tanto experimentalmente como nas simulações, ao variarmos a espessura do filme a transmissão óptica das fendas oscila, apresentando máximos e mínimos. A ocorrência desses resultados se deve ao comportamento da radiação eletromagnética no interior da fenda. Como vimos no início do capítulo, as densidades de carga e corrente, representadas pelos plasmons de superfície que conduzem a onda incidente definida pelas componentes E_x e H_z dos campos, e atingindo o substrato, é refletida. Este segundo feixe interfere com o incidente gerando uma onda estacionária na direção *y* no interior da fenda, ou seja, a fenda apresenta propriedades semelhantes a uma cavidade. A redistribuição de cargas e correntes a partir daí será definida pelo padrão de interferência dos campos. Esse padrão dependerá não apenas das propriedades ópticas dos meios, como também da largura (*w*) da fenda e da espessura (*t*) do filme, como reportado por Ferri (24). A forma aproximada do campo espalhado definida em termos desses parâmetros é representada pela seguinte expressão:

$$E_{esp} \approx \frac{E_{inc}}{\pi}\frac{w}{t}\cos\left(k_{SPP}.t + \frac{\pi}{2}\right) \tag{37}$$

A equação anterior foi primeiramente obtida por Kowarz (47) para descrever a influência das ondas evanescentes na difração da luz de uma única fenda feita sobre um filme metálico. Neste trabalho, Kowarz considerou que a intensidade da onda detectada sobre um anteparo correspondia à soma da onda difratada, comumente tratada em óptica física, descrita por ele como "onda uniforme", e a onda evanescente presente na superfície do plano opaco, justamente as ondas SPP, apesar do autor não descrevê-las com tais palavras. Muitos trabalhos foram constituídos a partir desse resultado, como (20) e (24), por exemplo. As "curvas cheias" presentes nos gráficos dos resultados experimentais para a transmissão óptica em função da espessura dos filmes são os plotes da equação 37 para valores fixos de largura da fenda e de comprimento de onda para os intervalos de espessura de filme mostrados na figura 27. O termo k_{SPP} no argumento do cosseno possui dimensão de número de onda, e está relacionado com a constante de propagação β, determinada no capítulo 2. Ele corresponde à parte real de β, mas pode ser escrito também como: $k_{SPP} = \frac{2\pi}{\lambda_{SPP}}$. A partir da expressão do campo espalhado, podemos estabelecer para quais valores de espessura ocorrerão os máximos ou mínimos na transmissão óptica, já que *t* compõe o argumento. Notamos que a transmissão decai quando a espessura do filme apresentar valores proporcionais à $\lambda_{SPP}\frac{(m-1)}{4}$, onde *m* deve ser um número inteiro ímpar, e é aumentada para valores de *t* proporcionais a $\lambda_{SPP}\frac{(2n-1)}{4}$, onde *n* é inteiro seja qual for a paridade. Além disso, existe um deslocamento dos picos e dos mínimos de transmissão para o caso dos filmes de prata, que não verificamos para os filmes de ouro. Uma das hipóteses para que tal fato ocorra está associado ao comprimento de onda empregado na simulação e com a *perfectly matched layer* (PML). É feita a discussão sobre a PML no apêndice D, mas a princípio a utilizamos para atenuar as ondas refletidas geradas artificialmente pelo próprio software, ou seja, sem significado físico que, caso contrário, possam influenciar os resultados. O problema reside no fato de que quando trabalhamos com comprimentos de onda pequenos, a eficácia da PML diminuí, portanto, é possível que para λ=488 nm, as ondas não sejam totalmente suprimidas.

Nas figuras a seguir comparamos o módulo da componente y do vetor de Poynting para diferentes valores de espessura de filmes de ouro e prata, nos casos em que há máximo e mínimo de transmissão. Nesses exemplos, a largura da fenda foi de 120 nm para ouro e 150 nm para a prata. A coordenada x presente no eixo horizontal corresponde à direção paralela à interface metal/dielétrico.

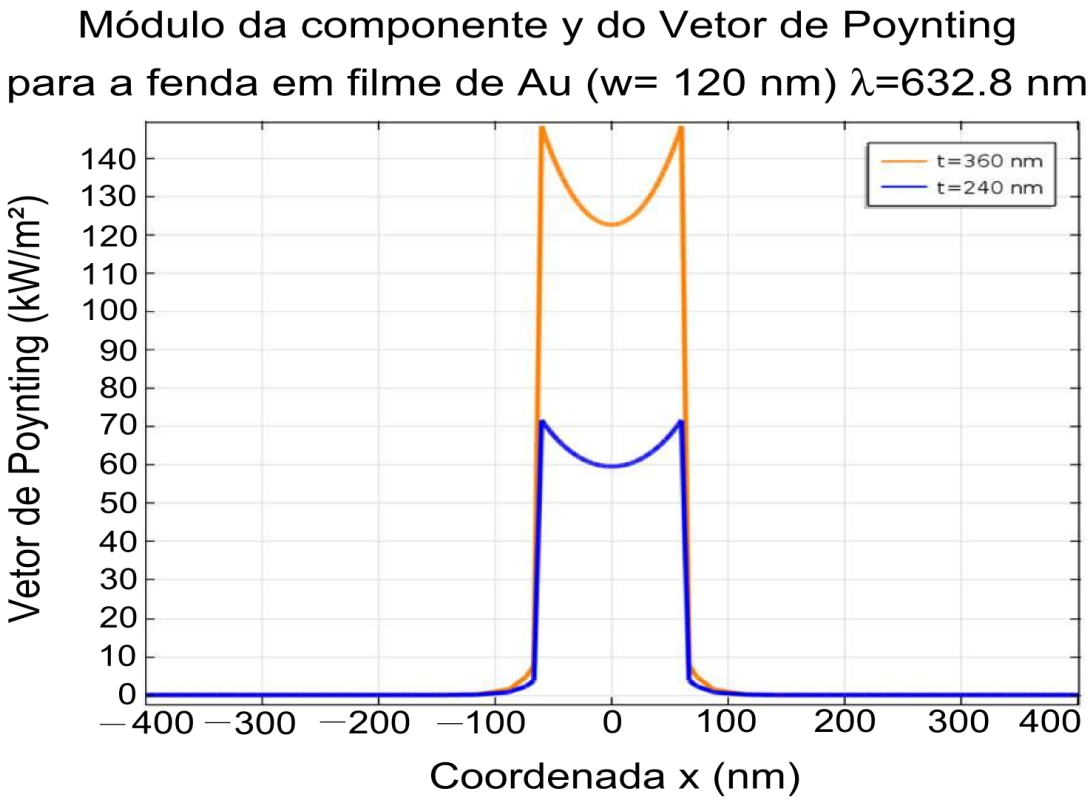


Figura 30 - Módulos do vetor de Poynting, associados à radiação transmitida pela fenda, para filmes de ouro com espessuras diferentes. Plotamos dois casos: um de máxima (t=360 nm) e outra de mínima (t=240 nm) transmissão. A largura da fenda nas duas situações foi de 120 nm.

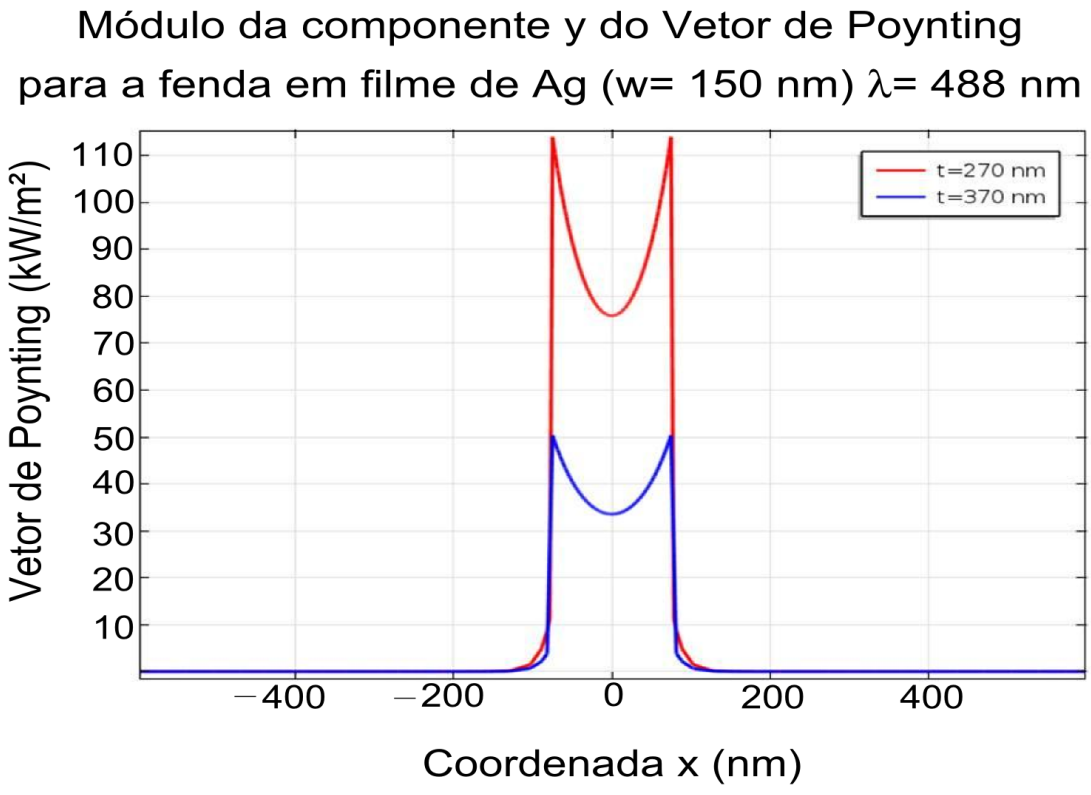


Figura 31 - Plotes da componente y do módulo do vetor de Poynting para fenda em filme de prata. Apresentamos dois casos distintos. O primeiro em que temos máximo na transmissão óptica (t=270 nm); no segundo temos um mínimo (t=370 nm). A largura de ambas as fendas foi de 150 nm

Vemos dos dois gráficos anteriores, que a intensidade do vetor de Poynting (associada à transmissão da fenda) praticamente dobra quando consideramos espessuras de filme onde há máximo na transmissão comparada àquelas em que há mínimo.

Quando comparamos as simulações da transmissão da fenda para os dois filmes metálicos com os resultados obtidos experimentalmente, conseguimos identificar as diferenças entre cada caso. Enquanto no primeiro as curvas se "deslocam" para direita conforme incrementamos a largura da fenda (sobretudo no caso da prata), no segundo praticamente não existe este "deslocamento". Além disso, reparamos que há divergências referentes a quais valores de espessura de filme ocorrem os máximos (ou mínimos) de transmissão entre um caso e outro. Especulamos que tais divergências aconteçam por considerarmos a geometria da fenda como sendo a ideal. No processo de fabricação da fenda, o feixe constituído de íons de Gálio apresenta alta energia cinética; ao incidir no filme o mesmo sofre espalhamento e parte da energia inicial é convertida em energia térmica, conferindo à fenda um formato de "V", diferente do estabelecido na simulação. Como descrevemos nas seções anteriores, a fenda possui propriedades similares a um guia de onda e quando modificamos a geometria de um guia, alteramos seus modos de propagação. Já que nesse caso os modos são regidos pela espessura do filme, é de se supor que quando alteramos o formato da fenda, também mudamos o modo como a radiação atravessa este guia. Veremos nas seções seguintes a influência do formato da fenda na transmissão. Os resultados das simulações usando o COMSOL foram comparados com sistemas idênticos, simulados com rotinas desenvolvidas em *finite difference time domain* (FDTD) e cujos resultados são praticamente os mesmos.

4.3 Transmissão em função da largura (*w*) da fenda

Ao incidirmos o feixe luminoso na fenda é intuitivo supor que conforme aumentamos sua largura, maior será o número de fótons, portanto, a radiação que dela emergirá. Quando no capítulo anterior analisamos a dependência da transmissão com a espessura do filme, constatamos que para fendas com larguras diferentes existia um acréscimo na transmissão à medida que alargávamos a mesma. Nosso intuito nesta seção é descobrir qual a contribuição da largura na transmissão para as estruturas SW.

Conseguimos detectar a luz mesmo para fendas cujas larguras eram estreitas o suficiente para desafiar o limite de difração, descrito no início do trabalho. Ao considerar que o meio no qual a luz emerge é o vidro BK7 (com índice de refração *n* próximo de 1,5), e o filme de ouro é incidido pelo feixe laser de comprimento de onda $\lambda = 632.8$ nm, deduzimos que em tese só seria possível medirmos a radiação transmitida para fendas com larguras $w > 211\ nm = \frac{\lambda}{2n}$. Porém, devido à ação dos plasmons de superfície e à polarização TM da radiação conseguimos medidas da transmissão mesmo para valores abaixo de 211 nm de largura. No caso da prata, em que o comprimento de onda da radiação incidente foi de $\lambda = 488\ nm$, o limite de difração foi de aproximadamente 163 nm, a detecção de luz também é verificada para fendas com larguras abaixo desse valor quando incidimos luz com este tipo de polarização. Em contrapartida, quando a polarização da luz é TE, não é possível detectar a intensidade da luz transmitida para larguras abaixo dos valores mencionados anteriormente. Os gráficos presentes nas figuras 32 e 33 representam as simulações para as transmissões em função da largura da fenda em filmes de prata e ouro de espessuras 360 nm e 300 nm, respectivamente, para o caso em que a polarização da luz incidente é TE, enquanto os contidos nas figuras 34 e 35 representam os resultados das simulações quando a luz apresenta polarização no modo TM para os mesmos filmes citados anteriormente.

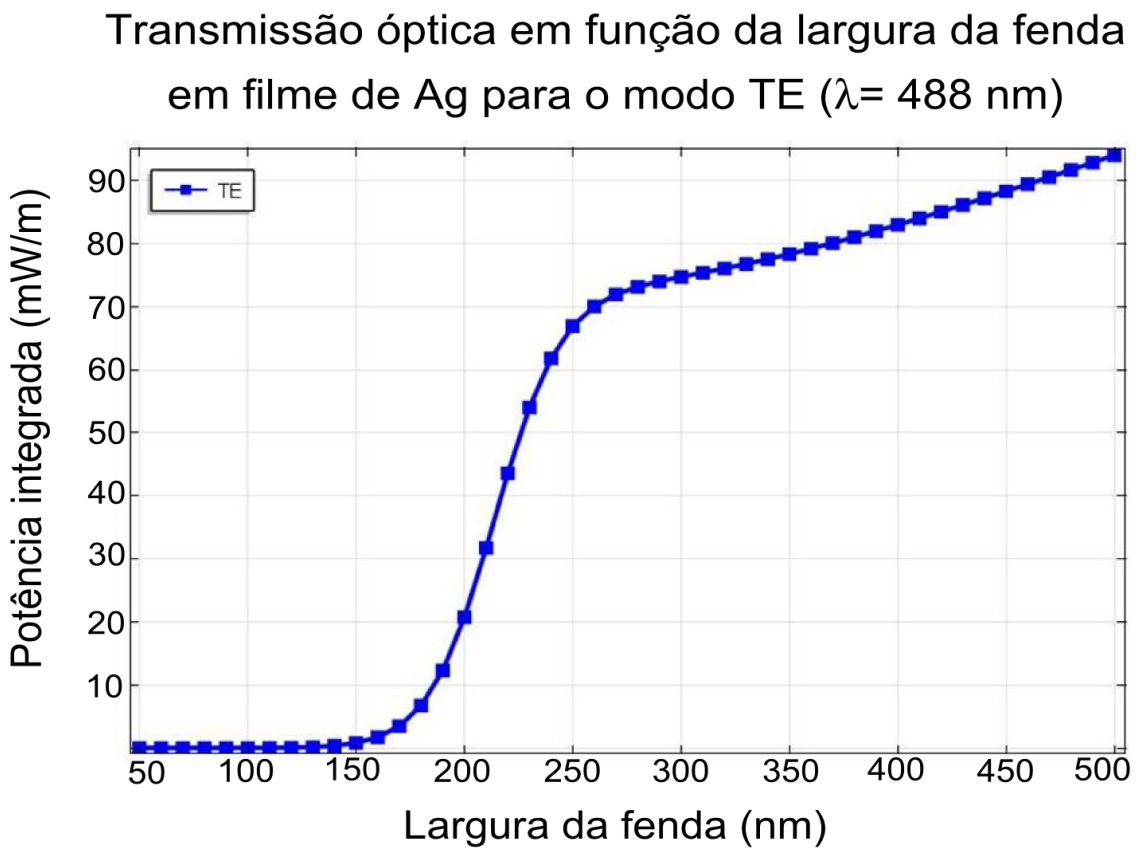


Figura 32 – Gráfico da transmissão da fenda em filme de prata quando a polarização da radiação incidente é TE. É evidente a ausência de transmissão para larguras menores do que 160 nm (limite de difração)

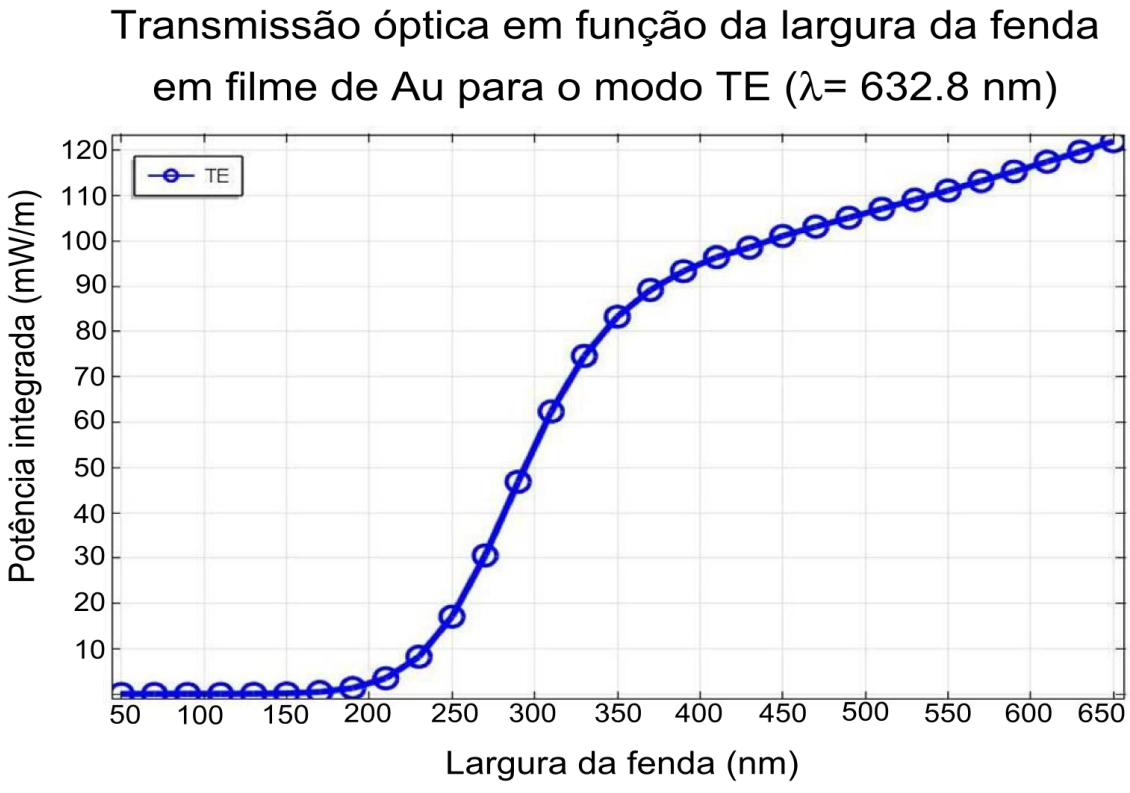


Figura 33 – Transmissão da fenda para o modo TE no caso do ouro no qual o valor mínimo de largura para que haja detecção da luz é de 210 nm (limite de difração).

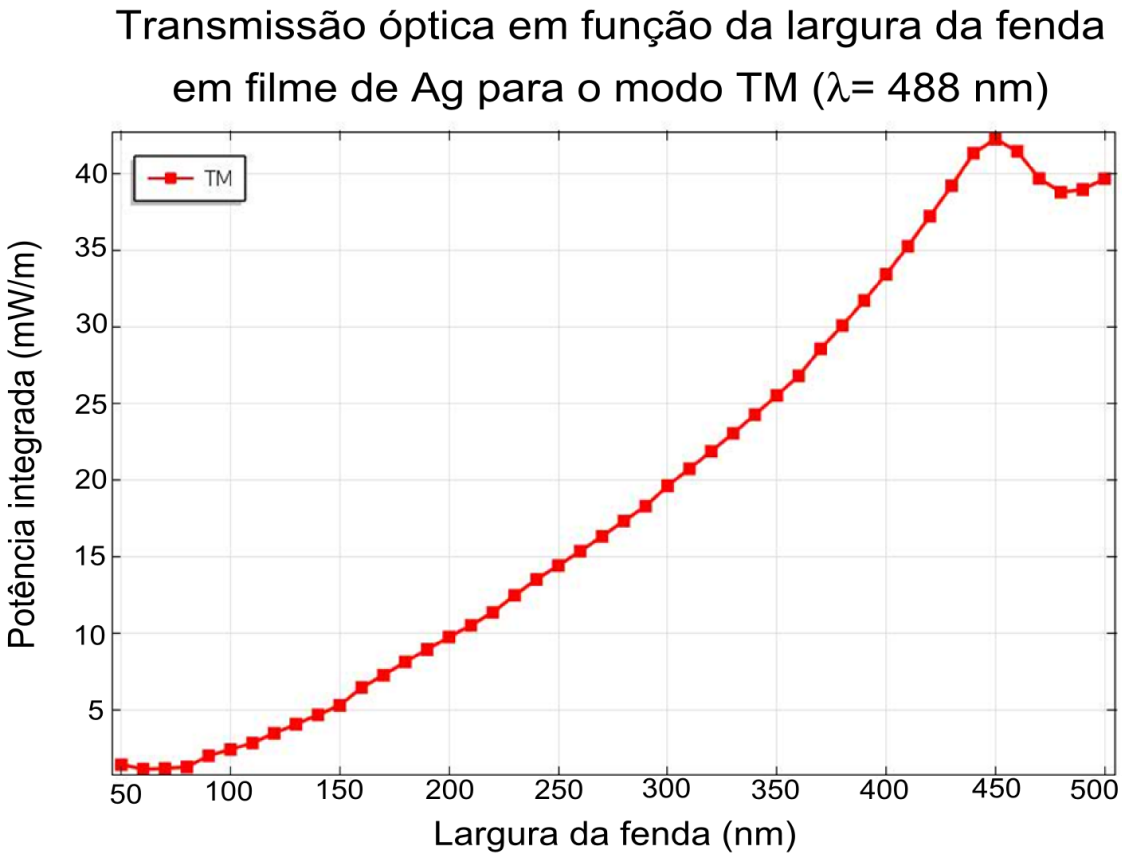


Figura 34 – Gráfico da transmissão da fenda em filme de prata quando a polarização da radiação incidente é TM. Diferentemente do caso TE, há transmissão para valores de largura menores do que 160 nm.

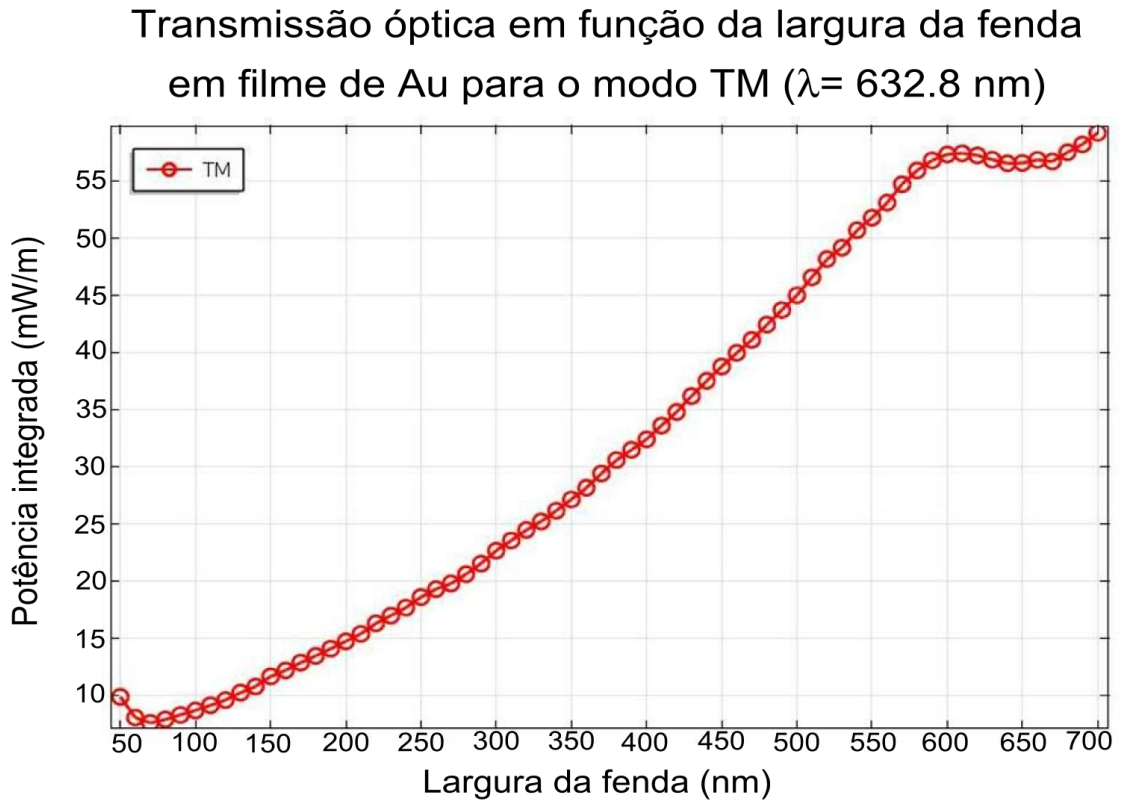


Figura 35 – Transmissão da fenda em filme de ouro para o modo TM. Assim como no caso da prata, há detecção da luz mesmo para larguras menores do que 210 nm que corresponde ao limite de difração.

Reparamos que a transmissão cresce com a largura da fenda, apresentando um comportamento não linear Tomemos como base dois valores de espessura (*t*) em que verificamos maior ou menor transmissão (não necessariamente máximo ou mínimo). Para efeitos de comparação, observamos dos gráficos em que variamos a espessura do filme que no caso do ouro, por exemplo, o filme de espessura 200 nm transmite menos luz se comparado com aquele de 300 nm. Consideramos estas duas situações e simulamos a transmissão óptica variando não a espessura do filme, mas a largura da fenda. Procedemos de maneira similar para o caso da prata. Os resultados obtidos estão representados nos gráficos das figuras 36 e 37.

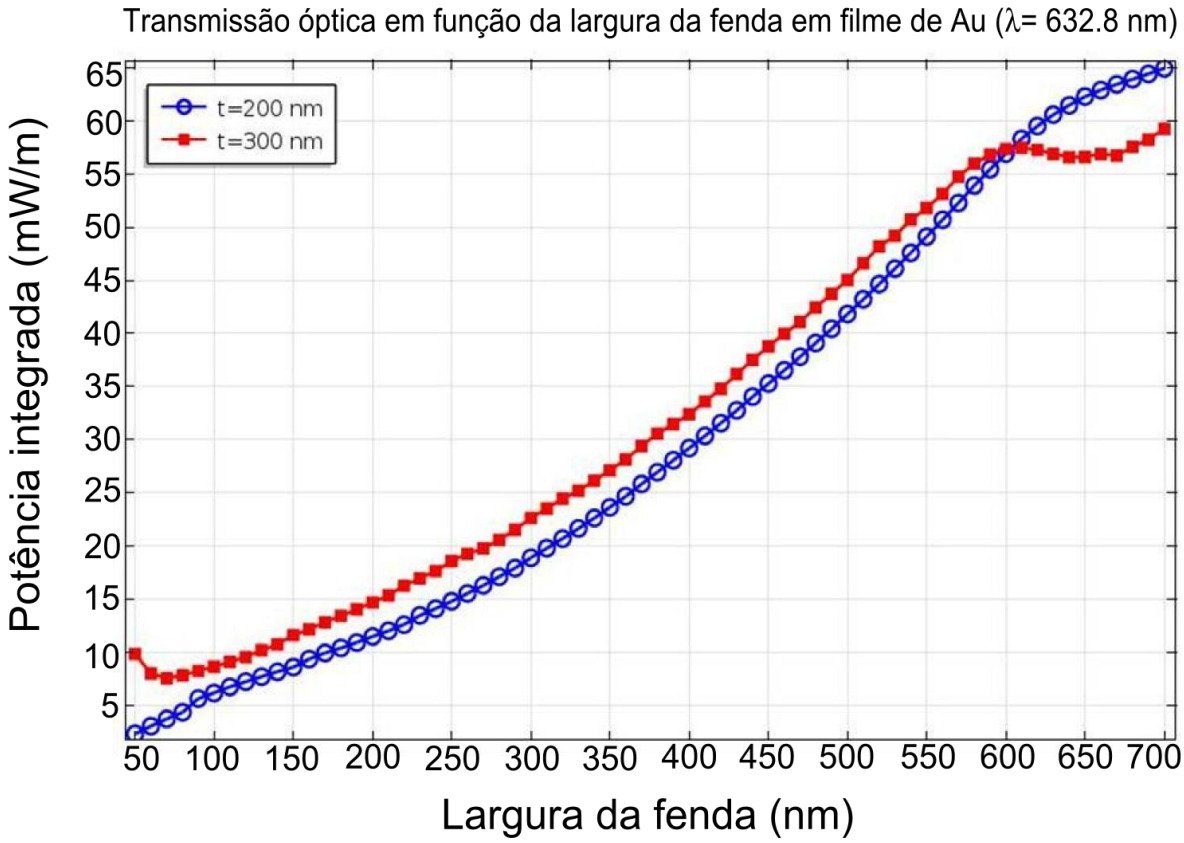


Figura 36 - Plotes da transmissão de dois filmes de ouro com espessuras diferentes incididos por feixe de λ=632.8 nm em função da largura da fenda.

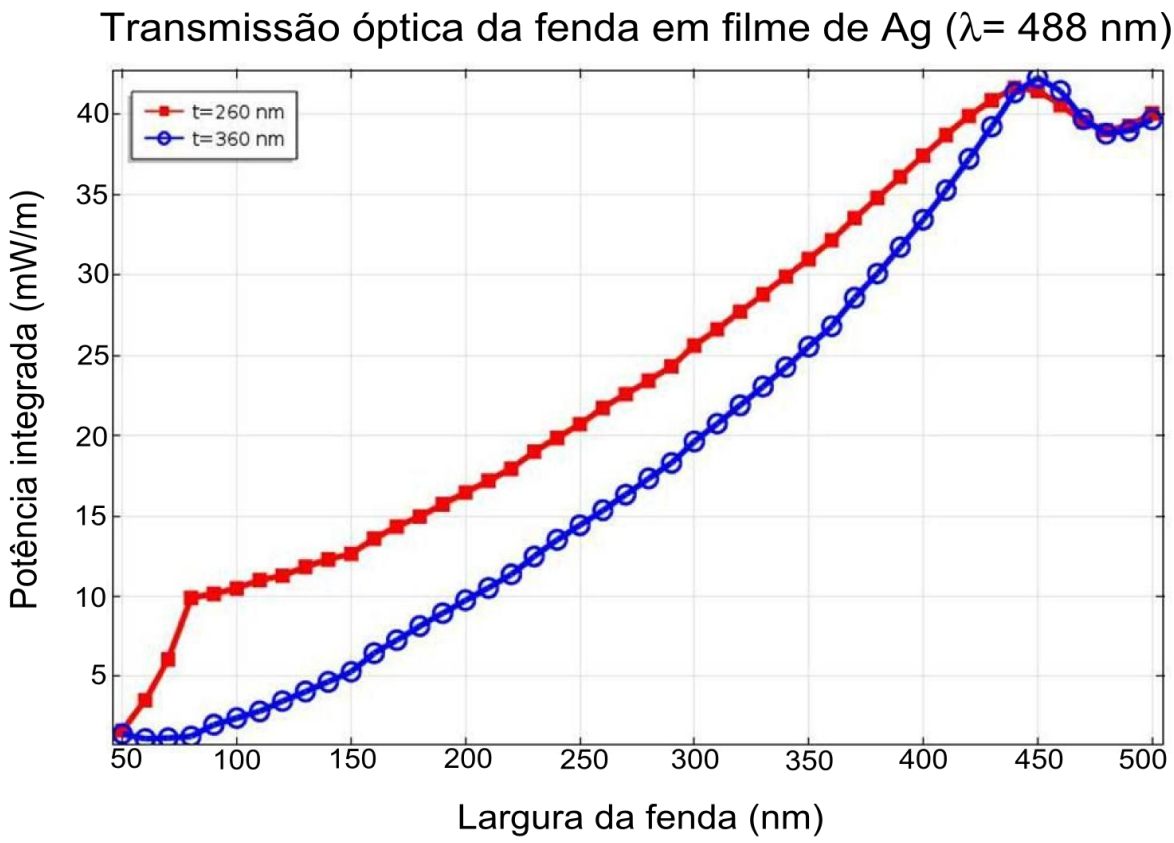


Figura 37 - Comparação dos plotes da transmissão óptica para dois filmes de prata com espessuras t=260 nm (vermelho) e t=360 nm (azul) em termos da largura da fenda.

A escolha dos intervalos de largura da fenda não foi feita de maneira arbitrária. Definimos de acordo com o comprimento de onda da radiação eletromagnética aplicado sobre a fenda, pois foi de nosso interesse compreender como se dava a transmissão quando os valores de largura superavam λ. Como no caso do ouro o comprimento de onda adotado foi maior, estendemos o intervalo até 700 nm (observe o gráfico); já na prata o intervalo de 500 nm era suficiente para descrevermos o que desejávamos. Observamos que houve a inversão na intensidade da transmissão nesse regime: filmes que antes transmitiam menos luz passam a transmitir mais. Esse fato é melhor verificado no caso do filme de ouro. Quando a largura da fenda é da ordem, ou até maior que o comprimento de onda efeitos relacionados à difração de Fresnel começam a dominar a transmissão óptica. Uma breve descrição a respeito desses efeitos é feita ao final do apêndice B. Foi significativo verificar como a transmissão das fendas se comportava experimentalmente. Os resultados estão expressos na figura 38.

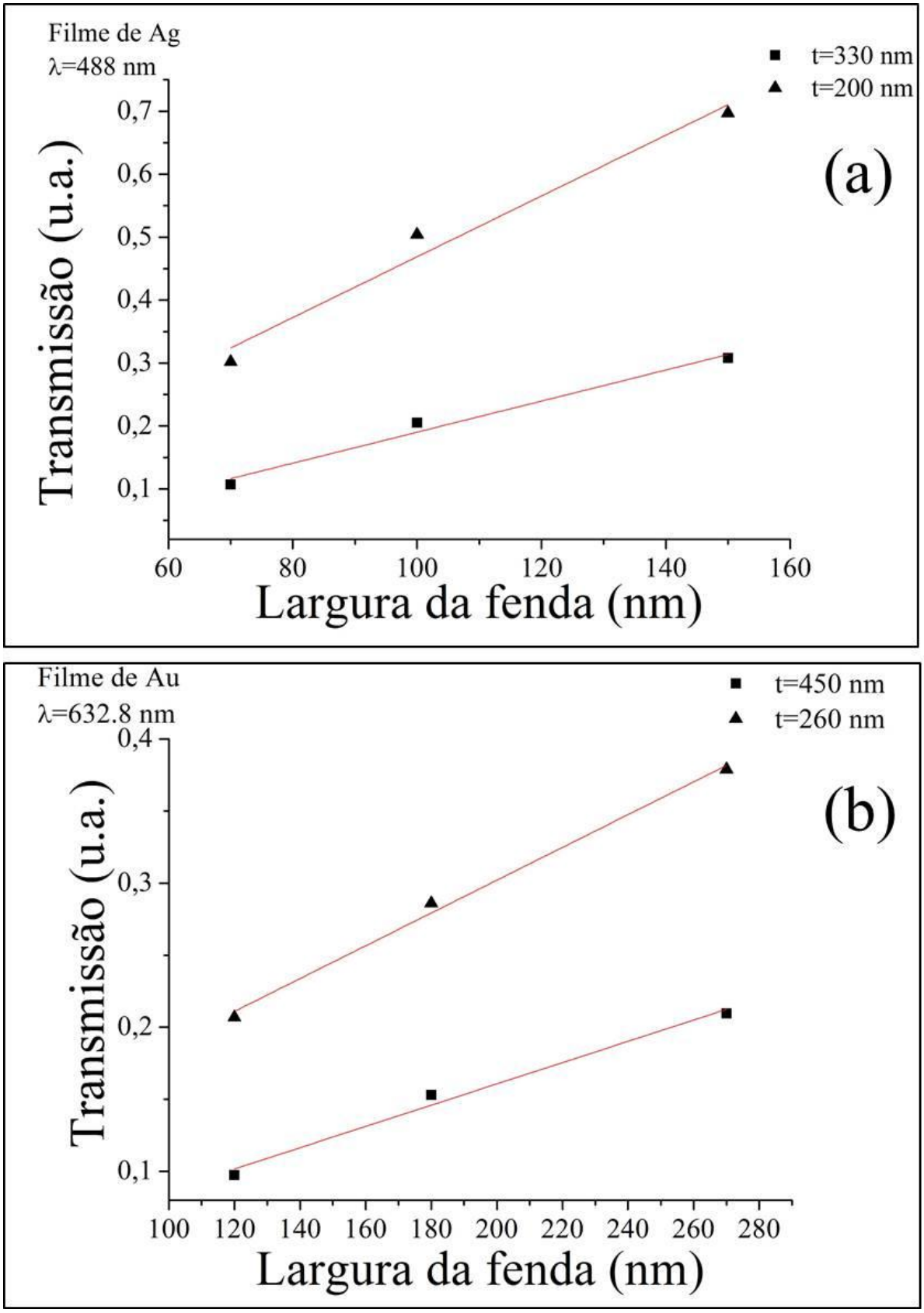


Figura 38 - Resultados experimentais da transmissão óptica em função da largura da fenda. Em (a) temos o caso do filme de prata, e em (b) o filme de ouro. Os valores de espessura do filme estão indicados no canto superior.

4.4 Multicamada metálica

Embora o entendimento do aumento da transmissão óptica em multicamadas de filmes metálicos permanece sendo investigada, se especula que a excitação de ondas SPP possa estar envolvida nos processos (48) e (17). De fato, já foi demonstrado que quando dois filmes metálicos perfurados são separados por uma camada de material dielétrico, a transmissão é aumentada quando comparada a um único filme. (49) Além disso, estruturas bimetálicas, tais como filmes e nanopartículas, têm atraído atenção devido aos efeitos da excitação dos plasmons nas mesmas. Trabalhos como (32), (33) e (50) demonstraram o aumento do campo evanescente ao otimizar as espessuras de camadas de ouro e prata. Recentemente, foi demonstrado teoricamente a otimização de tais estruturas por meio de suas características espectrais. (51)

Neste capítulo apresentaremos um estudo que foi realizado com estruturas semelhantes às discutidas até aqui, ou seja, fendas SW em filmes finos, porém, constituídos por camadas alternadas de prata (Ag) e ouro (Au). Veremos que tal configuração proporcionará um aumento na transmissão óptica, por meio do incremento da largura da fenda, maior quando em comparação ao caso de uma única camada metálica, dependendo do comprimento de onda com que incidimos as fendas.

O procedimento experimental adotado aqui é similar ao descrito nas seções anteriores. Filmes com multicamadas de Ag/Au/Ag/Au e Au/Ag/Au/Ag ambos com espessuras t=200 nm (ou seja, cada uma das camadas apresentava 50 nm de espessura) foram termicamente evaporadas em substratos de vidro BK7. Fendas com larguras de intervalos entre 60 a 600 nm foram fabricadas utilizando litografia FIB com as mesmas condições já mencionadas anteriormente. O comprimento da fenda foi fixado em 10 μm. O lado direito da figura 39 mostra uma imagem de microscopia eletrônica de varredura (SEM da sigla em inglês) de uma fenda com largura aproximada de 180 nm em filme de Au/Ag/Au/Ag. Nesse caso, um feixe de luz com comprimento de onda de 632.8 nm de um laser de He-Ne foi utilizado; já nas amostras de filmes de Ag/Au/Ag/Au usamos um feixe laser de Ar de comprimento de onda 488 nm. O lado esquerdo mostra o esquema básico do experimento.

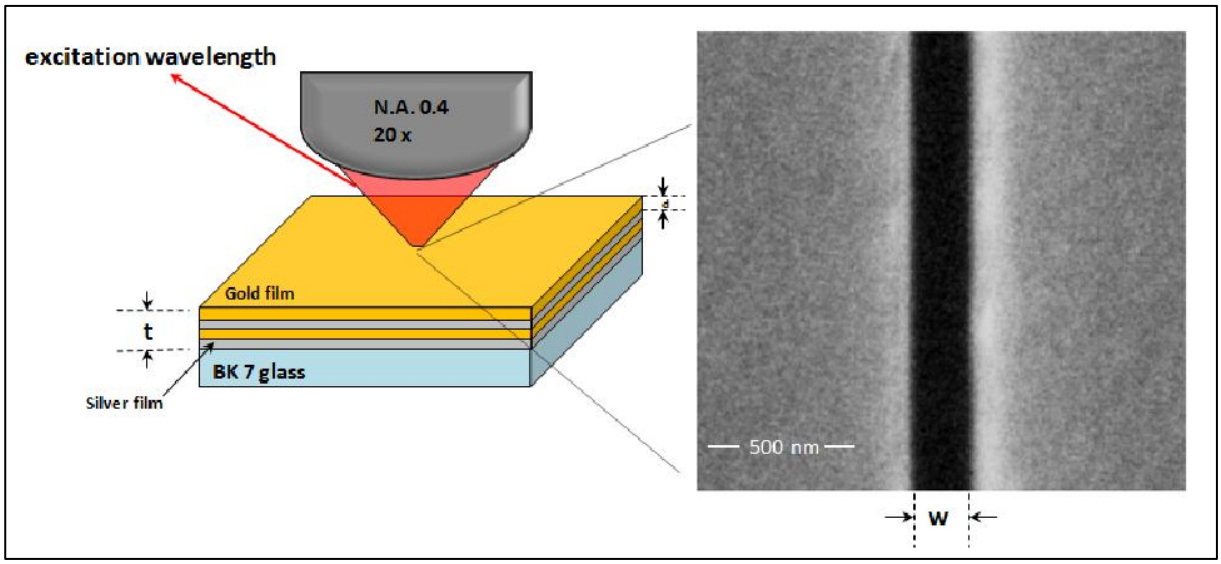


Figura 39 - O lado esquerdo apresenta um esquema simplificado do experimento da transmissão óptica. Como no caso em que tínhamos o filme de única camada, utilizamos duas fontes laser: uma de Ar com 488 nm e outra de He-Ne com 632.8 nm de comprimento de onda para iluminar as amostras de Ag/Au/Ag/Au e Au/Ag/Au/Ag, respectivamente, que eram incididas perpendicularmente sobre a superfície das amostras por lentes objetivas com aumento de 20 x. O lado direito mostra a imagem de microscopia eletrônica de varredura da estrutura (tomada com magnificação de 60000x). A fenda considerada possui uma largura de aproximadamente 180 nm e foi fabricada por litografia FIB sobre a amostra de Au/Ag/Au/Ag. Nos experimentos a espessura total dos dois tipos de filme foi fixada em 200 nm. (5)

Os processos físicos envolvidos no aumento da transmissão óptica para as fendas SW são similares àqueles discutidos nas primeiras seções, no sentido de que a primeira camada metálica é a responsável por iniciar a geração de excitações plasmônicas. Recordando que ao resolver as equações de Maxwell para a onda eletromagnética em condutores, obtemos um fator de amortecimento responsável pela absorção de energia nesses meios. Logo, é plausível supor que ao atravessar as camadas metálicas, o feixe incidente perca intensidade. Frente a tais hipóteses a contribuição de cada camada na transmissão óptica é expressa através da Lei de Beer-Lambert (52), cuja intensidade da i-ésima camada é escrita como:

$$I_i = I_{i-1} e^{-\alpha d} \tag{38}$$

Onde α é o coeficiente de absorção da correspondente camada metálica de espessura d. Vemos por meio da equação anterior que conforme o feixe adentra na estrutura, a contribuição das últimas camadas para a transmissão óptica é pouco significativa quando comparada à camada mais externa. Além dessa propriedade, outro fator que compõe a intensidade da radiação transmitida pela fenda é a amplitude do campo, dependente das dimensões da estrutura e das ondas SPP, já descrita quando citamos os filmes de uma camada. Assim, a intensidade total é expressa como:

$$I_{total} = I_i + \left|\frac{E_o}{\pi}\frac{w}{t}\cos\left(k_{SPP}.t + \frac{\pi}{2}\right)\right|^2 \quad (39)$$

O termo I_i garante, a princípio, o aumento da transmissão óptica em fendas de filmes de multicamada em relação àquela associada a uma única camada. A partir desse fato, é razoável supor que a garantia de termos um aumento da transmissão, comparada ao caso de uma única camada, depende das espessuras de cada filme metálico e de seu coeficiente de absorção. Experimentalmente medimos a transmissão para diferentes valores de largura da fenda para uma espessura fixa de 200 nm. Os resultados obtidos para as duas configurações de filme estão representados nos gráficos presentes na figura 40. Como no caso de camada única, notamos que a transmissão cresce com a largura da fenda.

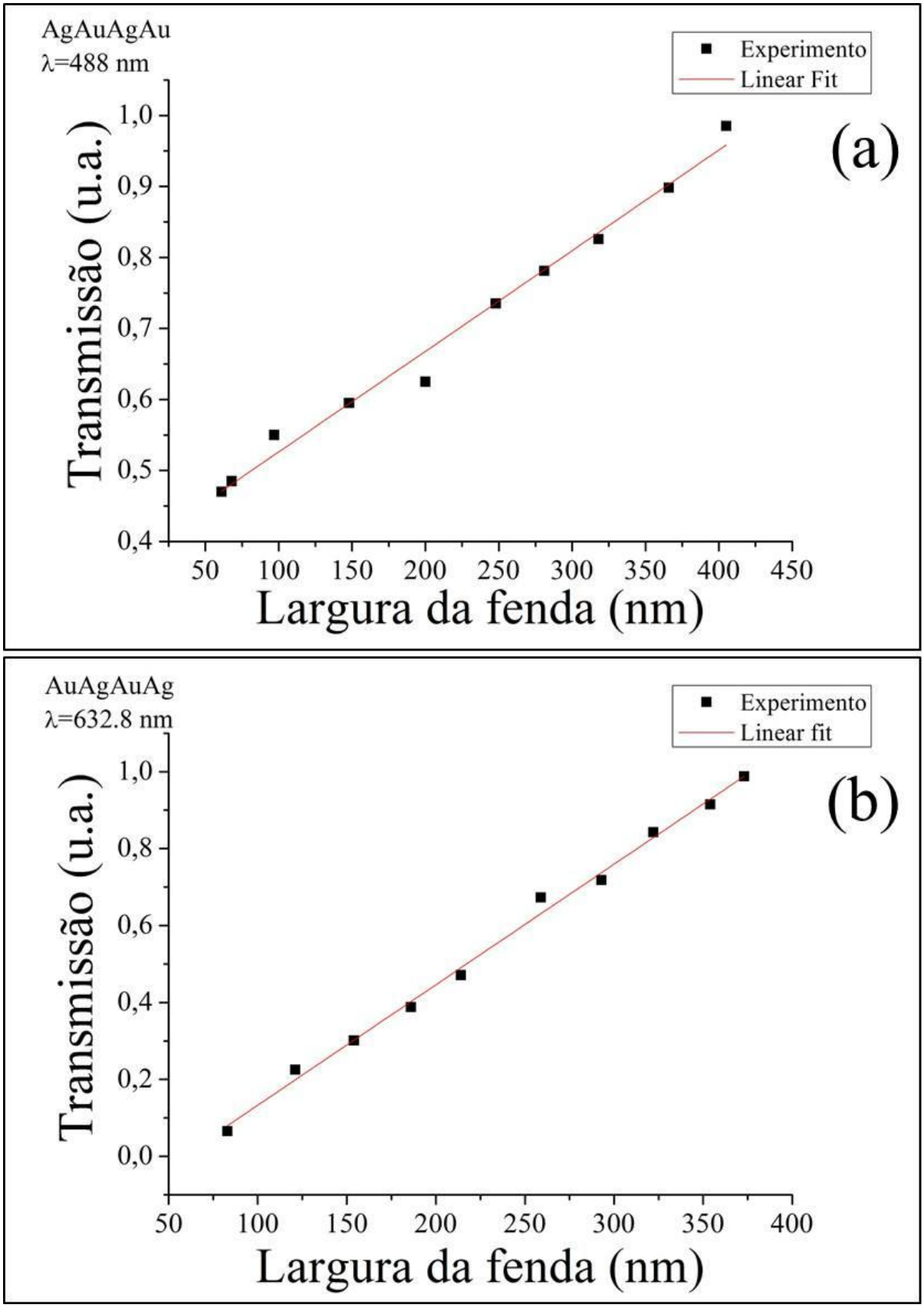


Figura 40 - Resultados experimentais para a transmissão óptica em multicamadas metálicas. Em (a) temos esquematizado o conjunto Ag/Au/Ag/Au (com prata como sendo primeira camada) em (b) o conjunto Au/Ag/Au/Ag. A espessura de ambos os filmes foi de 200 nm.

Com o objetivo de compararmos as situações em que tínhamos filmes com uma camada com as de multicamada, simulamos as duas configurações. Adotamos os intervalos de larguras entre 50-500 nm para o filme Ag/Au/Ag/Au e 50-700 nm para Au/Ag/Au/Ag. Os gráficos a seguir ilustram nossos propósitos.

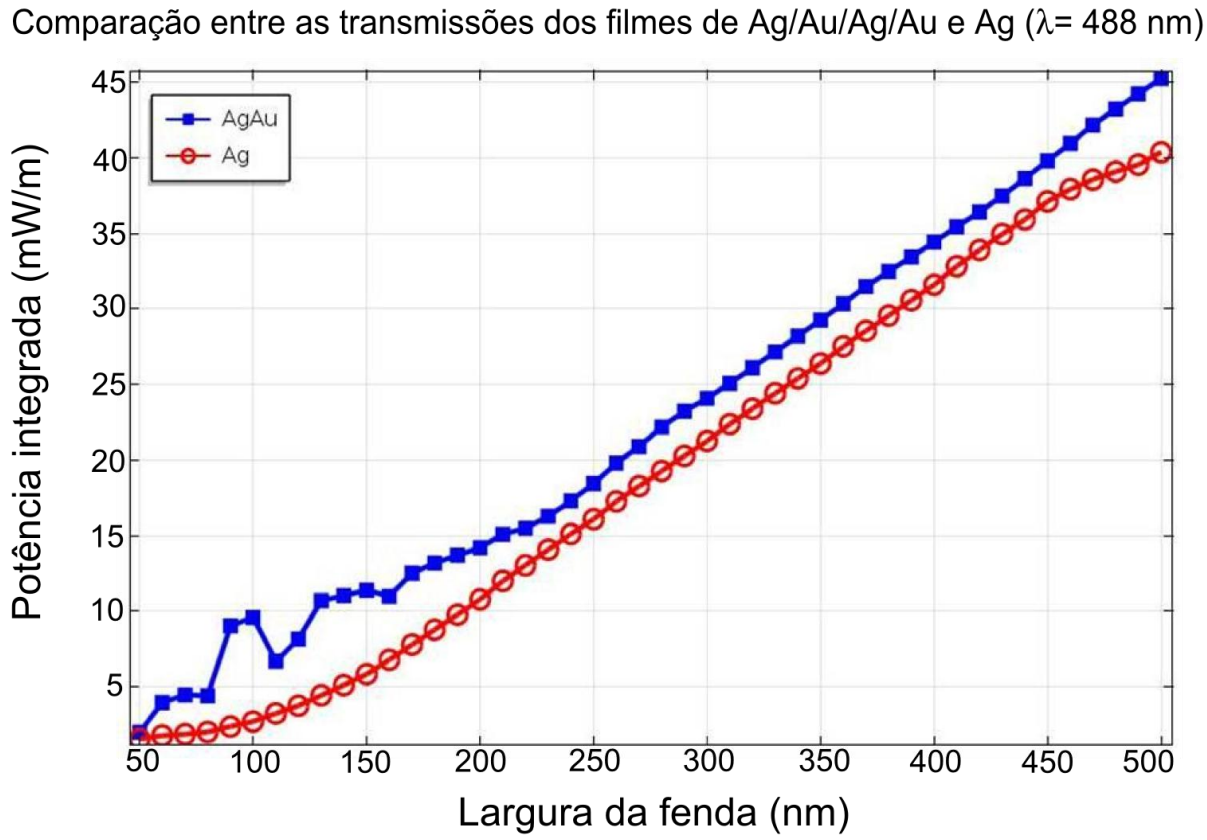


Figura 41 - Resultados das simulações da transmissão óptica em função das larguras fendas de filmes multicamada Ag/Au/Ag/Au (em azul) e camada única de Ag (em vermelho), incididos por uma fonte de comprimento de onda $\lambda = 488$ nm.

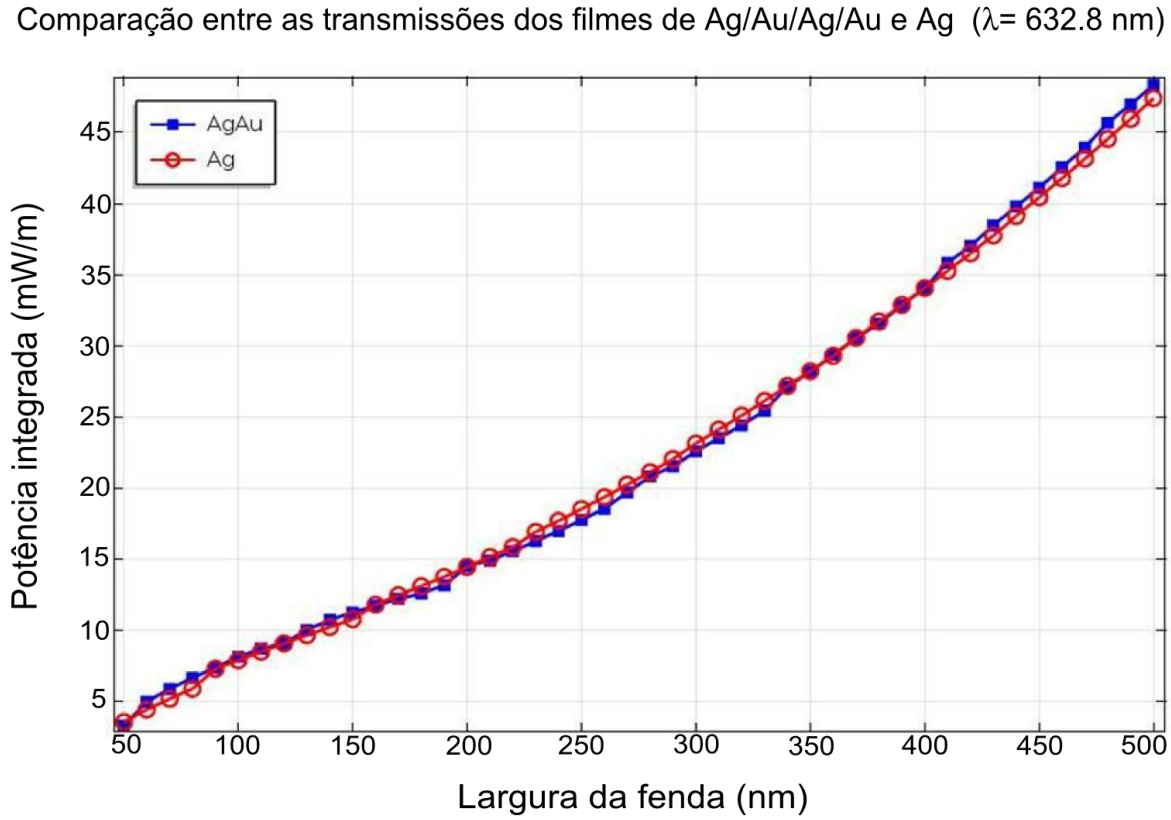


Figura 42 – Simulações da transmissão óptica em função das larguras das fendas de filmes multicamada Ag/Au/Ag/Au e camada única Ag incididos por uma fonte de comprimento de onda λ =632.8 nm

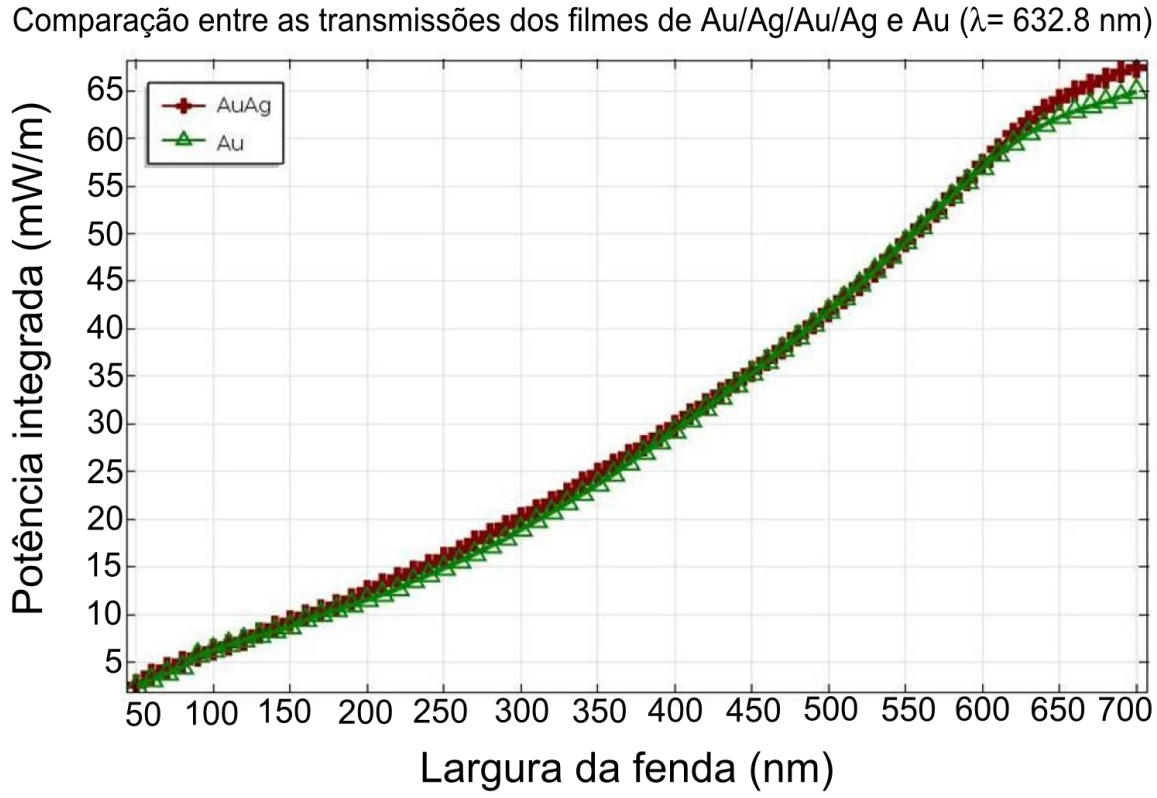


Figura 43- Simulações da transmissão óptica em função das larguras das fendas em filmes multicamada Au/Ag/Au/Ag (em marrom) e camada única de Au (em verde) incididos por uma fonte de comprimento de onda λ =632.8 nm

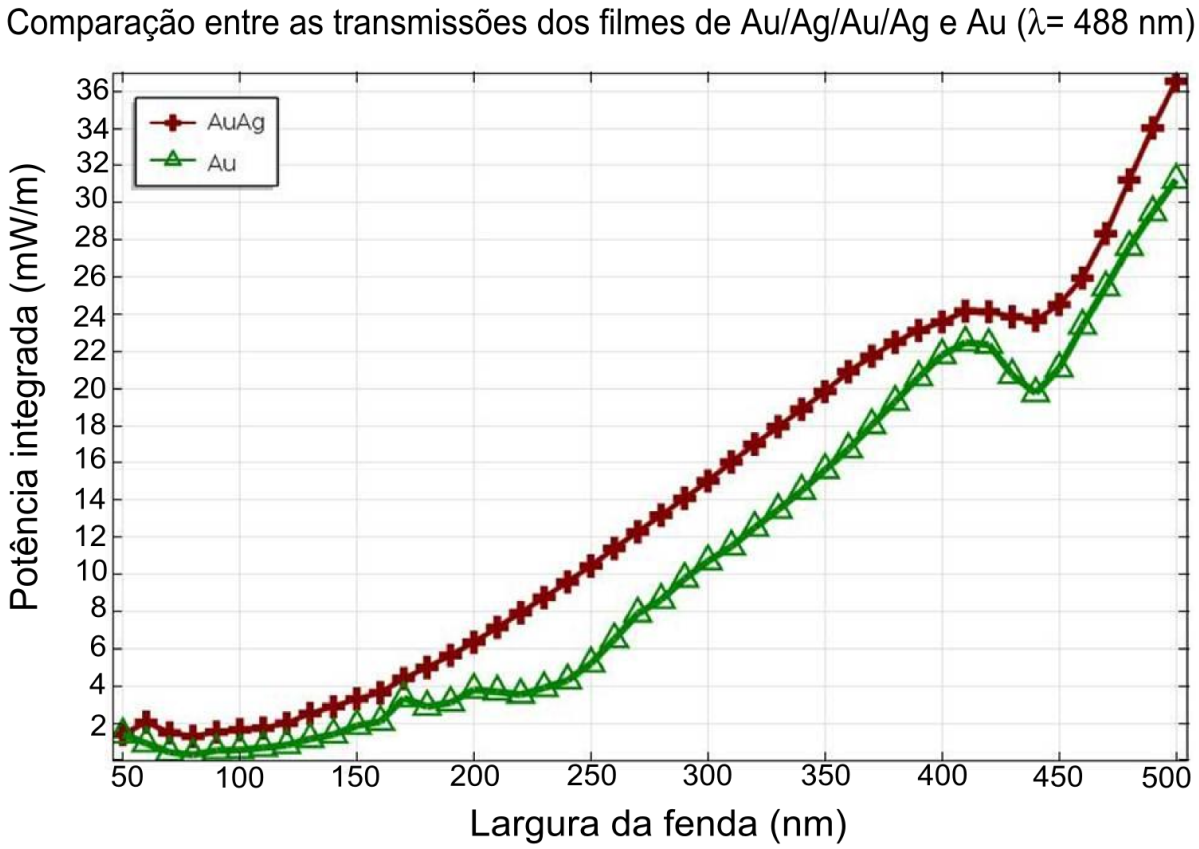


Figura 44 – Gráficos das simulações da transmissão óptica em função da largura das fendas para filmes multicamada (Au/Ag/Au/Ag) e camada única (Au), incididos por uma fonte de comprimento de onda λ =488 nm.

Dado que para os dois casos de multicamada a espessura (*d*) de cada filme metálico foi mantida constante em 50 nm, é razoável supor que o fator determinante para termos o acréscimo na transmissão dependa do coeficiente de absorção do metal. Essa propriedade está intimamente relacionada com a parte imaginária (κ) do índice de refração $\left(\alpha = 2\frac{\omega}{c}\kappa\right)$. É importante conhecer também a distância característica de decaimento da intensidade da onda $l = \frac{1}{\alpha}$, pois ela determina o comprimento percorrido pela onda no interior do metal, antes que ela sofra atenuação. Abaixo, seguem as tabelas em que estão explicitados os valores de α e l referentes ao ouro e à prata para os comprimentos de onda utilizados no experimento e nas simulações.

Tabela–6 Valores do coeficiente de absorção e distância característica de atenuação para $\lambda = 488\,nm$

Metal	$\boldsymbol{\alpha}$ $(\boldsymbol{m^{-1}})$	$\boldsymbol{l}$ $(\boldsymbol{m})$
Ouro	4.691 x 10^{7}	21.318 x 10^{-9}
Prata	7.244 x 10^{7}	13.804 x 10^{-9}

Tabela–7 Valores do coeficiente de absorção e distância característica de atenuação para $\lambda = 632.8\ nm$

Metal	$\boldsymbol{\alpha(m^{-1})}$	$\boldsymbol{l(m)}$
Ouro	6.134×10^{7}	16.301×10^{-9}
Prata	7.914×10^{7}	12.635×10^{-9}

Sendo os metais dispersivos, dependendo do comprimento de onda no qual incidimos o filme, ele pode vir a apresentar valores que contribuam ou prejudiquem o aumento da transmissão. No caso dos filmes de Ag e Ag/Au/Ag/Au (com a prata sendo o metal da camada superior), quando simulamos uma fonte de luz com λ=488 nm, nessa condição a prata apresenta um coeficiente de absorção menor comparado ao caso em que as mesmas estruturas são incididas por uma fonte de $\lambda = 632{,}8$ nm. Notamos por meio do gráfico da figura 41, que há um incremento na transmissão para o filme multicamada, comparado ao caso de uma única camada de Ag quando ambos são incididos por uma fonte de $\lambda = 488$ nm; em contrapartida, quando modificamos o comprimento de onda para λ= 632,8 nm, praticamente não há diferença entre os dois filmes (figura 42), pois nesse caso, o coeficiente de absorção da prata é maior e, consequentemente, as perdas são maiores. A mesma comparação é feita para a situação dos filmes de ouro, contidos nos gráficos das figuras 43 e 44, porém, nesse último exemplo, o comprimento de onda de 488 nm confere menos perdas na intensidade da transmissão.

As comparações entre os filmes metálicos e seus coeficientes de absorção α para os comprimentos de onda citados foram válidas ao considerar apenas o metal que constituía a camada mais externa do filme, cuja espessura era da ordem da distância característica de decaimento l (dezenas de nanômetros, como contidos nas tabelas 6 e 7). Uma vez que em decorrência das perdas na intensidade da onda, já na segunda camada, não poderíamos comparar estes coeficientes, pois nessa situação, a distâncias de 100 nm logo abaixo da entrada da fenda, a intensidade da onda já estaria totalmente atenuada, independentemente dos dois comprimentos de onda a serem postos como prova.

Ao simularmos a transmissão óptica em filmes multicamada, também foi de nosso interesse comparar as duas configurações metálicas para os comprimentos de onda empregados no trabalho. Os gráficos presentes nas figuras 45 e 46 exibem tal situação.

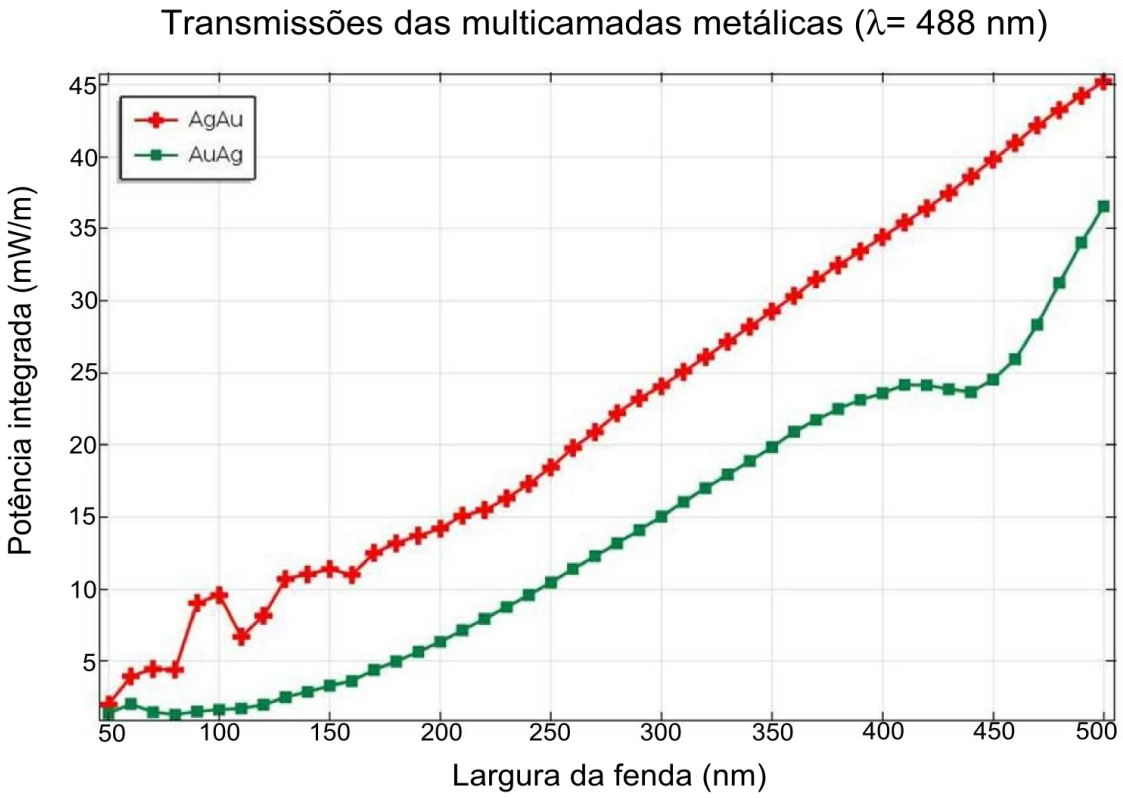


Figura 45 – Simulações da transmissão óptica da fenda em filmes multicamada Ag/Au/Ag/Au (em vermelho) e Au/Ag/Au/Ag (em verde) em função da largura da fenda incidida por uma luz com λ= 488 nm.

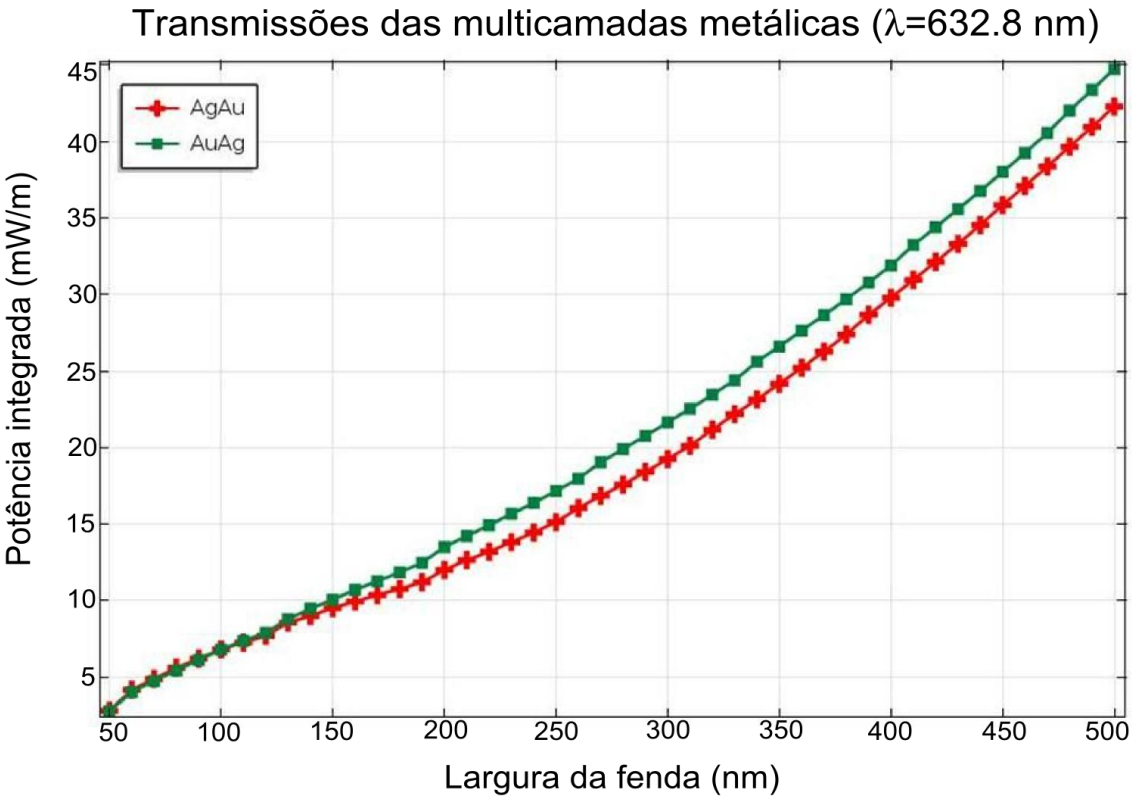


Figura 46 - Simulações da transmissão óptica da fenda em filmes multicamada Ag/Au/Ag/Au (em vermelho) e Au/Ag/Au/Ag (em verde) em função da largura da fenda incidida por uma luz com λ= 632.8 nm.

É notória a diferença nas intensidades das transmissões dos filmes multicamada quando incididos por fontes de comprimentos de onda distintos. Para o caso de λ= 632,8 nm os filmes de Au/Ag/Au/Ag apresentam um melhor desempenho comparado aos filmes de Ag/Au/Ag/Au, que está de acordo com a hipótese do coeficiente de absorção α, que para o comprimento de onda em questão é um pouco menor para o ouro, comparado ao caso da prata, de maneira que os resultados da simulação para a transmissão óptica para o filme de Au/Ag/Au/Ag apresentem um ligeiro acréscimo em relação ao filme Ag/Au/Ag/Au. Entretanto, não podemos partir da hipótese do coeficiente de absorção quando comparamos os dois filmes multicamada dos gráficos presentes na figura 45, pois, para o comprimento de onda de λ= 488 nm, o ouro apresenta um α menor do que a prata, logo, era de se supor que em filmes, cujo ouro sendo a camada superior, apresentariam vantagem em relação àqueles de prata, o que não ocorre para esses resultados.

4.5 Contribuição do formato em “V” da fenda na transmissão óptica

Apesar das vantagens em se utilizar a litografia em FIB tais como sua alta resolução e a pouca seletividade para materiais, existem imperfeições na forma da fenda decorrentes dos processos de interação dos íons de Ga^{+} com o filme metálico. Até o momento consideramos apenas a transmissão óptica por fendas ideais, isto é, fendas cujas geometrias não eram influenciadas pelas deformações originadas pela incidência dos feixes de íons sobre os filmes metálicos durante o processo de nanofabricação. Trabalhos como os de Liu (28) revelam a preocupação em descrever a propagação das ondas SPP levando em conta tais defeitos, especificamente para lentes plasmônicas.

Tomamos como base para nossas simulações as fendas fabricadas em filmes de ouro e prata, descritas no início do capítulo. Portanto, a priori, elas apresentam as mesmas dimensões de largura mencionadas naquele momento. Supomos que o feixe de íons interaja com o material de forma diferente à medida que este é retirado, conferindo à fenda um formato aproximado de V (melhor observado em relação ao plano transversal ao eixo da mesma). Modelamos esta característica do processo de fabricação de acordo com a figura 47.

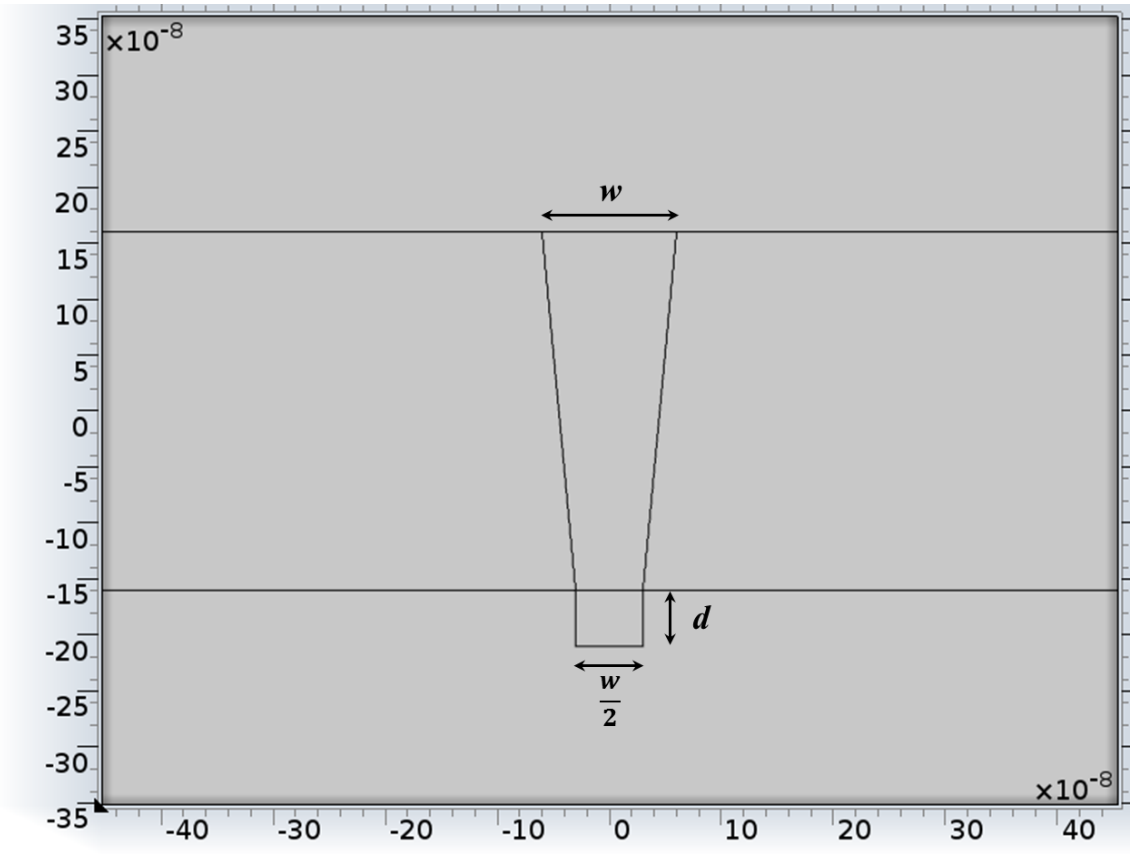


Figura 47 - Representação do plano transversal ao eixo da fenda de largura *w*. O formato V da estrutura é conferido graças à dissipação da energia cinética dos íons que compõe o feixe, utilizado na fabricação da fenda. Consideramos também o desbaste do substrato de vidro BK7 de comprimento *d*, também por conta da ação do feixe de Ga^{+}.

A hipótese mais aceita para explicar o porquê das fendas apresentarem esse formato está relacionada ao fato de que quando o feixe de íons de Ga^{+} incide sobre o filme metálico suas primeiras camadas sofrem mais com a colisão, tanto que observamos da figura acima que a parte superior da fenda é mais larga comparada à inferior. Conforme o feixe adentra no metal, a energia cinética dos íons é dissipada e consequentemente a ação dos mesmos frente ao filme é atenuada. Os processos descritos conferem à fenda o formato em V. Além disso, também levamos em conta o desbaste do substrato pelo feixe de íons, designando por *d* essa profundidade. A partir dessas considerações, simulamos a transmissão óptica para a presente estrutura.

Admitimos que a largura inferior da fenda (junto à interface com o vidro BK7) corresponda à metade do tamanho da largura superior. Logo quando nos próximos gráficos dizemos que a fenda apresenta uma largura (*w*) de, por exemplo, 70 nm este valor se refere à parte superior da cavidade, ou seja, a base da fenda possui 35 nm. A escolha dessa hipótese partiu da simplicidade em criar a nossa estrutura no software COMSOL Multiphysics® e, como primeira aproximação, ela foi suficiente para nossos propósitos.

A tomada de dados da transmissão óptica para esta configuração de fenda foi realizada de maneira distinta da descrita até aqui. Quando simulamos a fenda ideal, criamos um parâmetro no programa que designava a espessura do filme, estabelecíamos o intervalo de valores em que desejávamos obter os dados e, ao final da programação, foram plotados os gráficos da transmissão em função desse parâmetro. No caso da fenda em formato de V tomamos os dados referentes a cada valor de espessura separadamente, gerando ao final uma tabela; os dados contidos nesta tabela foram então exportados para serem plotados no software Origin®. A fim de compararmos os dois casos, exportamos também os dados da fenda ideal para o mesmo software. Os resultados que se obteve para a prata e o ouro estão representados nos gráficos das figuras 48 e 49, respectivamente.

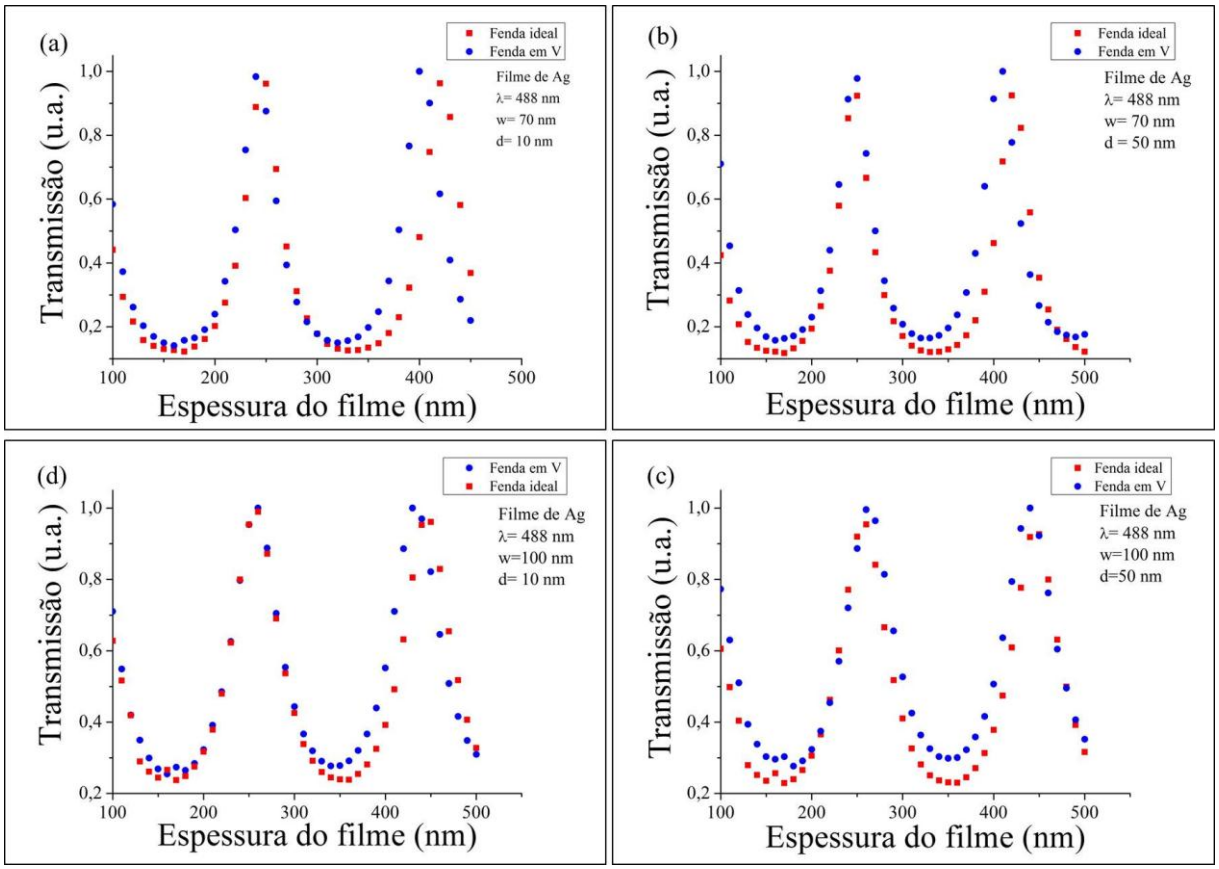


Figura 48 - Comparação entre os plotes da transmissão em filme de prata para a fenda ideal (em vermelho) e com formato V (em azul) para duas larguras (*w*) diferentes: 70 nm (a) e (b); 100 nm (c) e (d). Considera também a influência da suposta profundidade (*d*) originada da ação do feixe de íons de Ga^+ sobre o substrato. Os dois quadros da esquerda se referem aos casos em que *d*=10 nm, enquanto os da direita estão associados a *d*=50 nm.

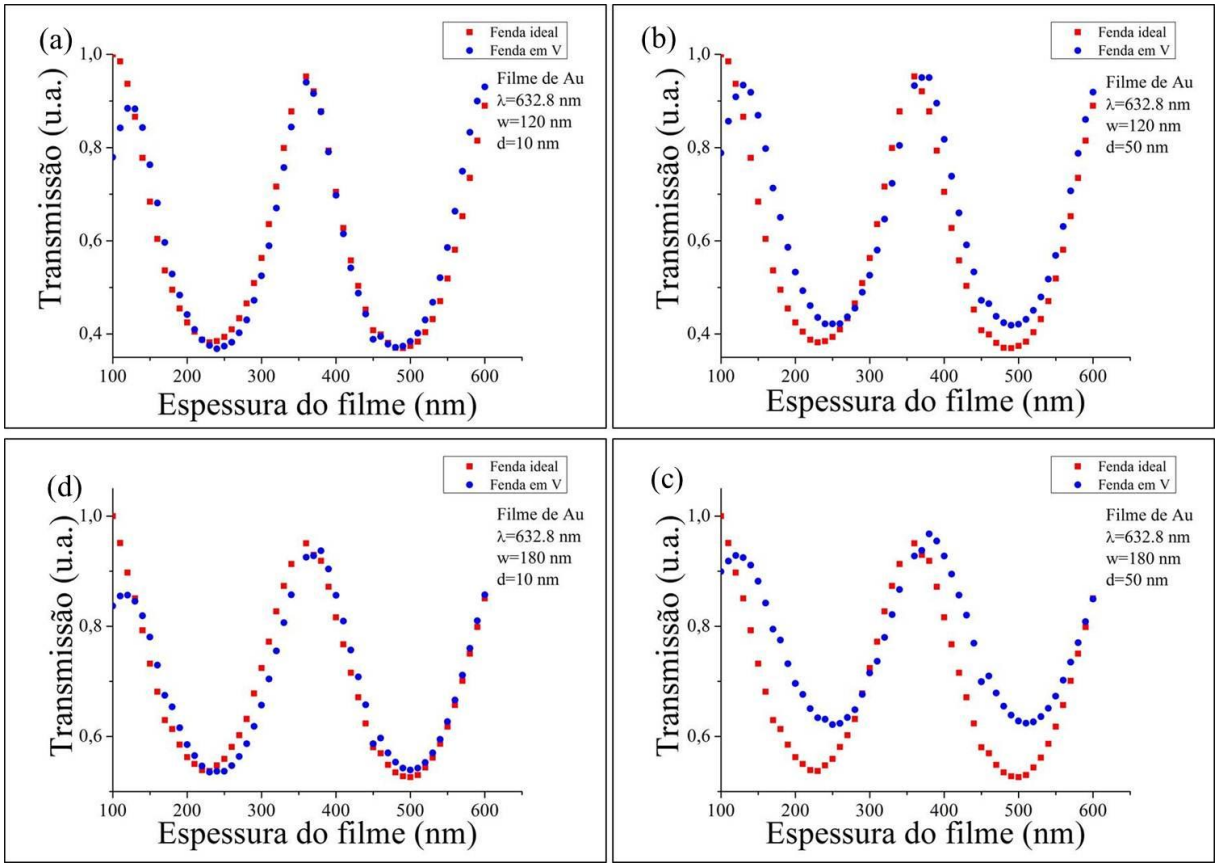


Figura 49 - Representação dos plotes da transmissão óptica das fendas no filme de ouro como função da espessura. Assim como no caso da prata, comparamos as simulações para os casos da fenda ideal (em vermelho) com a de formato em V (em azul). O comprimento de onda, a largura das fendas (*w*) e a profundidade (*d*) desbastada pelo feixe de íons estão informados no canto superior dos gráficos. (a) e (b) se referem às fendas com largura *w*=120 nm, enquanto (c) e (d) com *w*=180 nm.

Verificamos a partir dos gráficos que se considerarmos o desbaste do substrato em ambos os filmes como sendo de 10 nm não teremos diferenças significativas entre as transmissões da fenda ideal e a em formato V, mesmo para fendas relativamente largas, como são os casos das feitas em filme de ouro. Entretanto, quando *d* é de 50 nm, há o deslocamento de uma curva em relação à outra, sobretudo para o ouro. Percebemos uma ligeira mudança entre os máximos e os mínimos de transmissão, isso porque quando modificamos a geometria da fenda, alteramos também seus modos de propagação. Além disso, notamos o aumento na intensidade em relação ao caso ideal; uma das hipóteses para que isso ocorra se deve à ação dos dipolos elétricos localizados nos vértices da fenda. As simulações mostram que o pico de transmissão máxima tem um deslocamento para espessuras de filmes menores quando comparados com o caso ideal. Este deslocamento não é suficiente para explicar o fato dos máximos obtidos experimentalmente estarem deslocados com relação aos obtidos pelas simulações. Uma possível explicação sobre o que pode estar acontecendo será abordada na próxima seção

4.6 Redeposição do material

Durante o processo de reação dos íons de Ga^+ do feixe com o filme metálico pode ocorrer a formação de uma fase com o material deste. Para o ouro isto é mais comum, ocorrendo a formação da fase AuGa. Este material, ou mesmo Ga, pode redepositar no filme.

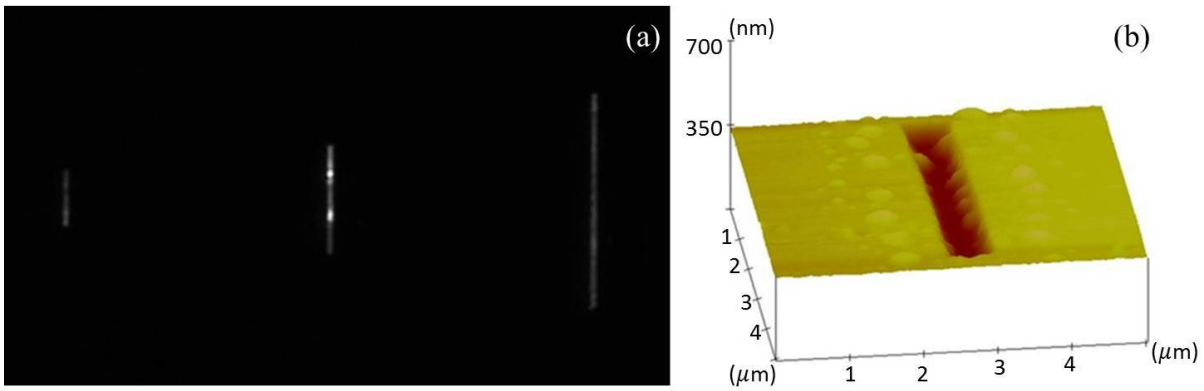


Figura 50 – Na sequência: (a) Imagem de três fendas de 120 nm com comprimentos de 5, 10 e 20 μm obtidas num microscópio confocal Zeiss iluminadas com laser de 633 nm com polarização transversa e coleta com polarização na mesma direção. Já em (b) é apresentado o perfil tridimensional obtido por meio de microscopia de força atômica da fenda fabricada em filme de ouro com espessura de 360 nm e 450 nm de largura. Nessa imagem é possível observar o material redepositado, proveniente do processo de fabricação, tanto dentro quanto fora da fenda.

Fica claro pela imagem da fenda de 10 μm de comprimento, presente na figura 50 (a), que o material redepositado tem influência na geração e propagação das ondas SPP ao longo da fenda. Perceba dois pontos de intensidade muito alta no interior da fenda. Isso ocorre provavelmente devido ao ouro redepositado não apenas dentro, mas também fora dela como evidenciado na imagem obtida por microscopia de força atômica, como vista na figura 50 (b). A presença desse material contribui na geração de plasmons adicionais ao caso da fenda ideal, o que leva ao aumento artificial da intensidade da luz transmitida pela fenda.

5 Conclusões

A contribuição dos efeitos decorrentes da geração de plasmons de superfície na transmissão óptica de fendas individuais em filmes metálicos de prata e ouro ficou evidente ao longo do trabalho. Tais efeitos apresentaram características distintas com relação à variação dos parâmetros geométricos da nanoestrutura, como a largura da fenda e a sua espessura. No primeiro caso, o incremento na largura se mostrou eficaz no aumento da intensidade de radiação eletromagnética transmitida, apresentando dependência linear para um intervalo de abertura razoavelmente grande; enquanto isso, ao variar - se a espessura do filme verificou - se o comportamento oscilatório na transmissão óptica. A ocorrência desse comportamento foi evidenciada, pois, a fenda apresenta, com uma boa aproximação, características similares a uma guia de onda, cujos modos de propagação das ondas SPP nesse caso, dependiam intimamente da espessura do filme. Concomitante às medidas experimentais, as simulações computacionais também demonstraram que a mudança nos parâmetros geométricos do sistema altera a transmissão. A análise sistemática, tanto teórica como experimental, da transmissão óptica de uma fenda individual como função de tais características, em especial na região do visível do espectro, não é muito abordada na literatura, daí a importância de se estudar tal fenômeno. No trabalho (24) mostramos resultados consideráveis nesse sentido.

Os resultados obtidos no experimento e nas simulações computacionais, que seguiram a sistemática citada no parágrafo anterior, apresentaram certas divergências entre si, em especial para o caso em que a espessura do filme varia. Na tentativa de se compreender o porquê disso, uma das sugestões foi a de que o formato da fenda fabricada pelo feixe de íons não era ideal, como aquele modelado em computador, apresentando a forma aproximada de um V. Entretanto, ao confrontar as duas situações (fenda ideal e a no formato V), não houve mudanças significativas entre as medidas. Uma das hipóteses para contornar esse conflito, é a de que há o acúmulo dos íons de Gálio no interior da fenda, provenientes do processo de fabricação, ou efeitos de redeposição de prata e ouro, que de alguma maneira alterariam a configuração das cargas e correntes superficiais na fenda, mudando radicalmente a propagação e consequentemente a transmissão óptica do sistema. Este efeito é mais evidente para espessuras acima de 300 nm.

Referências

1 EBBESEN, T. W.; LEZEC, H. J.; GHAEMI, H. F.; THIO, T.; WOLFF, P. A. Extraordinary optical transmission through sub-wavelength hole arrays. **Nature**, v. 391, p. 667-669, 1998.

2 GARCIA-VIDAL, F. J.; EBBESEN, T. W.; KUIPERS, L. Light passing through subwavelength apertures. **Reviews of Modern Physics**, v. 82, n. 1, p. 729-787, 2010.

3 LAL, S.; LINK, S.; HALAS, N. J. Nano-optics from sensing to waveguiding. **Nature Photonics**, v. 1, n. 11, p. 641-648, 2007.

4 WEINER, J. The physics of light transmission through subwavelength apertures and aperture arrays. **Reports on progress in physics**, v. 72, n. 6, p. 1-19, 2009.

5 RIVERA, V. A. G.; FERRI, F. A.; SILVA, O. B.; SOBREIRA, F. W. A.; MAREGA JUNIOR, E. Light transmission via subwavelength aperture in thin metals film. In: KIM, K. Y. **Plasmonics:** principles and applications. Croácia. Intech, 24 de outubro de 2012. p. 157-182.

6 BETHE, H. A. Theory of diffraction by small holes. **Physical Review**, v. 66, n. 7-8, p. 163-182, 1944.

7 BOUWKAMP, C. J. On Bethe's theory of diffraction by small holes. **Philips Research Reports**, v. 5, n. 5, p. 321-332, 1950.

8 JACKSON, J. D. **Classical Electrodynamics**. 3ª edição New York: John Wiley & Sons, 1999. 832 p. ISBN 978-047-1309-32-1

9 PORTO, J. A.; GARCIA-VIDAL, F. J.; PENDRY, J. B. Transmission resonances on metallic gratings with very narrow slits. **Physcial Review Letters**, v. 83, n. 14, p. 2845-2848, 1999.

10 TAKAKURA, Y. Optical resonance in a narrow slit in a thick metallic screen. **Physical Review Letters**, v. 86, n. 24, p. 5601-5603, 2001.

11 XIE, Y.; ZAKHARIAN, A.; MOLONEY, J.; MANSURIPUR, M. Transmission of light through a periodic array of slits in a thick metallic film. **Optics Express**, v. 13, n. 12, p. 4485-4491, 2005.

12 WOOD, R. W. On a remarkable case of uneven distribution of light in a diffraction grating spectrum. **Proceedings of the Physical Society of London**, v. 18, p. 269-275, 1902.

13 SOMMERFELD, A. Über die ausbreitung der Wellen in der drahtlosen Telegraphie. **Annalen der Physik**, v. 333, n.4, p. 665-736, 1909.

14 FANO, U. The theory of anomalous diffraction gratings and of quasi-stationary waves on metallic surfaces (Sommerfeld's waves). **Journal of the Optical Society of America**, v. 31, n. 3, p. 213-222, 1941.

15 POWELL, C. J.; SWAN, J. B. Origin of the characteristic electron energy losses in aluminum. **Physical Review**, v. 115, n.4, p. 869-875, 1959.

16 CUNNINGHAM, S. L.; MARADUDIN, A. A.; WALLIS, R. F. Effect of a charge layer on the surface plasmon polariton dispersion curve. **Physical Review B**, v. 10, n. 8 p. 3342-3355, 1974.

17 LEZEC, H. J.; THIO, T. Diffracted evanescent wave model for enhanced and suppressed optical transmission through subwavelength hole arrays. **Optics Express**, v. 12, n. 16, p. 3629-3651, 2004.

18 LINDBERG, J.; LINDFORS, K.; SETÄLÄ, T.; KAIVOLA, M.; FRIBERG, A. Spectral analysis of resonant transmission of light through a single sub-wavelength slit. **Optics Express**, v. 12, n. 4, p. 623-632, 2004.

19 GAY, G.; ALLOSCHERY, O.; LESEGNO, B. V.; WEINER, J.; LEZEC, H. J. Surface wave generation and propagation on metallic subwavelength structures measured by far-field interferometry. **Physical Review Letters**, v. 96, n. 21 p. 213901-1 – 213901-4, 2006.

20 GAY, G.; ALLOSCHERY, O.; LESEGNO, B. V.; O'DWYER, C; WEINER, J.; LEZEC, H. J. The optical response of nanostructured surfaces and the composite diffracted evanescent wave model. **Nature Physics**, v. 2, n. 4, p. 262-267, 2006.

21 KALKUM, F.; GAY, G.; ALLOSCHERY, O.; WEINER, J.; LEZEC, H. J.; XIE, Y.; MANSURIPUR, M. Surface wave interferometry on single subwavelength slit-groove structures fabricated on gold films. **Optics Express**, v. 15, n. 5, p. 2613-2621, 2007.

22 PACIFICI, D.; LEZEC, H. J.; ATWATER, H.; WEINER, J. Quantitative determination of optical transmission through subwavelength slit arrays in Ag films: role of surface wave interference and local coupling between adjacent slits. **Physical Review B**, v. 77, n. 11, p. 1-5, 2008.

23 LALUET, J.-Y.; DREZET, A.; GENET, C.; EBBESEN, T. W. Generation of surface plasmons at single subwavelength slits: from slit to ridge plasmon. **New Journal of Physics**, v. 10, n. 10, p. 105014-1 – 105014-9, 2008.

24 FERRI, F.A.; RIVERA, V. A. G.; OSORIO, S. P. A.; SILVA, O. B.; ZANATTA, A. R.; BORGES, B-H. V.; WEINER, J.; MAREGA JUNIOR., E. Influence of film thickness on the optical transmission through subwavelength single slits in metallic thin films. **Applied Optics**, v. 50, n. 31, p. 1-6, 2011.

25 YANG, F.; SAMBLES, J. R. Resonant transmission of microwaves through a narrow metallic slit. **Physical Review Letters**, v. 89, n. 6, p. 063901-1 – 063901-3, 2002.

26 WEINER, J. The electromagnetics of light transmission through subwavelength slits in metallic films. **Optics Express**, v. 19, n. 17, p. 16139-16153, 2011.

27 BOZHEVOLNYI, S. I.; VOLKOV, V. S.; DEVAUX, E.; EBBESEN, T. W. Channel plasmon-polariton guiding by subwavelength metal grooves. **Physical Review Letters**, v. 95, n. 4, p. 046802-1 – 046802-4, 2005.

28 LIU, Y.; FU, Y.; ZHOU, X. Influence of V-shaped metallic subwavelength slits with variant periods for superfocusing. **Plasmonics**, v. 5, n. 1, p. 79-83, 2010.

29 WEINER, J.; NUNES, F. D. High frequency response of subwavelength-structured metals in petahertz domain. **Optics Express**, v. 16, n. 6, p. 21256-21270, 2008.

30 XIE, Y. **Transmission properties of sub-wavelength metallic slits and their applications.** 2006. 149 p. Ph. D. Thesis (Physics) - University of Arizona, Arizona, 2006.

31 SHARMA, A. K.; GUPTA, B. D. On the sensitivity and signal to noise ratio of a step-index fiber optic surface plasmon resonance sensor with bimetallic layers. **Optics Communications**, v. 245, n. 1-6, p. 159-169, 2005.

32 GUPTA, B. D.; SHARMA, A. K. Sensitivity evaluation of a multi-layered surface plasmon resonance-based fiber optic sensor: a theoretical study. **Sensors and Actuators B: Chemical**, v. 107, n. 1, p. 40-46, 2005.

33 ZYNIO, S. A.; SAMOYLOV, A. V.; SUROVTSEVA, E. R.; MIRSKY, V. M.; SHIRSOV, Y. M. Bimetallic layers increase sensitivity of affinity sensors based on surface plasmon resonance. **Sensors**, v. 2, n. 2, p. 62-70, 2002.

34 RITCHIE, R. H. Plasma losses by fast electrons in thin films. **Physical Review**, v. 106, n. 5, p. 874-881, 1957.

35 PALIK, E.D. **Handbook of optical constants of solids**. New York: Academic Press. 840 p. ISBN 0125444206, 1985.

36 GHOSH, G. Sellmeier coefficients and dispersion of thermo-optic coefficients for some optical glasses. **Applied Optics**, v. 36, n. 7, p. 1540-1546, 1997.

37 LINDQUIST, N. C.; NAGPAL, P.; Mc PEAK, K. M.; NORRIS, D. J.; OH, S-H. Engineering metallic nanostructures for plasmonics and nanophotonics. **Reports on Progress in Physics**, v. 75, n. 3, p. 1-61, 2012.

38 MELNGAILIS, J. Focused ion beam technology and applications. **Journal of vacuum science and technology B:** Microelectronics and nanometer structures, v. 5, n. 2, p. 469-495, 1987.

39 ORLOFF, J. High-resolution focused ion beams. **Review of scientific instruments**, v. 64, n. 5, p. 1105-1130, 1993.

40 LANGFORD, R. M.; NELLEN, P. M.; GIERAK, J.; FU, Y.Q. Focused ion beam micro- and nanoengineering. **MRS Bulletin**, v. 32, n. 5, p. 417-423, 2007.

41 TAO, T.; RO, J.; MELNGAILIS, J.; XUE, Z.; KAESZ, H. D. Focused ion beam induced deposition of platinum. **Journal of vacuum science and technology B:** Microelectronics and nanometer structures, v. 8, n. 6, p. 1826-1829, 1990.

42 MOBERLYCHAN, W. J.; ADAMS, D. P.; AZIZ, M. J.; HOBLER, G.; SCHENKEL, T. Fundamentals of focused ion beam nanostructural processing: below, at, and above the surface. **MRS Bulletin**, v. 32, n. 5, p. 424-432, 2007.

43 REYNTJENS, S.; PUERS, R. A review of focused ion beam applications in microsystem technology. **Journal of micromechanics and microengineering**, v. 11, n.4, p. 287-300, 2001.

44 MAIER, S. A. **Plasmonics:** fundamentals and applications. New York: Springer, 2007. 223 p. ISBN 978-0387-33150-8.

45 VOLKERT, C. A.; MINOR, A. M. Focused ion beam microscopy and micromachining. **MRS Bulletin**, v. 32, n. 5, p. 389-399, 2007.

46 FORBES, R. G; DJURIC, Z. Progress in understanding liquid-metal ion source operation. In: INTERNATIONAL CONFERENCE VACUUM MICROELECTRONICS, 9., 1996, Saint Petersburg. **Proceedings…** Saint Petersburg: IEEE Conference Publications, 1996. p. 468-472

47 KOWARZ, M. W. Homogeneous and evanescent contributions in scalar near-field diffraction. **Applied Optics**, v. 34, n. 17, p. 3055-3063, 1995.

48 MORENO, L. M.; GARCIAL-VIDAL, J. F. Optical transmission through circular hole arrays in optically thick metal films. **Optics Express**, v. 12, n. 16, p. 3619-3628, 2004.

49 YE, Y-H.; ZHANG, J-Y. Enhanced light transmission through cascaded metal films perforated with periodic hole arrays. **Optics Letters**, v. 30, n.12, p. 1521-1523, 2005.

50 TAN, Y. Y.; YUAN, X-C.; ONG, B. H.; BU, J.; LIN, Q. Y. Two layered metallic film induced surface plasmons for enhanced optical propulsion of microparticles. **Applied Physics Letters**, v. 91, n. 14, p. 141108-1 – 141108-3, 2007.

51 DYANKOV, G., ZEKRITI, M., BOUSMINA, M. Plasmons modes management. **Plasmonics**, v. 6, n. 4, p. 643-650, 2011.

52 BORN, M.; WOLF, E. **Principles of optics:** Electromagnetic theory of propagation, interference and diffraction of light. 7th ed. Cambridge: Cambridge University Press, 1999. 998 p. ISBN 0521642221.

53 MACHADO, K. D. **Teoria do eletromagnetismo.** Ponta Grossa: UEPG, 2006. v. 3. ISBN 85-86941-77-8.

54 BERENGER, J. P. A. Perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves. **Journal of Computational Physics**, v. 114, n. 2, p. 185-200, 1994.

55 BERMÚDEZ, A.; H-NIETO, L.; PRIETO, A.; RODRÍGUEZ, R. An optimal perfectly matched layer with unbounded absorbing function for time-harmonic acoustic scattering problems. **Journal of Computational Physics**, v. 223, n. 2, p. 469-488, 2007.

Apêndices

APÊNDICE A: Lista de Publicações

Artigo/Proceeding:

- FERRI, F. A.; RIVERA, V. A. G.; OSORIO, S. P. A.; SILVA, O. B.; ZANATTA, A. R.; BORGES, B-H. V.; WEINER, J.; MAREGA JUNIOR., E. Influence of film thickness on the optical transmission through subwavelength single slits in metallic thin films. **Applied Optics**, v. 50, n. 31, p. 1-6, 2011. DOI: 10.1364/AO.50.000 G11
- **SPIE Photonics West. Proceedings – SPIE,** 2012, San Francisco, EUA. **Surface plasmon propagation in novel multilayered metallic thin films**. FERRI, F. A.; RIVERA, V. A. G; SILVA, O. B.; OSORIO, S. P. A.; ZANATTA, A. R.; BORGES, B-H. V.;WEINER, J.; MAREGA JUNIOR, E. v.8269, p.826923-1 – 826923-6, 2012. DOI: 10.1117/12.906440

Capítulo de Livro:

- RIVERA, V. A. G.; FERRI, F. A.; SILVA, O. B.; SOBREIRA, F. W. A.; MAREGA JUNIOR, E. Light transmission via subwavelength aperture in thin metals film. In: KIM, K. Y. **Plasmonics:** principles and applications. Croácia. Intech, 2012. p. 1-26. In press.

Apresentações em Congressos

- SILVA, O. B.; RIVERA, V. A. G.; FERRI, F. A.; OSORIO, S. P. A.; MAREGA JUNIOR, E.; WEINER, J.; BORGES, B-H. V. Computational simulations of the optical transmission through sub-wavelength slits in metallic multilayers via surface plasmon polariton generation. **Encontro de Física**, 2011. Foz do Iguaçu, PR, Brasil.
- SILVA, O. B.; FERRI, F. A. RIVERA, V. A. G.; ZANATTA, A. R.; MAREGA JUNIOR, E.; WEINER, J.; BORGES, B-H. V. Optical transmission on sub-wavelength slits arrays on metallic films. **XXXV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada**, 2012. Águas de Lindóia, SP, Brasil.

APÊNDICE B. Transmissão de radiação através de fendas segundo a óptica física[*1]

1 Teoria escalar da difração

A superfície $\mathbf{S_1}$ presente na figura 51 abaixo é tida como aquela em que a frente de onda incide em determinado obstáculo, tal como orifícios e fendas. Já a superfície $\mathbf{S_2}$ é considerada muito distante de $\mathbf{S_1}$, de maneira que nela as intensidades das ondas são imperceptíveis. A princípio nosso objetivo consiste em determinar o comportamento das ondas no ponto $\vec{r}$, definido como ponto de observação, situado na região 2 após as mesmas ultrapassarem os obstáculos.

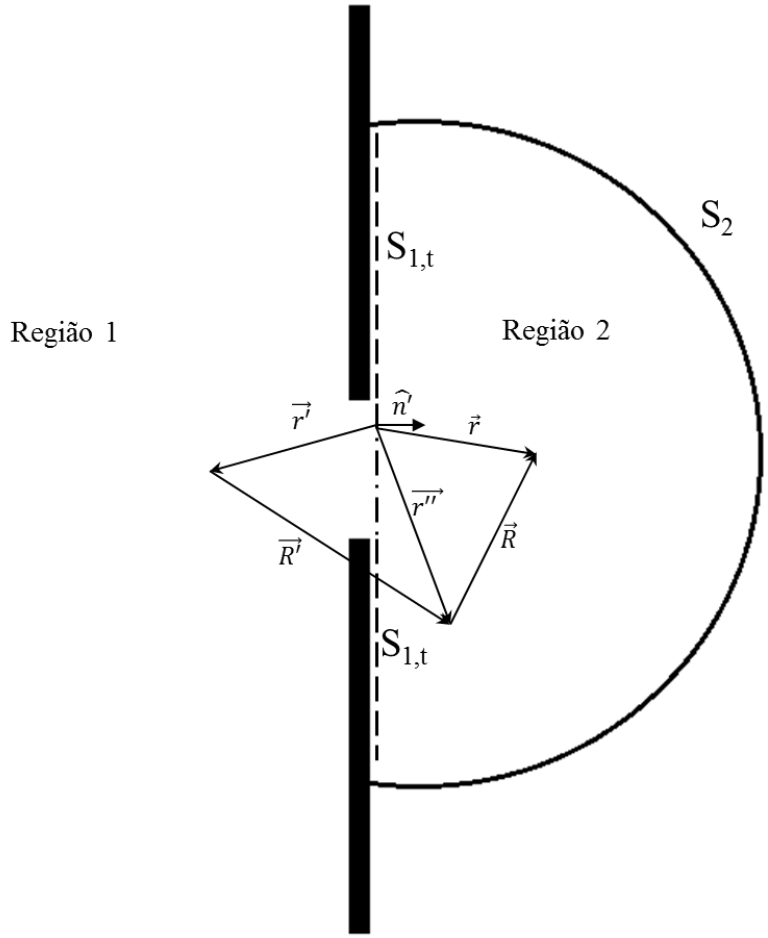


Figura 51 - Representação da difração da luz por uma fenda. A linha desenhada por pontos e traços logo após a abertura se refere à superfície $S_{1,a}$

[1] Adaptado de (53).

Supondo que as ondas dos campos elétrico e magnético apresentem dependência harmônica no tempo ($e^{-i\omega t}$), a componente escalar dos campos é definida por $\psi(\vec{r})$ e é descrita por meio da equação de Helmholtz:

$$\nabla^2\psi + k^2\psi(\vec{r}) = 0 \tag{40}$$

Onde *k* corresponde ao vetor de onda na região 2. Para resolver a equação acima, nos valemos da função auxiliar $\varphi(\vec{r})$ denominada função de Green que satisfaz a seguinte equação:

$$\nabla^2\varphi + k^2\varphi(\vec{r}) = -\delta\left(\vec{r} - \overrightarrow{r''}\right) \tag{41}$$

Aqui $\overrightarrow{r''}$ representa as posições assumidas pelas ondas na região 2. Podemos aplicar o teorema de Green:

$$\int \psi(\vec{r})\,\nabla^2\varphi - \varphi(\vec{r})\,\nabla^2\psi\,dV = \oint\left[\psi(\vec{r})\,\vec{\nabla}\varphi - \varphi(\vec{r})\,\vec{\nabla}\psi\right]\cdot\hat{n}\,dA \tag{42}$$

Onde $\hat{n}$ é o versor normal à superfície S (definida pela união entre $\mathbf{S_1}$ e $\mathbf{S_2}$), cujo sentido é apontado para fora de S. Podemos aplicar os resultados contidos nas equações 40 e 41 na integral de volume apresentada em 42:

$$\int \psi(\vec{r})[-\delta\left(\vec{r} - \overrightarrow{r''}\right) - k^2\varphi(\vec{r})] - \varphi(\vec{r})[-k^2\psi(\vec{r})]dV = \oint\left[\psi(\vec{r})\,\vec{\nabla}\varphi - \varphi(\vec{r})\,\vec{\nabla}\psi\right]\cdot\hat{n}\,dA$$

É suposto que tanto $\psi(\vec{r})$ quanto $\varphi(\vec{r})$ são funções escalares, logo temos a seguinte situação:

$$-\int \psi(\vec{r})\delta\left(\vec{r} - \overrightarrow{r''}\right)dV = -\psi(\vec{r}) = \oint\left[\psi(\vec{r})\,\vec{\nabla}\varphi - \varphi(\vec{r})\,\vec{\nabla}\psi\right]\cdot\hat{n}\,dA$$

Devemos enfatizar que as integrais acima estão definidas a partir das coordenadas $\overrightarrow{r''}$. Por conveniência podemos suprimir o sinal negativo da expressão acima, definindo um novo versor, $\hat{n}' = -\hat{n}$, cujo sentido está apontando para o interior de S. Feita esta consideração, a última equação é escrita como:

$$\psi(\vec{r}) = \oint \left[\psi(\vec{r})\,\vec{\nabla}\varphi - \varphi(\vec{r})\,\vec{\nabla}\psi\right] \cdot \hat{n}'\,dA \tag{43}$$

Como $\varphi(\vec{r})$ deve satisfazer a equação diferencial 41, então, ela corresponde a uma função de Green:

$$\varphi\left(\vec{r}, \overrightarrow{r''}\right) = \frac{e^{ik|\vec{r}-\overrightarrow{r''}|}}{4\pi\left|\vec{r}-\overrightarrow{r''}\right|} = \frac{e^{ikR}}{4\pi R} \tag{44}$$

Onde: $R = \left|\vec{r}-\overrightarrow{r''}\right|$. Ao substituir esse resultado em 43:

$$\psi(\vec{r}) = \oint \left[\psi(\vec{r})\,\vec{\nabla}\left(\frac{e^{ikR}}{4\pi R}\right) - \frac{e^{ikR}}{4\pi R}\,\vec{\nabla}\psi\right] \cdot \hat{n}'\,dA$$

O operador $\vec{\nabla}$ atua apenas sobre as coordenadas $\overrightarrow{r''}$, portanto, devemos ter cautela devido ao sinal negativo que aparecerá no momento em que aplicarmos $\vec{\nabla}$:

$$\psi(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi}\oint \left[-\psi(\vec{r})ik\frac{e^{ikR}}{R}\left(1-\frac{1}{ikR}\right)\hat{R} - \frac{e^{ikR}}{R}\,\vec{\nabla}\psi\right] \cdot \hat{n}'\,dA$$

$$\psi(\vec{r}) = -\frac{1}{4\pi}\oint \frac{e^{ikR}}{R}\left[\psi(\vec{r})ik\left(1-\frac{1}{ikR}\right)\hat{R} + \vec{\nabla}\psi\right] \cdot \hat{n}'\,dA \tag{45}$$

É importante recordar que definimos a superfície **S** como a união de $\mathbf{S_1}$ e $\mathbf{S_2}$. Podemos ir além, ao dividir $\mathbf{S_1}$ em duas regiões distintas: $\mathbf{S_{1,a}}$ e $\mathbf{S_{1,t}}$. A primeira abrange os locais em que há passagem da radiação eletromagnética (luz) tais como fendas e orifícios. A segunda corresponde às zonas que ficam imediatamente atrás da tela, porém, encobertas pela mesma. A necessidade em se definir essas duas superfícies está no fato de querermos conhecer o comportamento de $\psi(\vec{r})$ e de seu gradiente em localidades próximas ($\mathbf{S_1}$) e distantes ($\mathbf{S_2}$) da fenda. As considerações feitas a seguir correspondem às hipóteses realizadas por Gustav Kirchhoff, quando o mesmo estudou a difração:

1. Na superfície $\mathbf{S_{1,a}}$ tudo se passa como se não houvesse obstáculo, portanto, os valores de $\psi(\vec{r})$ e $\vec{\nabla}\psi \cdot \widehat{n'}$ em $\mathbf{S_{1,a}}$ são os mesmos com ou sem a tela. Se o orifício for bem maior que o comprimento de onda (λ) da radiação isso é válido. Tal fato não é mais

verdade quando o orifício for da ordem ou menor do que λ. Na região de fronteira entre $\mathbf{S_{1,a}}$ e $\mathbf{S_{1,t}}$ essa hipótese também falha;

2. Na superfície $\mathbf{S_{1,t}}$, tanto $\psi(\vec{r})$ quanto $\vec{\nabla}\psi \cdot \widehat{n'}$ são nulos;
3. $\mathbf{S_2}$ é escolhida de maneira a não contribuir no cálculo da integral 45, pois está muito distante da abertura da tela.

Com essas hipóteses concluímos que de todas as superfícies que compõem S, apenas $\mathbf{S_{1,a}}$ contribui para a medida da onda difratada na região posterior à tela. Logo, se na região 1 as ondas que se propagam são esféricas, então em $\overrightarrow{r''}$ também devem se comportar de maneira semelhante:

$$\psi\left(\overrightarrow{r''}\right) = A\frac{e^{ik|\overrightarrow{r''}-\overrightarrow{r'}|}}{\left|\overrightarrow{r''}-\overrightarrow{r'}\right|} = A\,\frac{e^{ikR'}}{R'} \tag{46}$$

A expressão acima corresponde ao termo $\psi(\vec{r})$ do integrando presente na equação 45. Ao aplicar tal termo na integral, temos:

$$\psi(\vec{r}) = -\frac{1}{4\pi}\oint \frac{e^{ikR}}{R}\left[A\,\frac{e^{ikR'}}{R'}ik\left(1-\frac{1}{ikR}\right)\hat{R} + \vec{\nabla}\left(A\,\frac{e^{ikR'}}{R'}\right)\right]\cdot \hat{n}'\,dA$$

Atuando o operador $\vec{\nabla}$ no segundo termo entre parêntesis do integrando, obtemos a seguinte expressão:

$$\psi(\vec{r}) = -\frac{ikA}{4\pi}\oint \frac{e^{ikR}}{R}\frac{e^{ikR'}}{R'}\left[\left(1-\frac{1}{ikR}\right)\hat{R} + \left(1-\frac{1}{ikR'}\right)\widehat{R'}\right]\cdot \hat{n}'\,dA \tag{47}$$

Ao verificar a terceira hipótese de Kirchhoff sobre as ondas difratadas, vemos que para distâncias muito grandes da fenda a intensidade das mesmas é desprezível. Por isso mesmo, ignoramos as contribuições dos termos proporcionais a $\frac{1}{R^2}$ e $\frac{1}{R'^2}$. Portanto, a equação 47 é escrita como:

$$\psi(\vec{r}) = -\frac{ikA}{4\pi}\oint \frac{e^{ikR}}{R}\frac{e^{ikR'}}{R'}\left[\hat{R} + \widehat{R'}\right]\cdot \hat{n}'\,dA \tag{48}$$

A equação acima é conhecida na literatura por *integral de difração de Fresnel-Kirchhoff*. Ela nos informa que a onda esférica produzida em $\overrightarrow{r'}$, propaga – se dessa forma até

$\overrightarrow{r''}$ que é fixo e pertence a $\mathbf{S_{1,a}}$, onde estão as fendas feitas na tela e, a partir daí, a função de Green $\varphi(\vec{r}, \overrightarrow{r''}) = \frac{e^{ikR}}{4\pi R}$ é a responsável pela propagação até o ponto $\vec{r}$.

Definindo θ como o ângulo entre $\widehat{n'}$ e $\vec{R}$ e θ' o ângulo entre $\widehat{n'}$ e $\overrightarrow{R'}$, podemos expressar a equação 48 em termos desses ângulos por meio da aplicação do produto escalar dos termos entre colchetes com o versor $\widehat{n'}$:

$$\psi(\vec{r}) = -\frac{ikA}{4\pi}\oint \frac{e^{ikR}}{R}\frac{e^{ikR'}}{R'}[cos\theta + cos\theta']\, dA \tag{49.1}$$

É conveniente escrever a integral 48 para o caso particular no qual a onda incidente seja plana, semelhante ao caso que trabalhamos no decorrer de nossa análise:

$$\psi(\vec{r}) = -\frac{ikA}{4\pi}\oint \frac{e^{ikR}}{R}\left[\hat{R} + \widehat{R'}\right]\cdot \hat{n}'\, dA \tag{49.2}$$

Podemos particularizar ainda mais a integral de Fresnel – Kirchhoff ao considerar que além da onda incidente ser plana, a incidência seja normal à superfície da tela de difração, isto é, $\theta' = 0$. Com os incrementos das duas últimas equações, a integral para o caso descrito é dada por:

$$\psi(\vec{r}) = -\frac{ikA}{4\pi}\oint \frac{e^{ikR}}{R}[1 + cos\theta]\, dA \tag{50}$$

Integrais semelhantes a 48 e 50 podem, dependendo das condições de contorno do problema, ser extremamente complicadas de se resolver. Para facilitar a resolução das mesmas, considerações importantes devem ser estabelecidas. Nas medidas realizadas tivemos controle sobre a abertura (largura) da fenda, assim como do comprimento de onda (λ) da radiação incidente. A partir desses dois parâmetros, além da distância que separa o plano da fenda do plano em que a imagem é difratada, é possível definir casos especiais nos quais a resolução da integral é facilitada. Dois casos bem conhecidos no estudo da difração serão apresentados: a *difração de Fraunhofer* e a *difração de Fresnel*.

2. Difração de Fraunhofer ($w < \lambda$)

Nesse caso a consideração a ser feita é a de que as dimensões da fenda sejam muito pequenas quando comparadas com a distância que separa o plano da mesma com o plano de difração, onde o padrão de difração é projetado. Vamos adotar o plano da fenda como situado em z=0, cujas posições são dadas pelas coordenadas (u,v) e descritas pelo vetor posição $\overrightarrow{r''}$; por sua vez, o plano de difração está localizado a uma distância z = Z da fenda e, as posições nele são definidas pelas coordenadas (x,y) dadas pelo vetor $\vec{r}$.

Vamos restringir novamente a radiação incidente como sendo uma onda plana, cuja incidência é normal à fenda. Portanto, iremos partir da integral da equação 50. Com as aproximações descritas anteriormente, é de se supor que a maior parte da radiação que chega ao plano de difração está localizada próxima ao eixo z, o que denota $R \approx Z$ e o ângulo θ entre $\widehat{n'}$ e $\vec{R}$ é pequeno. Os vetores posição são expressos por:

$$\overrightarrow{r''} = u\,\hat{\imath} + v\,\hat{\jmath} \tag{51.1}$$

$$\vec{r} = x\,\hat{\imath} + y\,\hat{\jmath} + Z\,\hat{k} \tag{51.2}$$

Pela definição de $\vec{R}$, temos:

$$\vec{R} = \vec{r} - \overrightarrow{r''} = (x-u)\,\hat{\imath} + (y-v)\,\hat{\jmath} + Z\,\hat{k}$$

Cujo módulo é:

$$\left|\vec{R}\right| = \sqrt{(x-u)^2 + (y-v)^2 + Z^2}$$

$$\left|\vec{R}\right| = \sqrt{x^2 + y^2 + Z^2 + u^2 + v^2 - 2xu - 2yv}$$

Sabemos que o quadrado do módulo do vetor $\vec{r}$ é $r^2 = x^2 + y^2 + Z^2$, logo, podemos reescrever a última expressão da seguinte forma:

$$\left|\vec{R}\right| = \sqrt{r^2 + u^2 + v^2 - 2(xu + yv)}$$

$$\left|\vec{R}\right| = r\sqrt{1 + \frac{u^2 + v^2}{r^2} - \frac{2(xu + yv)}{r^2}} \tag{52}$$

O termo $u^2 + v^2$ dentro da raiz corresponde às dimensões da fenda que, segundo nossa hipótese, são pequenas quando comparadas a r^2. Portanto, tanto o segundo como o terceiro termo de 52 são muito pequenos, o que dá margem para expandirmos o radicando em série de Taylor:

$$\left|\vec{R}\right| = r\left[1 + \frac{u^2 + v^2}{r^2} - \frac{2(xu + yv)}{r^2}\right]^{\frac{1}{2}} \approx r\left[1 - \frac{(xu + yv)}{r^2} + \frac{u^2 + v^2}{2r^2}\right] = R$$

$$R = r - \frac{(xu + yv)}{r} + \frac{u^2 + v^2}{2r} \tag{53}$$

Podemos escrever R em termos dos cossenos diretores $\alpha = \frac{x}{r}$ e $\beta = \frac{y}{r}$:

$$R = r - (\alpha u + \beta v) + \frac{u^2 + v^2}{2r} \tag{54}$$

Para que a condição da difração de Fraunhofer seja satisfeita, o terceiro termo da equação anterior deve ser desprezível em relação aos outros dois. Ao aplicar todas as considerações relatadas até o momento, a integral 50 é escrita como segue:

$$\psi(\vec{r}) = -\frac{ikA}{4\pi}\oint \frac{e^{ik[r-(\alpha u+\beta v)]}}{Z}[1 + 1]\, dudv$$

$$\psi(\vec{r}) = -\frac{ikA\, e^{ikr}}{2\pi Z}\oint e^{-ik(\alpha u+\beta v)}\, dudv \tag{55}$$

A integral anterior descreve o caso no qual a fenda é limitada nas direções *u* e *v*. Para facilitar vamos restringir nosso problema para o caso em que uma das direções é extensa e a outra limitada. Essa aproximação nos auxilia imensamente, pois, a integral a ser resolvida torna – se uma integral de linha, mais fácil de ser determinada. Portanto, temos:

$$\psi(\vec{r}) = A'\int e^{-ik\alpha u}\, du \tag{56}$$

Onde $A' = -\frac{ikAe^{ikr}}{2\pi Z}$.

Nesse caso escolhemos *u* como a direção na qual a fenda é limitada. Vamos analisar três casos de especial interesse para nosso estudo: o da difração da luz por uma única fenda, e o da difração devida à fenda dupla, e aquele com múltiplas fendas.

2.1 Difração por única fenda

Uma onda plana incide normalmente da esquerda para a direita numa fenda de largura $2w$ que está separada de uma distância Z do anteparo. Tal situação é representada na figura abaixo:

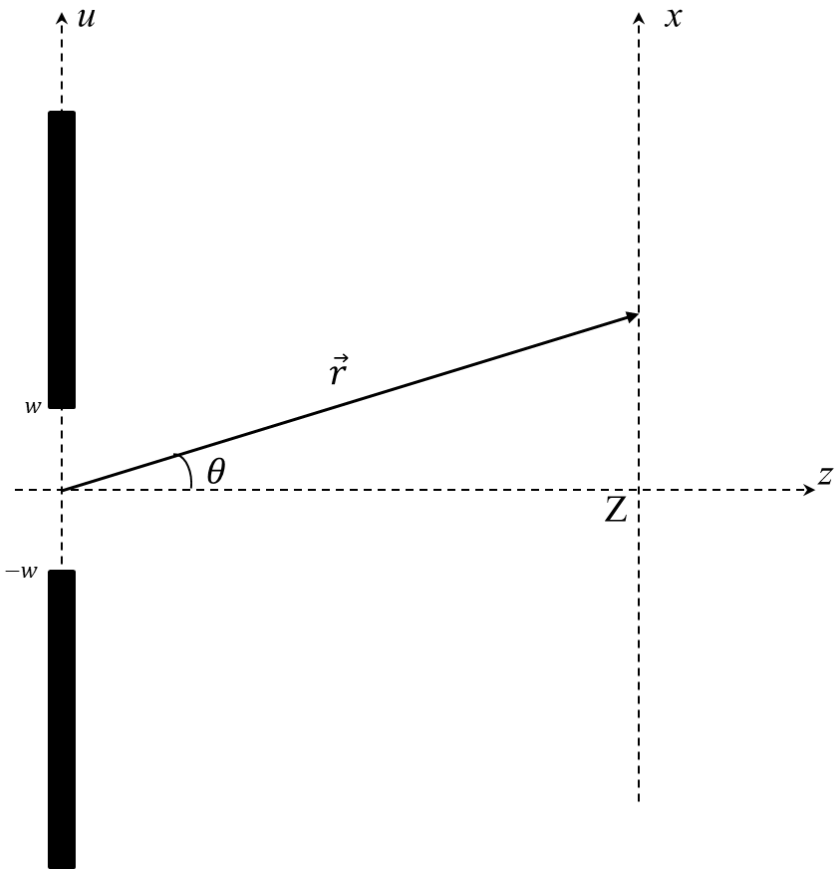


Figura 52 - Difração da luz por fenda única de largura $2w$ distante Z do anteparo

Devemos lembrar que o esquema acima é meramente ilustrativo e está fora de escala, pois, já que descrevemos a difração de Fraunhofer, a abertura da fenda é muito menor do que a distância Z. Além disso, o ângulo θ também é considerado pequeno. A fenda é extensa ao longo da direção perpendicular à folha, porém, limitada na direção do eixo *u*. Com isso podemos aplicar a última integral para conhecermos o padrão da onda difratada no plano *x*-*y*:

$$\psi(\vec{r}) = A' \int_{-w}^{w} e^{-ik\alpha u}\, du$$

$$\psi(\vec{r}) = -\frac{A'}{ik\alpha}\left[e^{-ik\alpha w} - e^{ik\alpha w}\right] = -\frac{A'}{ik\alpha}[-2isen(k\alpha w)]$$

$$\psi(\vec{r}) = \frac{2A'}{k\alpha} sen(k\alpha w) \tag{57}$$

Podemos nos valer do artifício matemático de multiplicarmos e dividirmos essa equação por *w*. Após esse procedimento, temos:

$$\psi(\vec{r}) = \frac{2A'w}{k\alpha w} sen(k\alpha w)$$

Denotando $s = k\alpha w$, a solução do problema para esse caso é finalmente obtida:

$$\psi(\vec{r}) = 2A'w\ \frac{sen(s)}{s} \tag{58}$$

O resultado acima pode ser expresso em termos do ângulo θ e do comprimento de onda da radiação incidente, uma vez que $\alpha = \frac{x}{r} = sen\,\theta$ (observe a figura 52) e $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ é o número de onda do meio à direita da fenda. A princípio $\psi(\vec{r})$ representa a solução da parte espacial do campo elétrico (ou magnético), e corresponde a uma quantidade complexa. Para que tenhamos parâmetros com significado físico relevante, ou seja, mensuráveis, é necessário trabalharmos com grandezas reais, como a intensidade do feixe difratado por exemplo. A intensidade de radiação que chega ao plano de difração é dada pelo quadrado do módulo da equação 58:

$$I(\theta) = 4|A'|^2 w^2\ C\left[\frac{sen(s)}{s}\right]^2 \tag{59}$$

É interessante determinar qual é a intensidade da radiação na direção do eixo z, isto é, no eixo de simetria da fenda ($\theta = 0$) correspondente ao máximo central. Como já relatado, o argumento do seno da expressão 59 é definido por $s = kw\ sen(\theta)$, além disso, iremos aplicar um resultado conhecido do cálculo em que $\lim_{s\to 0} \frac{sen(s)}{s} = 1$. Feitas essas considerações, temos:

$$I_o = I(0) = 4|A'|^2 w^2\ C \tag{60}$$

Onde C é uma constante de proporcionalidade. Portanto, a intensidade da onda difratada para um ângulo de abertura arbitrário é expressa como:

$$I(\theta) = I_o \left[\frac{sen(s)}{s}\right]^2 \tag{61}$$

A partir dessa expressão é possível estabelecer condições onde ocorrerão os máximos e mínimos de intensidade no plano de difração. Por exemplo, os mínimos serão detectados quando:

$$I(\theta) = 0 \leftrightarrow s = kw\ sen(\theta) = n\pi \tag{62}$$

Onde $n \in Z^*$, ou seja, n é um inteiro não nulo. Podemos apresentar esse resultado em termos do comprimento de onda do feixe incidente:

$$\frac{2\pi}{\lambda} w\ sen(\theta) = n\pi$$

$$sen(\theta) = n\frac{\lambda}{2w} \tag{63}$$

Em contrapartida os máximos de intensidade ocorrerão quando:

$$kw\ sen(\theta) = (2n+1)\frac{\pi}{2}$$

$$sen(\theta) = (2n+1)\frac{\lambda}{4w} \tag{64}$$

Nesse caso n pode ser nulo.

2.2 Difração por fenda dupla

É de interesse também conhecermos qual a intensidade da onda difratada devido à fenda dupla, pois diversas estruturas possuem como base esta configuração. Partimos da hipótese de que, intuitivamente, com o aumento do número de fendas teremos o incremento na intensidade de radiação já visto no capítulo anterior. Vamos considerar duas fendas idênticas de largura $2w$, separadas a uma distância $2b$ uma da outra, como pode ser visto na figura 53.

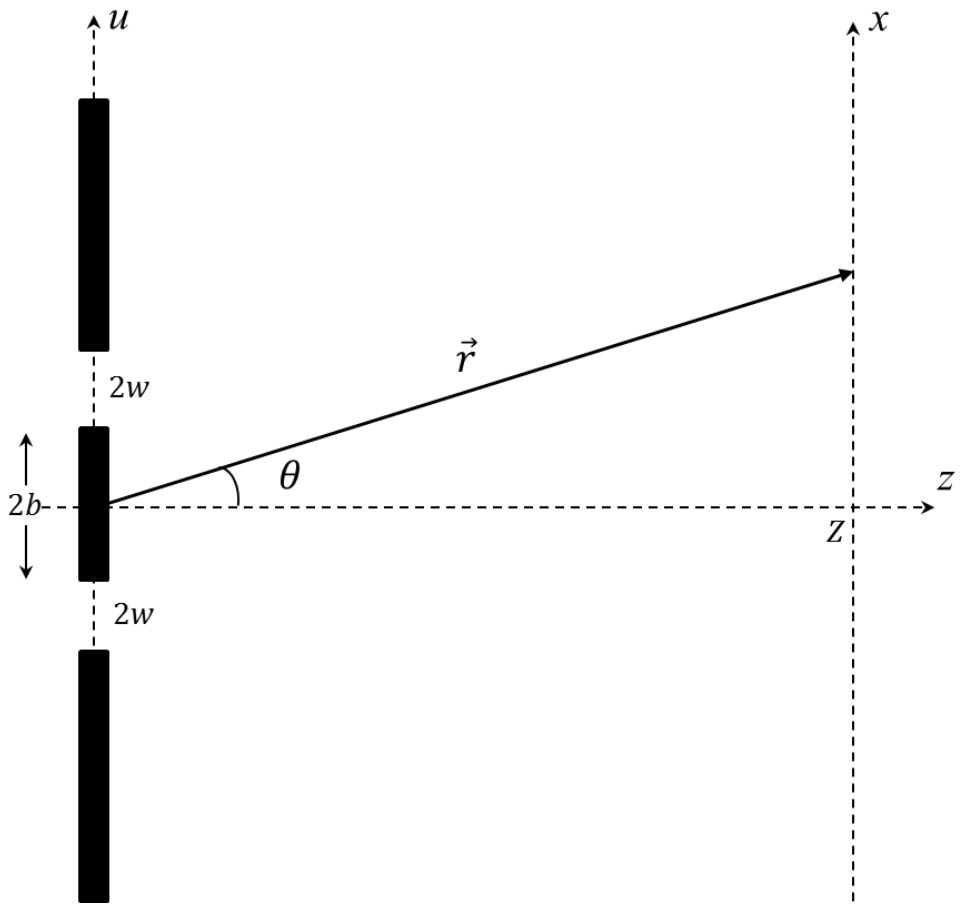


Figura 53 - Difração por fenda dupla. As fendas são idênticas e separadas de uma distância 2b

Assim como no caso de fenda única, elas são fabricadas de maneira a serem extensas numa direção e limitadas em outra. Portanto, a integral presente na equação 56 ainda é válida para determinar a intensidade da luz que passa pelas fendas. Devemos lembrar que a essa integral está definida apenas nas regiões de abertura (onde há passagem de luz obviamente!). Como temos duas fendas, teremos de determinar duas integrais, calculadas nos intervalos mostrados abaixo:

$$\psi(\vec{r}) = A'\left[\int_{-b-2w}^{-b} e^{-ik\alpha u}\,du + \int_{b}^{b+2w} e^{-ik\alpha u}\,du\right]$$

$$= A'\left[-\frac{e^{-ik\alpha u}}{ik\alpha}\Bigg|_{-b-2w}^{-b} - \frac{e^{-ik\alpha u}}{ik\alpha}\Bigg|_{b}^{b+2w}\right]$$

$$= -\frac{A'}{ik\alpha}\left[e^{ik\alpha b}\left(1 - e^{ik\alpha 2w}\right) + e^{-ik\alpha b}\left(e^{-ik\alpha 2w} - 1\right)\right]$$

$$= -\frac{A'}{ik\alpha}\left[e^{ik\alpha b}e^{ik\alpha w}\left(e^{-ik\alpha w} - e^{ik\alpha w}\right) + e^{-ik\alpha b}e^{-ik\alpha w}\left(e^{-ik\alpha w} - e^{ik\alpha w}\right)\right]$$

$$= -\frac{A'}{ik\alpha}\left[e^{ik\alpha(b+w)}(-2isen(k\alpha w)) + e^{-ik\alpha(b+w)}(-2isen(k\alpha w))\right]$$

$$= \frac{2A'}{k\alpha}sen(k\alpha w)\left[e^{ik\alpha(b+w)} + e^{-ik\alpha(b+w)}\right]$$

$$= \frac{4A'}{k\alpha}sen(k\alpha w)\cos[k\alpha(b+w)]$$

$$= 4A'w\frac{sen(k\alpha w)}{k\alpha w}\cos[k\alpha(b+w)]$$

Denominando: $s = k\alpha w = kw\,sen(\theta)$ e $r = k\alpha(b+w) = k(b+w)\,sen(\theta)$, portanto, a amplitude do campo para o caso da difração devido a duas fendas é:

$$\psi(\theta) = 4A'w\frac{sen\,(s)}{s}\cos(r) \tag{65}$$

Como consequência, a intensidade da radiação será expressa por:

$$I(\theta) = |\psi(\theta)|^2 = 16|A'|^2\,w^2\,C\left[\frac{sen(s)}{s}\right]^2[\cos(r)]^2$$

A intensidade do máximo central ocorre para $\theta = 0$, isto é, no caso em que $s \to 0\ e\ r \to 0$:

$$I_o = 16|A'|^2\ w^2\ C \tag{66}$$

Finalmente a intensidade para um ponto arbitrário do plano de difração será:

$$I(\theta) = I_o \left[\frac{sen(s)}{s}\right]^2 [\cos(r)]^2 \tag{67}$$

Ao comparar as intensidades do máximo central, I_o, para os casos de fenda única e dupla, vemos que no caso da fenda dupla I_o é quatro vezes maior (basta verificar as equações 60 e 66). Tal fato é verdadeiro, pois, as ondas que partem de cada uma das fendas estão em fase, logo suas amplitudes se somam, gerando uma onda com o dobro da amplitude da onda incidente, e consequentemente faz com que a intensidade que é o quadrado da amplitude quadruplique.

2.3 Difração devida a N fendas

Vamos estender esse resultado para o caso em que temos N fendas. Temos de ter cautela, pois, caso N seja par, a origem do eixo u recai sobre o obstáculo; se N for ímpar a origem fica localizada no meio da fenda. Entretanto, para ambos os casos o resultado final será o mesmo. Na figura abaixo observamos o caso em que temos quatro fendas.

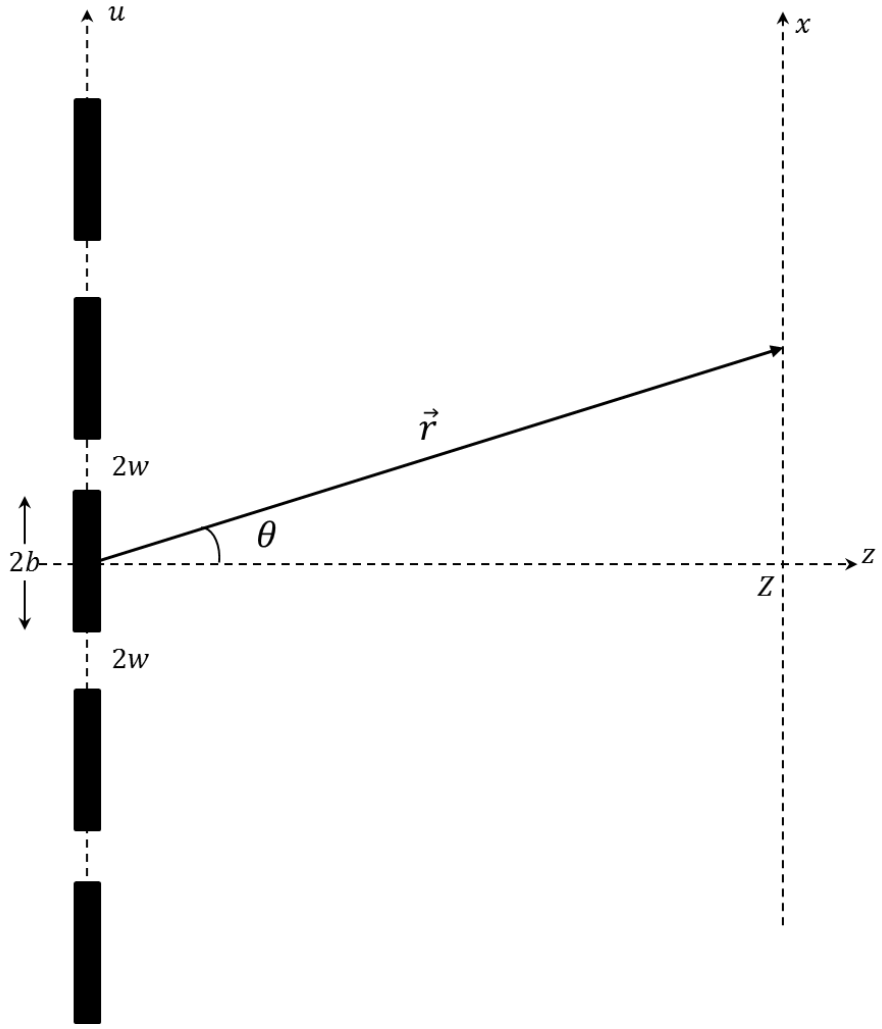


Figura 54 - Difração devida a 4 fendas. Assim com no caso anterior, as fendas são idênticas e separadas de uma distância *2b*. Repare que a origem do eixo *u* recai sobre o obstáculo, pois temos um número par de fendas.

A j-ésima fenda localizada na região em que $u > 0$ situa – se no intervalo:

$$\{b + (2b + 2w)j\ ; b + 2bj + 2w(j + 1)\}\ com\ j = 0{,}1{,}2\ \ldots, \frac{N}{2} - 1 \tag{68.1}$$

Já a l-ésima fenda presente na região com $u < 0$ está no intervalo:

$$\{-[b + 2bl + 2w(l + 1)];\ -[b + (2b + 2w)l]\}\ com\ l = 0{,}1{,}2\ \ldots, \frac{N}{2} - 1 \tag{68.2}$$

Os intervalos descritos acima correspondem aos limites de integração de 56:

$$\psi(\vec{r}) = A' \sum_{j=0}^{\frac{N}{2}-1} \int_{b+(2b+2w)j}^{b+2bj+2w(j+1)} e^{-ik\alpha u}\, du + A' \sum_{l=0}^{\frac{N}{2}-1} \int_{-[b+2bl+2w(l+1)]}^{-[b+(2b+2w)l]} e^{-ik\alpha u}\, du$$

$$= -\frac{A'}{ik\alpha} \sum_{j=0}^{\frac{N}{2}-1} \left\{ \exp\left[-ik\alpha\left(b + 2bj + 2w(j+1)\right)\right] - \exp[-ik\alpha(b + (2b+2w)j)] \right\} -$$

$$-\frac{A'}{ik\alpha} \sum_{l=0}^{\frac{N}{2}-1} \left\{ \exp[ik\alpha(b + (2b+2w)l)] - \exp\left[ik\alpha\left(b + 2bl + 2w(l+1)\right)\right] \right\}$$

$$= -\frac{A'}{ik\alpha} e^{-ik\alpha b} \sum_{j=0}^{\frac{N}{2}-1} \left\{ e^{-ik\alpha 2w} \exp[-ik\alpha(2b+2w)j] - \exp[-ik\alpha(2b+2w)j] \right\} -$$

$$-\frac{A'}{ik\alpha} e^{ik\alpha b} \sum_{l=0}^{\frac{N}{2}-1} \left\{ \exp[ik\alpha(2b+2w)l] - e^{ik\alpha 2w} \exp[ik\alpha(2b+2w)l] \right\}$$

$$= -\frac{A'}{ik\alpha} e^{-ik\alpha b} \sum_{j=0}^{\frac{N}{2}-1} \left\{ \exp[-ik\alpha(2b+2w)j]\, (e^{-ik\alpha 2w} - 1) \right\} -$$

$$-\frac{A'}{ik\alpha} e^{ik\alpha b} \sum_{l=0}^{\frac{N}{2}-1} \left\{ \exp[ik\alpha(2b+2w)l]\, \left(1 - e^{ik\alpha 2w}\right) \right\} =$$

$$\psi(\vec{r}) = \frac{A'}{ik\alpha}\left(1 - e^{-ik\alpha 2w}\right) e^{-ik\alpha b} \sum_{j=0}^{\frac{N}{2}-1} \{\exp[-ik\alpha(2b+2w)j]\} +$$

$$+\frac{A'}{ik\alpha}\left(e^{ik\alpha 2w} - 1\right) e^{ik\alpha b} \sum_{l=0}^{\frac{N}{2}-1} \{\exp[ik\alpha(2b+2w)l]\} \qquad (69)$$

As duas séries da expressão acima correspondem a séries geométricas. Felizmente essas séries convergem. Vejamos quais os valores de suas somas:

$$\sum_{j=0}^{\frac{N}{2}-1} \exp[-ik\alpha(2b+2w)j] = \frac{1-\{\exp[-ik\alpha(2b+2w)]\}^{\frac{N}{2}}}{1-\exp[-ik\alpha(2b+2w)]} = \frac{1-\exp[-ik\alpha N(b+w)]}{1-\exp[-ik\alpha(2b+2w)]}$$

e

$$\sum_{l=0}^{\frac{N}{2}-1} \exp[ik\alpha(2b+2w)l] = \frac{1-\{\exp[ik\alpha(2b+2w)]\}^{\frac{N}{2}}}{1-\exp[ik\alpha(2b+2w)]} = \frac{1-\exp[ik\alpha N(b+w)]}{1-\exp[ik\alpha(2b+2w)]}$$

Admitimos neste caso hipotético que $N \gg 1$. Portanto, o limite superior de cada série é aproximadamente $\frac{N}{2}$. Ao aplicar tais resultados na equação 69:

$$\psi(\vec{r}) = \frac{A'}{ik\alpha}\left(1-e^{-ik\alpha 2w}\right)e^{-ik\alpha b}\frac{1-\exp[-ik\alpha N(b+w)]}{1-\exp[-ik\alpha(2b+2w)]} +$$

$$+\frac{A'}{ik\alpha}\left(e^{ik\alpha 2w}-1\right)e^{ik\alpha b}\frac{1-\exp[ik\alpha N(b+w)]}{1-\exp[ik\alpha(2b+2w)]}$$

Para representar a amplitude dos campos de maneira semelhante aos casos anteriores é conveniente realizar as devidas manipulações algébricas:

$$\psi(\vec{r}) = \frac{2A'}{2ik\alpha}\left(e^{ik\alpha w}-e^{-ik\alpha w}\right)e^{-ik\alpha w}e^{-ik\alpha b}\frac{1-\exp[-ik\alpha N(b+w)]}{1-\exp[-ik\alpha(2b+2w)]} +$$

$$+\frac{2A'}{2ik\alpha}\left(e^{ik\alpha w}-e^{-ik\alpha w}\right)e^{ik\alpha w}e^{ik\alpha b}\frac{1-\exp[ik\alpha N(b+w)]}{1-\exp[ik\alpha(2b+2w)]}$$

$$= \frac{2A'}{k\alpha}sen(k\alpha w)e^{-ik\alpha(b+w)}\frac{1-\exp[-ik\alpha N(b+w)]}{1-\exp[-ik\alpha(2b+2w)]} +$$

$$+\frac{2A'}{k\alpha}sen(k\alpha w)e^{ik\alpha(b+w)}\frac{1-\exp[ik\alpha N(b+w)]}{1-\exp[ik\alpha(2b+2w)]}$$

$$= \frac{2A'}{k\alpha} sen(k\alpha w) \frac{1 - \exp[-ik\alpha N(b+w)]}{e^{ik\alpha(b+w)} - e^{-ik\alpha(b+w)}} + \frac{2A'}{k\alpha} sen(k\alpha w) \frac{1 - \exp[ik\alpha N(b+w)]}{e^{-ik\alpha(b+w)} - e^{ik\alpha(b+w)}}$$

$$= \frac{2A'w}{k\alpha w}\ sen(k\alpha w) \frac{1 - \exp[-ik\alpha N(b+w)]}{2i\ sen[k\alpha(b+w)]} +$$

$$+ \frac{2A'w}{k\alpha w}\ sen(k\alpha w) \frac{1 - \exp[ik\alpha N(b+w)]}{(-2i) sen[k\alpha(b+w)]}$$

$$= A'w \frac{sen(k\alpha w)}{k\alpha w} \frac{1}{isen[k\alpha(b+w)]} \{1 - \exp[-ik\alpha N(b+w)] - 1 + \exp[ik\alpha N(b+w)]\}$$

$$= A'w \frac{sen(k\alpha w)}{k\alpha w} \frac{2isen[k\alpha N(b+w)]}{isen[k\alpha(b+w)]}$$

Novamente vamos denominar: $s = k\alpha w = kw\ sen(\theta)$ e $r = k\alpha(b+w) = k(b+w)sen(\theta)$. Com isso, a amplitude dos campos para o caso em que temos N fendas será:

$$\psi(\theta) = 2NA'w \frac{sen(s)}{s} \frac{sen(Nr)}{Nsen(r)} \tag{70}$$

Finalmente, conseguimos obter a intensidade da onda difratada pelas N fendas:

$$I(\theta) = |\psi(\theta)|^2 = 4|A'|^2 w^2 C\ N^2 \left[\frac{sen(s)}{s}\right]^2 \left[\frac{sen(Nr)}{Nsen(r)}\right]^2$$

Podemos determinar também a intensidade do máximo central:

$$I(0) = I_o = 4|A'|^2 w^2 C\ N^2 \tag{71}$$

Aplicando este resultado na expressão da intensidade total, temos:

$$I(\theta) = I_o \left[\frac{sen(s)}{s}\right]^2 \left[\frac{sen(Nr)}{Nsen(r)}\right]^2 \tag{72}$$

É interessante notar que ao trabalharmos com um número N arbitrário de fendas, o valor da intensidade do máximo central aumenta, em comparação com o caso de uma única fenda, por um fator proporcional ao quadrado de N. Basta comparar as equações 70 e 71 para confirmar tal afirmação.

3. Difração de Fresnel ($w > \lambda$)

Toda a análise da difração feita até aqui levou em conta que as dimensões da fenda eram muito pequenas quando comparadas com o comprimento de onda da radiação incidente (λ) e com a distância que a separava do plano de difração, ou seja, o plano onde é observado o padrão de difração. Porém, há situações em que tal condição não é válida, pois o tamanho da fenda não é tão pequeno em comparação a λ ou o plano de difração está próximo à fenda.

Quando abordamos a difração de Fraunhofer, desprezamos o termo quadrático da equação 54, já que naquela ocasião admitimos que as dimensões da fenda fossem muito pequenas quando comparadas com a distância até o plano de difração. No regime de Fresnel, tal hipótese não é mais válida. A fim de simplificar nosso estudo, consideraremos novamente o caso no qual a fenda é extensa em uma de suas direções, (digamos *v*), e limitada em outra (direção *u*). Vamos definir $\vec{r}$ novamente como o vetor posição do ponto de observação localizado no plano de difração, e $\overrightarrow{r''}$ o vetor posição contido no plano da fenda, de onde é proveniente a fonte de radiação. Vamos supor também que a fenda está separada do plano de difração por uma distância Z. Com isso, definimos:

$$\vec{r} = x\hat{\imath} + Z\hat{k} \text{ e } \overrightarrow{r''} = u\hat{\imath}$$

$$\vec{R} = \vec{r} - \overrightarrow{r''} = (x-u)\hat{\imath} + Z\hat{k}$$

Cujo módulo é dado por:

$$R = \sqrt{(x-u)^2 + Z^2} = Z\left[1 + \frac{(x-u)^2}{Z^2}\right]^{\frac{1}{2}} \tag{73}$$

O segundo termo entre os colchetes é muito menor do que 1, já que o termo $Z \gg (x-u)^2$. Por isso mesmo, podemos expandir até primeira ordem a expressão entre colchetes:

$$R \approx Z\left[1+\frac{(x-u)^2}{2Z^2}\right] = Z+\frac{(x-u)^2}{2Z} \tag{74}$$

Feito isso, a amplitude dos campos, no caso de incidência normal de uma onda plana sobre a fenda, como já visto na seção anterior será:

$$\psi(\vec{r}) = A\int_{w_1}^{w_2} \exp\left[ik\frac{(x-u)^2}{2Z}\right] du \tag{75}$$

Nesse contexto, A é uma constante complexa e os limites de integração se referem às extremidades da fenda como está explicitado no diagrama da figura 55.

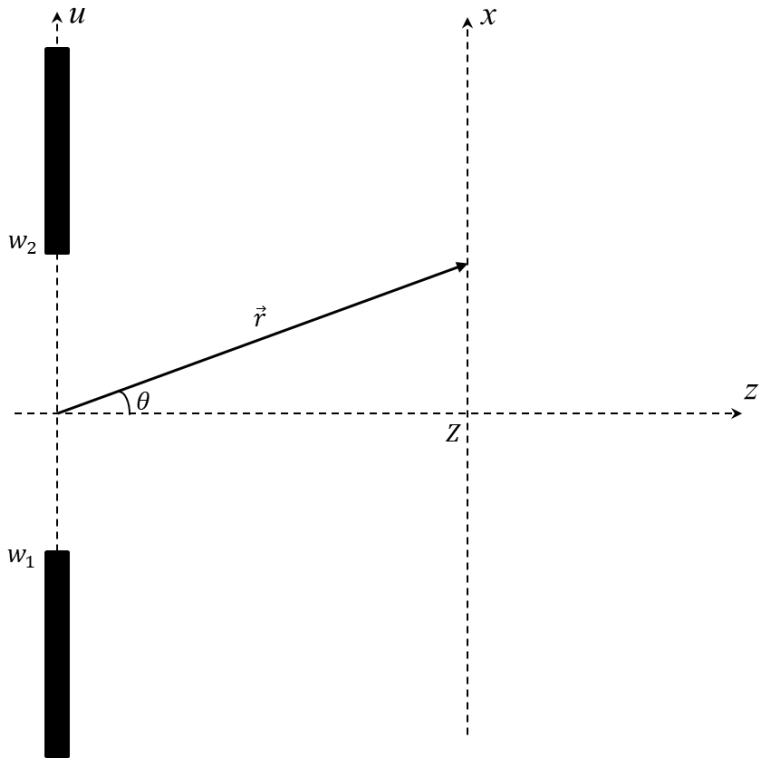


Figura 55 - Esquema da fenda no caso da difração de Fresnel. Perceba que o tamanho da fenda é maior comparado com o caso anterior, no regime da difração de Fraunhofer. Além disso, a distância entre a fenda e o plano de difração foi reduzida.

Poderíamos desenvolver ainda mais o termo quadrático do integrando da equação 75, porém, ao invés disso faremos uma mudança de variável que se revelará útil no futuro, pois obteremos resultados já conhecidos. Com isso, temos:

$$\varphi = \sqrt{\frac{k}{\pi Z}}(u - x) \tag{76.1}$$

Elevando ao quadrado:

$$\varphi^2 = \frac{k}{\pi Z}(u - x)^2 = \frac{k}{\pi Z}(x - u)^2 \tag{76.2}$$

A partir da equação (76.1), podemos definir u em termos da nova variável φ:

$$u = \varphi\sqrt{\frac{\pi Z}{k}} + x \tag{76.3}$$

$$du = \sqrt{\frac{\pi Z}{k}}\, d\varphi \tag{76.4}$$

Reescrevemos também os limites de integração:

$$u_1 = w_1 \rightarrow \varphi_1 = \sqrt{\frac{k}{\pi Z}}(w_1 - x) \tag{76.5}$$

$$u_2 = w_2 \rightarrow \varphi_2 = \sqrt{\frac{k}{\pi Z}}(w_2 - x) \tag{76.6}$$

Com todas estas considerações, a integral presente na equação 75 é dada em termos da nova variável como:

$$\psi(\vec{r}) = A\int_{\varphi_1}^{\varphi_2} e^{i\frac{\pi}{2}\varphi^2}\sqrt{\frac{\pi Z}{k}}\, d\varphi = A\sqrt{\frac{\pi Z}{k}}\int_{\varphi_1}^{\varphi_2} e^{i\frac{\pi}{2}\varphi^2}\, d\varphi$$

$$\psi(\vec{r}) = A\sqrt{\frac{\pi Z}{k}}\left[\int_{\varphi_1}^{\varphi_2} \cos\left(\frac{\pi}{2}\varphi^2\right)\, d\varphi + i\int_{\varphi_1}^{\varphi_2} sen\left(\frac{\pi}{2}\varphi^2\right)\, d\varphi\right] \tag{77}$$

As duas integrais dentro dos colchetes correspondem a certa classe de funções denominadas *integrais de Fresnel*. Elas são determinadas apenas numericamente, porém, podemos aplicar propriedades importantes dessas funções que facilitarão nossa abordagem. Antes disso, reescrevemos essas integrais de maneira mais compacta.

$$C(\phi) = \int_0^{\phi} \cos\left(\frac{\pi}{2}\varphi^2\right)\, d\varphi \tag{78.1}$$

$$S(\phi) = \int_0^{\phi} sen\left(\frac{\pi}{2}\varphi^2\right)\, d\varphi \tag{78.2}$$

A seguir, apresentamos as propriedades das integrais de Fresnel. A primeira delas é que elas são funções ímpares, ou seja:

$$C(-\phi) = \int_0^{-\phi} \cos\left(\frac{\pi}{2}\varphi^2\right)\, d\varphi$$

Se definirmos $\varphi' = -\varphi$, então:

$$C(-\phi) = \int_0^{\phi'} \cos\left(\frac{\pi}{2}\varphi'^2\right)\, d(-\varphi') = -\int_0^{\phi'} \cos\left(\frac{\pi}{2}\varphi'^2\right)\, d\varphi'$$

$$C(-\phi) = -C(\phi) \tag{79.1}$$

Analogamente para a integral de Fresnel do seno:

$$S(-\phi) = -S(\phi) \tag{79.2}$$

Outra propriedade a considerar é quando o argumento $\phi \to \infty$. Vejamos:

$$\lim_{\phi\to\infty} C(\phi) = \frac{1}{2} = \lim_{\phi\to\infty} S(\phi)$$

$$\lim_{\phi\to-\infty} C(\phi) = -\frac{1}{2} = \lim_{\phi\to-\infty} S(\phi)$$

Devemos lembrar que nosso interesse reside em determinar a intensidade da radiação difratada, ou seja:

$$|\psi(\vec{r})|^2 = A^2\frac{\pi Z}{k}\left\{\left[\int_{\varphi_1}^{\varphi_2}\cos\left(\frac{\pi}{2}\varphi^2\right)\,d\varphi\right]^2 + \left[\int_{\varphi_1}^{\varphi_2} sen\left(\frac{\pi}{2}\varphi^2\right)\,d\varphi\right]^2\right\}$$

$$= A^2\frac{\pi Z}{k}\left\{\left[\int_{0}^{\varphi_2}\cos\left(\frac{\pi}{2}\varphi^2\right)\,d\varphi + \int_{\varphi_1}^{0}\cos\left(\frac{\pi}{2}\varphi^2\right)\,d\varphi\right]^2\right.$$

$$\left. + \left[\int_{0}^{\varphi_2} sen\left(\frac{\pi}{2}\varphi^2\right)\,d\varphi + \int_{\varphi_1}^{0} sen\left(\frac{\pi}{2}\varphi^2\right)\,d\varphi\right]^2\right\}$$

$$I = |\psi(\vec{r})|^2 = B\{[C(\varphi_2) - C(\varphi_1)]^2 + [S(\varphi_2) - S(\varphi_1)]^2\} \tag{80}$$

Onde $B = A^2\frac{\pi Z}{k}$.

Devemos recordar que consideramos uma fenda extremamente grande o que equivale a dizer que $w_1 \to -\infty$ e $w_2 \to \infty$. Como estes dois parâmetros são proporcionais aos argumentos das integrais φ_1 e φ_2 quando realizamos a mudança de variável, logo $\varphi_1 \to -\infty$ e $\varphi_2 \to \infty$. Com essas considerações, aplicamos os limites de $C(\varphi)$ e $S(\varphi)$ já citados:

$$I = |\psi(\vec{r})|^2 = B\left\{\left[\lim_{\varphi_2\to\infty} C(\varphi_2) - \lim_{\varphi_1\to-\infty} C(\varphi_1)\right]^2 + \left[\lim_{\varphi_2\to\infty} S(\varphi_2) - \lim_{\varphi_1\to-\infty} S(\varphi_1)\right]^2\right\}$$

$$I = B\left\{\left[\frac{1}{2} - \left(-\frac{1}{2}\right)\right]^2 + \left[\frac{1}{2} - \left(-\frac{1}{2}\right)\right]^2\right\} \to I = 2B$$

Ao normalizar a intensidade, temos:

$$I = \frac{I_o}{2}\{[C(\varphi_2) - C(\varphi_1)]^2 + [S(\varphi_2) - S(\varphi_1)]^2\} \tag{81}$$

Vamos introduzir uma nova variável:

$$\Delta\varphi = \varphi_2 - \varphi_1 = \sqrt{\frac{k}{\pi Z}}(w_2 - x) - \sqrt{\frac{k}{\pi Z}}(w_1 - x)$$

$$\Delta\varphi = \sqrt{\frac{k}{\pi Z}}\underbrace{(w_2 - w_1)}_{w}$$

$$\Delta\varphi = \sqrt{\frac{k}{\pi Z}}w\,, \tag{82}$$

Onde w corresponde à largura da fenda. A definição desta nova variável será conveniente quando abordarmos o caso de uma fenda simétrica em relação ao eixo z, isto é, $|w_1| = |w_2|$. Podemos obter o valor médio de φ_1e φ_2:

$$\bar{\varphi} = \frac{\varphi_1 + \varphi_2}{2} = \frac{1}{2}\left[\sqrt{\frac{k}{\pi Z}}(w_1 - x) + \sqrt{\frac{k}{\pi Z}}(w_2 - x)\right]$$

$$\bar{\varphi} = -\sqrt{\frac{k}{\pi Z}}\,x$$

Podemos reescrever esse resultado em termos de $\Delta\varphi$, ao utilizar a informação contida na equação 82:

$$\bar{\varphi} = -\frac{\Delta\varphi}{w}x \tag{83}$$

A partir das definições do valor médio e de $\Delta\varphi$, escrevemos φ_1 e φ_2 como:

$$\varphi_1 = \bar{\varphi} - \frac{\Delta\varphi}{2} = -\frac{\Delta\varphi}{w}x - \frac{\Delta\varphi}{2} =$$

$$\varphi_1 = -\Delta\varphi\left(\frac{x}{w} + \frac{1}{2}\right) \tag{84.1}$$

$$\varphi_2 = \bar{\varphi} + \frac{\Delta\varphi}{2} = -\frac{\Delta\varphi}{w}x + \frac{\Delta\varphi}{2} =$$

$$\varphi_2 = -\Delta\varphi\left(\frac{x}{w} - \frac{1}{2}\right) \tag{84.2}$$

Com essas expressões podemos determinar os valores de φ_1 e φ_2 para um ponto arbitrário x do plano de difração. Repare que todos os parâmetros necessários para a determinação da intensidade de radiação dependem da largura da fenda. Esta informação é útil para a fabricação dessas nanoestruturas, assim como a sua influência na transmissão óptica. É conveniente saber qual o valor da intensidade no ponto $x = 0$, já que no fenômeno da difração, a maior concentração de luz está localizada no máximo central. Pelas duas últimas expressões, temos:

$$\varphi_1 = -\frac{\Delta\varphi}{2} \text{ e } \varphi_2 = \frac{\Delta\varphi}{2}$$

Tais resultados, quando aplicados à expressão da intensidade, nos fornecem o seguinte caso:

$$I = \frac{I_o}{2}\left\{\left[C\left(\frac{\Delta\varphi}{2}\right) - C\left(-\frac{\Delta\varphi}{2}\right)\right]^2 + \left[S\left(\frac{\Delta\varphi}{2}\right) - S\left(-\frac{\Delta\varphi}{2}\right)\right]^2\right\}$$

Recordando que as integrais de Fresnel são funções ímpares, então:

$$I = \frac{I_o}{2}\left\{\left[C\left(\frac{\Delta\varphi}{2}\right) + C\left(\frac{\Delta\varphi}{2}\right)\right]^2 + \left[S\left(\frac{\Delta\varphi}{2}\right) + S\left(\frac{\Delta\varphi}{2}\right)\right]^2\right\}$$

$$I = 2I_o\left\{\left[C\left(\frac{\Delta\varphi}{2}\right)\right]^2 + \left[S\left(\frac{\Delta\varphi}{2}\right)\right]^2\right\} \tag{85}$$

Quando identificamos os efeitos da difração no regime de Fresnel, vemos que uma das hipóteses de Kirchhoff para o cálculo da integral é desafiada, pois temos a contribuição de feixes de luz difratados provenientes das extremidades da fenda, isto é, para $x = w_1$ e $x = w_2$. Consideramos novamente que o eixo z corresponde ao eixo de simetria da fenda, ou seja, $|w_1| = \frac{w}{2} = |w_2|$. Portanto, os valores de φ_1 e φ_2 para $x = w_1$ serão:

$$\varphi_1 = -\Delta\varphi\left(\frac{w_1}{w} + \frac{1}{2}\right) = -\Delta\varphi\left(-\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\right) \rightarrow \varphi_1 = 0$$

$$\varphi_2 = -\Delta\varphi\left(\frac{w_1}{w} - \frac{1}{2}\right) = -\Delta\varphi\left(-\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\right) \rightarrow \varphi_2 = \Delta\varphi$$

Ao aplicar esses resultados a intensidade da radiação difratada dada por (81) é:

$$I = \frac{I_o}{2}\{[C(\Delta\varphi) - C(0)]^2 + [S(\Delta\varphi) - S(0)]^2\}$$

$$I = \frac{I_o}{2}\{[C(\Delta\varphi)]^2 + [S(\Delta\varphi)]^2\} \tag{86}$$

O mesmo resultado será obtido caso fizermos o cálculo para $x = w_2$.

APÊNDICE C. Obtenção da permissividade elétrica a partir do modelo de Lorentz

Na tentativa de compreender a resposta de um meio material frente à aplicação de um campo eletromagnético externo, Lorentz desenvolveu um modelo no qual os elétrons que constituem o meio se comportavam como oscilador harmônico amortecido e forçado. A natureza harmônica do deslocamento dos elétrons advinha da atuação de uma força restauradora, semelhante àquela responsável pelo movimento de um corpo preso a mola, associada à força de ligação entre os elétrons e os íons, proporcional à constante k. Além disso, ele considerou a existência de uma força de amortecimento relacionada com as colisões sofridas entre os elétrons, dependente da velocidade dos mesmos. Por fim, Lorentz considerou a força originada pelo campo externo, que era proporcional à carga elementar dos elétrons, de amplitude E_o e oscilava harmonicamente no tempo com uma frequência ω. Com isso, a equação de movimento do enésimo elétron de massa m e carga e é expressa como:

$$\frac{d^2x_n}{dt^2} + \gamma_n \frac{dx_n}{dt} + \omega_o^2 x_n = -\frac{e}{m}E \tag{87}$$

Onde as constantes γ_n e $\omega_o^2 = \frac{k}{m}$ são, respectivamente, a taxa de colisão entre os elétrons (com dimensão de frequência) e a frequência de oscilação natural dos elétrons no meio. Campo externo pode ser representado por $e^{-i\omega t}$. Logo, reescrevemos a equação do movimento anterior em termos de uma coordenada complexa z_n, de maneira a obtermos:

$$\frac{d^2z_n}{dt^2} + \gamma_n \frac{dz_n}{dt} + \omega_{o_n}^2 z_n = -\frac{e}{m}E_o e^{-i\omega t} \tag{88}$$

A equação acima é diferencial de segunda ordem não homogênea, cuja solução é definida pela soma da solução geral da homogênea correspondente com uma solução particular da não homogênea. Ao procedermos dessa forma, obteremos z_n que dependerá do tempo de duas partes distintas: uma transiente e outra estacionária. Quando considerarmos intervalos de tempo suficientemente longos, a solução estacionária prevalecerá enquanto a primeira decairá, pois ela é proporcional a uma exponencial real. Portanto, para todos os efeitos, a solução geral da equação de movimento pode ser aproximada como sendo a estacionária, expressa por:

$$z_n(t) = z_{o_n} e^{-i\omega t} \tag{89}$$

Consequentemente, ao derivar esta solução e substituí-la na equação de movimento, conseguimos obter a amplitude z_{o_n}.

$$-\omega^2 z_{o_n} e^{-i\omega t} - i\omega\gamma_n z_{o_n} e^{-i\omega t} + \omega_{o_n}^2 z_{o_n} e^{-i\omega t} = -\frac{e}{m} E_o e^{-i\omega t}$$

$$\left(\omega_{o_n}^2 - \omega^2 - i\omega\gamma_n\right) z_{o_n} = -\frac{e}{m} E_o$$

$$z_{o_n} = -\frac{e}{m} \frac{1}{\left(\omega_{o_n}^2 - \omega^2 - i\omega\gamma_n\right)} E_o$$

Substituindo na solução geral:

$$z_n(t) = -\frac{e}{m} \frac{1}{\left(\omega_{o_n}^2 - \omega^2 - i\omega\gamma_n\right)} E_o e^{-i\omega t}$$

Ao expressar a última equação em termos vetoriais, temos:

$$\vec{z}_n(t) = -\frac{e}{m} \frac{1}{\left(\omega_{o_n}^2 - \omega^2 - i\omega\gamma_n\right)} \vec{E}(t) \tag{90}$$

Tal resultado nos informa que quando aplicamos um campo elétrico no material, os elétrons se deslocam no sentido oposto ao campo. Temos um momento de dipolo $\vec{p}_n$ associado a esse deslocamento:

$$\vec{p}_n(t) = -e\vec{z}_n(t) = \frac{e^2}{m} \frac{1}{\left(\omega_{o_n}^2 - \omega^2 - i\omega\gamma_n\right)} \vec{E}(t) \tag{91}$$

Considerando que o meio contenha N elétrons por unidade de volume e que uma fração f_n dos elétrons apresente frequência ω_{o_n}, conseguimos, a partir dessas considerações, definir a polarização do meio:

$$\vec{P} = \sum_n N f_n \vec{p}_n(t) = \sum_n N f_n \frac{e^2}{m} \frac{1}{\left(\omega_{o_n}^2 - \omega^2 - i\omega\gamma_n\right)} \vec{E}(t)$$

$$\vec{P} = \left[\frac{Ne^2}{m}\sum_n \frac{f_n}{\left(\omega_{o_n}^2 - \omega^2 - i\omega\gamma_n\right)}\right]\vec{E} \tag{92}$$

O termo entre colchetes é denominado susceptibilidade elétrica (χ). E é a partir de χ que conseguimos obter a permissividade do material. Para isso, basta nos lembrarmos de definições importantes provenientes do eletromagnetismo, tais como aquelas que envolvem χ com a constante dielétrica K:

$$\chi = \varepsilon - \varepsilon_o \tag{93.1}$$

$$K = \frac{\varepsilon}{\varepsilon_o} \Longrightarrow 1 + \frac{\chi}{\varepsilon_o} \tag{93.2}$$

Com essas definições, encontramos a expressão para a permissividade relativa:

$$\varepsilon_r = \frac{\varepsilon}{\varepsilon_o} = 1 + \frac{Ne^2}{\varepsilon_o m}\sum_n \frac{f_n}{\left(\omega_{o_n}^2 - \omega^2 - i\omega\gamma_n\right)} \tag{94}$$

APÊNDICE D. Simulações no software COMSOL Multiphysics

A modelagem computacional utilizada no desenvolvimento deste trabalho foi baseada na versão *4.2 a* do software COMSOL Multiphysics®. Essa ferramenta, composta por mais de dez módulos de trabalho, utiliza o método de elementos finitos na resolução de problemas em física. Apresentaremos na sequência uma breve descrição do método.

O método de elementos finitos (MEF) é um recurso numérico para resolver problemas de valor de contorno de um meio que a princípio é contínuo. Em Física e/ou Engenharia, é comum nos depararmos com esse tipo de situação. No caso das estruturas estudadas, as condições de contorno são estabelecidas a partir da resolução das equações de Maxwell. Nesse método dividimos a estrutura em pequenas áreas (os elementos finitos) determinadas por nós; a forma das regiões depende da dimensão do problema. Basicamente, em casos bidimensionais elas são triangulares, enquanto para tridimensionais elas costumam ser tetragonais. O conjunto de nós e elementos finitos constituem a denominada malha (ou mesh) que é esquematizada na figura 56

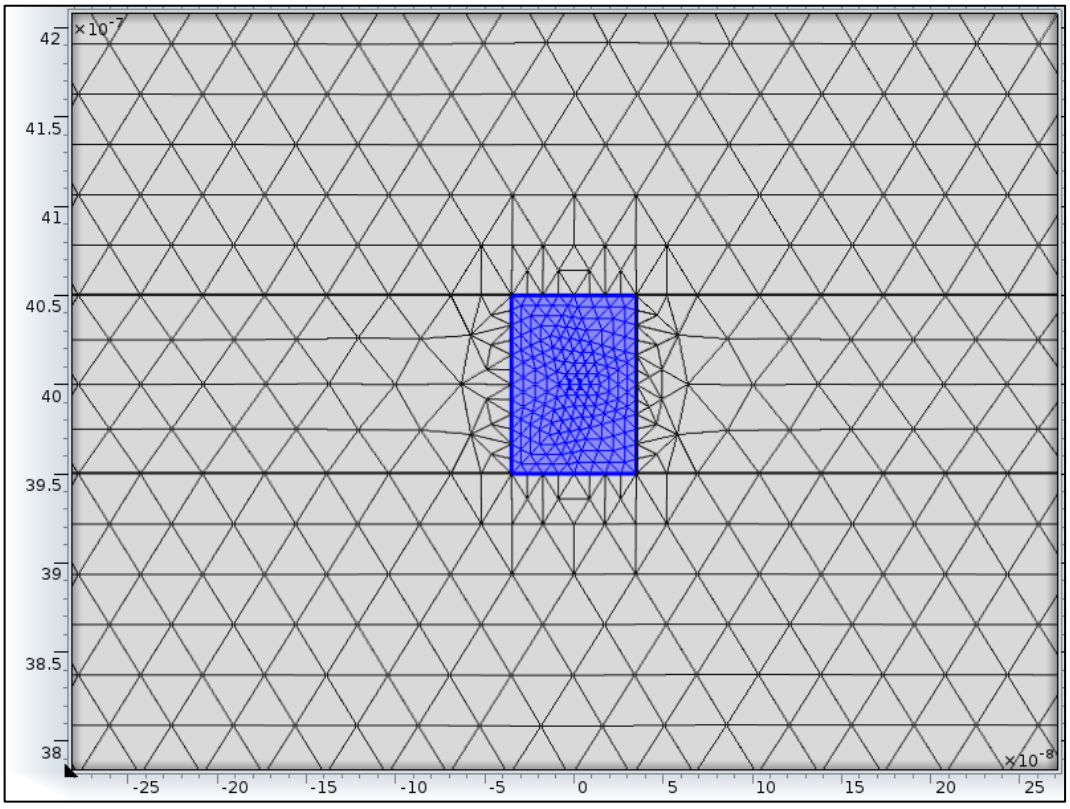


Figura 56 - Representação da malha: os elementos finitos são formados pelas regiões triangulares, enquanto os nós constituem seus vértices. Refinamos a malha para o interior da fenda (região em azul).

Conforme aumentamos o número de elementos e nós presentes na malha, ou em outras palavras, diminuímos o tamanho dos elementos finitos, obtemos soluções com mais precisão. Esta ideia é muito similar ao cálculo diferencial e integral, com a diferença de que por menor que sejam os elementos, eles ainda são discretos. Em nossas simulações, utilizamos o comprimento de onda da radiação incidente como parâmetro para definir a dimensão dos elementos (eles foram definidos como submúltiplos de λ), uma vez que as propriedades ópticas dos materiais dependem de λ. Verificamos a relação entre o tamanho dos elementos com a precisão da solução ao observar o gráfico da figura 57.

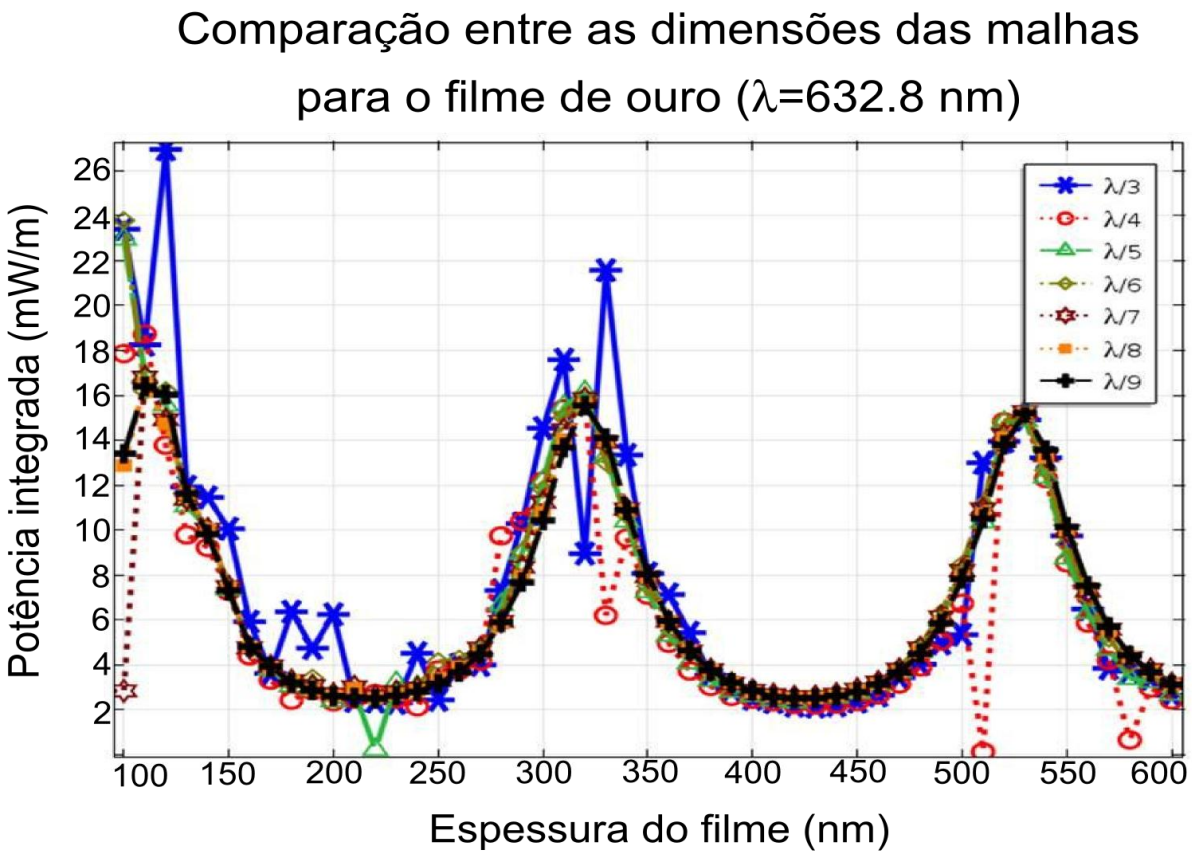


Figura 57 - Plotes das transmissões ópticas para a fenda em filme de ouro para diferentes dimensões de malha. De acordo com a legenda, percebemos que conforme diminuímos o tamanho dos elementos que constituem a malha, obtemos resultados mais precisos. A largura da fenda nesse exemplo vale 50 nm.

Percebemos que o controle do tamanho dos elementos finitos é um fator crucial para obtermos soluções mais precisas. É evidente pela análise do gráfico anterior, que a malha constituída por elementos com dimensões da ordem de $\frac{\lambda}{9}$ responde com resultados bem mais precisos do que aquela de tamanho $\frac{\lambda}{3}$. Durante nossas simulações, adotamos valores extremamente pequenos para a malha, da ordem de 30 nm; quando aplicamos um

comprimento de onda de 488 nm, fizemos com que os elementos fossem proporcionais a $\frac{\lambda}{14}$, enquanto para 632.8 nm eles eram de $\frac{\lambda}{18}$. Certamente o único inconveniente na escolha de tais fatores é de que o tempo de processamento se torna demasiado longo, a depender da configuração disponível no computador. Uma vez que conhecemos o método, iremos abordar o software COMSOL e seus recursos utilizados no decorrer do nosso trabalho.

Como mencionado no início do capítulo, o COMSOL Multiphysics® contém mais de dez módulos, nos quais é possível simular e resolver os mais diversos problemas em Física e/ou Engenharia. Durante o nosso trabalho, utilizamos o pacote denominado RF (Radio Frequency), ideal para modelar guias de onda, cavidades ópticas, ressonadores e antenas nos regimes de microondas, infravermelho e visível do espectro eletromagnético. Os campos envolvidos nas simulações, assim como as equações de Maxwell já integram o pacote, isto é, são pré-definidos. O que determina a especificidade da estrutura é sua geometria, as características ópticas dos materiais como a permissividade e as condições de contorno que impomos durante a modelagem. Nesta versão do programa, tais propriedades são definidas na seção *Model* da janela *Model Builder*. As outras janelas presentes no software são:

a) *Settings*: É possível ao usuário modificar os parâmetros da programação, de acordo com qual ícone estiver selecionado na janela *Model Builder*. Por exemplo, caso selecionarmos o ícone referente à geometria da estrutura, podemos alterar suas dimensões.

b) *Graphics*: Corresponde a área de visualização da estrutura. Qualquer alteração feita na janela anterior é mostrada nesta seção.

c) *Messages*: Nesta janela há informações a respeito da malha e do tempo de processamento. Nela também é possível criar tabelas e plotar os gráficos.

A alta capacidade de processamento, incompatível com as configurações computacionais de que dispúnhamos, foi o principal fator que inviabilizou a realização de simulações de estruturas tridimensionais. Comparações feitas com simulações realizadas em 3D com o software LUMERICAL mostraram que as simulações em 2D apresentam resultados bem similares a 3D. Escolhemos simular a transmissão óptica da fenda para o caso bidimensional dada sua praticidade frente aos resultados desejados; definimos a estrutura a partir do plano transversal ao eixo da fenda (correspondente ao plano *xy*). A figura a seguir ilustra o que mencionamos a pouco.

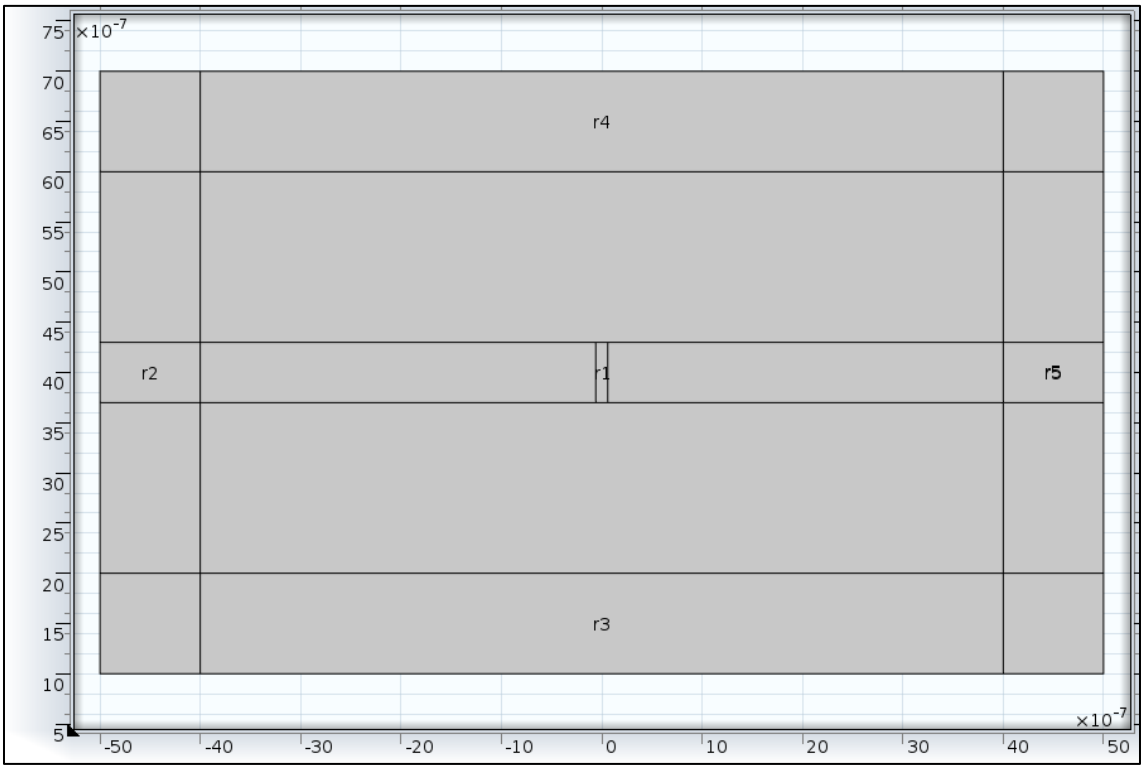


Figura 58 - Seção transversal da fenda (representada pelo retângulo r1). No exemplo acima, a espessura do filme vale 600 nm e a largura da fenda é de 270 nm

A área delimitada pelos retângulos r2, r3, r4 e r5 constitui nossa janela computacional. Ela apresenta largura de 8 μm e altura de 4 μm; nela é representada a estrutura física na qual desejamos modelar, onde atribuímos as propriedades ópticas dos materiais e as condições de contorno ao longo de suas arestas. Quando simulamos a fenda para o caso bidimensional, consideramos que a dimensão paralela ao eixo da fenda possui extensão infinita (correspondente ao eixo perpendicular ao plano da folha na figura 58).

Ao simular a propagação de ondas eletromagnéticas, um dos principais problemas que temos de lidar é quando as mesmas incidem na fronteira da janela computacional gerando reflexões sem nenhum sentido físico que são incorporadas ao modelo, resultando em possíveis soluções errôneas. Para contornar esse desafio, aplicamos o recurso das camadas perfeitamente casadas, ou mais conhecidas como “perfectly matched layer” (PML). Esse recurso foi desenvolvido por Berenger (54) originalmente em modelagens que empregavam o método de diferenças finitas, ou “finite difference time domain” (FDTD), mas também demonstrou ser bastante útil no método de elementos finitos, no qual o COMSOL está inserido. No domínio da PML a onda é amortecida, de maneira a não refletir para o meio de onde ela se originou, reproduzindo assim o que ocorre na situação real. Os retângulos

numerados de 2 a 5 da figura anterior correspondem ao domínio da PML. Para todos os efeitos é como se a onda fosse transparente, por exemplo, ao adentrar no domínio do retângulo r3. No COMSOL podemos ajustar esse domínio de acordo com o tipo da onda eletromagnética que aplicamos sobre a estrutura, com as opções de onda esférica, cilíndrica ou cartesiana (plana). Para os propósitos de nosso trabalho, o último caso foi suficiente para implementar a PML, uma vez que a fonte de luz estava distante o suficiente da fenda para considerar a onda incidente como plana. Como exemplo, vamos supor uma frente de onda plana que se propaga com velocidade v e incida da esquerda para direita antes de atingir o domínio da PML, como mostrado na figura abaixo:

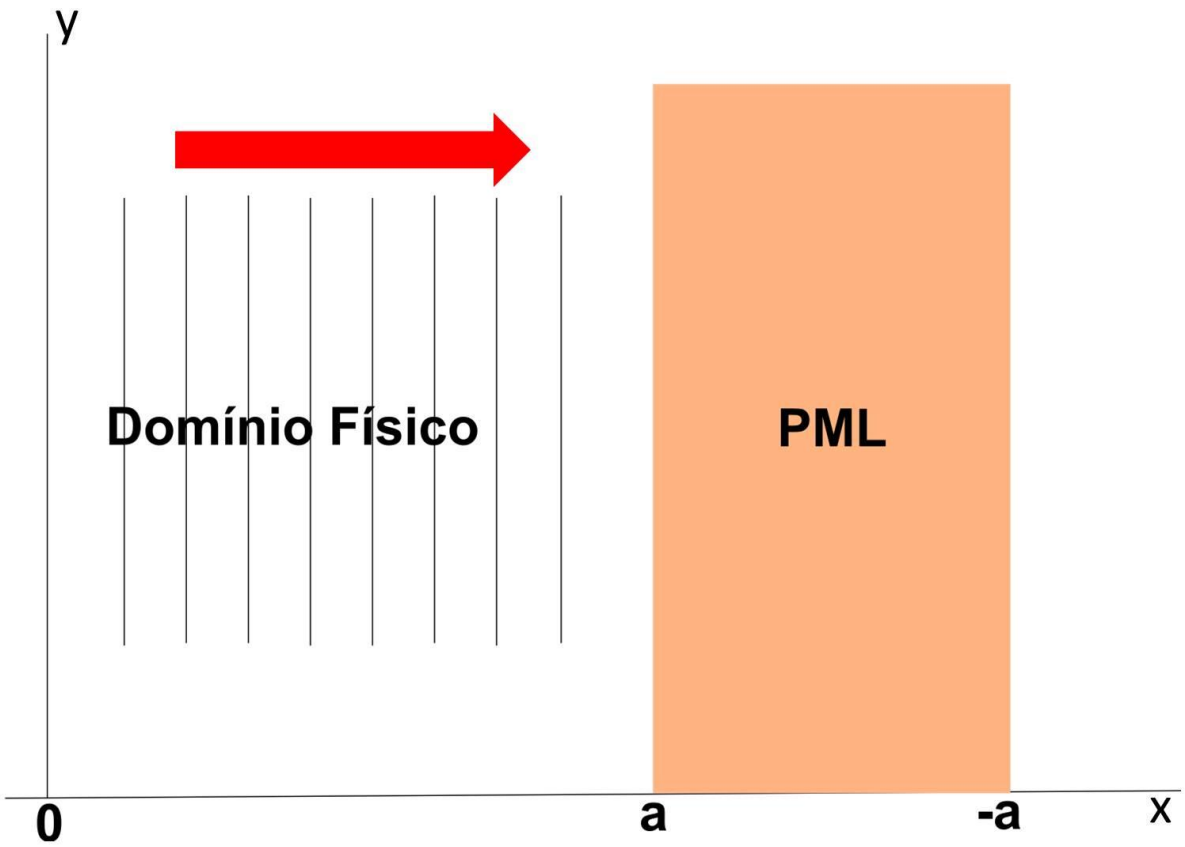


Figura 59 – Representação esquemática da incidência de uma onda plana sobre a região da PML

Denotando por ψ a amplitude da onda no domínio físico na qual desejamos simular, e ϕ a amplitude da mesma no intervalo definido pela PML, as equações que definem a propagação da onda plana nas duas regiões são:

$$\nabla^2\psi + k^2\psi = 0 \tag{95}$$

$$\frac{1}{\gamma(x)}\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{1}{\gamma(x)}\frac{\partial\phi}{\partial x}\right) + \frac{\partial^2\phi}{\partial y^2} + k^2\phi = 0 \tag{96}$$

Onde:

$$\gamma(x) = \begin{cases} 1, & 0 < x < a \\ 1 + \dfrac{i}{\omega}\eta(x), & a \leq x < -a \end{cases} \tag{97}$$

O que efetivamente determina o quão "absorvente" a PML possa ser reside na escolha do coeficiente de absorção $\eta(x)$. A depender das propriedades ópticas dos materiais com que se deseja modelar, esse coeficiente pode ser desde uma função constante, a um determinado polinômio. Em nossas simulações utilizamos o coeficiente de absorção padrão correspondente a cada meio (ar, ouro/prata e vidro BK7) presente no pacote de rádio frequência do COMSOL. Uma discussão mais aprofundada a respeito da PML foi feita por Bermúdez. (55)

A modelagem computacional de ondas eletromagnéticas feita em COMSOL também requer do usuário o conhecimento de como o software interpreta a dependência temporal dos campos. Sabemos que para resolver as equações de Maxwell para ondas planas, consideramos que as mesmas apresentam uma dependência harmônica com o tempo proporcional a $e^{-i\omega t}$, tal qual demonstrado no início do trabalho. Esta notação é corrente na maioria dos livros-texto de Física. Entretanto, em textos de Engenharia, é comum a troca do sinal da exponencial (de negativo para positivo) e é desta maneira que o COMSOL compreende a parte temporal dos campos. Esta simples troca de sinais acarreta mudanças nas definições das propriedades ópticas do meio, como o índice de refração e a permissividade, sobretudo para metais as quais essas quantidades são complexas; as partes imaginárias das mesmas têm de ser obrigatoriamente negativas, caso contrário, obteremos soluções com erros.

A seguir, preparamos uma breve síntese com as informações necessárias para o usuário iniciar a modelagem computacional de campos eletromagnéticos em COMSOL:

a) Refinar o mais que possível a malha, isto é, aumentar o número de elementos e nós presentes na malha, o que acarreta a diminuição do tamanho dos elementos (este procedimento é recomendado não apenas para problemas de eletromagnetismo, mas também, para as mais diversas situações físicas);

b) Implementar as "*perfectly matched layers*", ou PMLs, para evitar reflexões espúrias das ondas que não possuem sentido físico que possivelmente alterariam os resultados desejados;

c) Considerar a dependência temporal dos campos como sendo $e^{i\omega t}$ e como consequência atribuir valores negativos para a parte imaginária da permissividade (ou do índice de refração) dos meios condutores que integram a estrutura a ser simulada.

Feitas tais considerações estávamos aptos a proceder com nossas simulações.

Atribuição de materiais

O COMSOL disponibiliza uma biblioteca com dados referentes às propriedades dos materiais, denominada *"Material Browser"*, em que é permitido ao usuário atribui-las de acordo com o domínio definido por ele. A lista desta biblioteca compreende os mais diversos tipos de materiais, desde líquidos, vidros, piezoelétricos e metais, cada um contendo quantidades pré-definidas de propriedades como condutividades térmica e elétrica, viscosidade, índice de refração e permissividade. Caso o usuário deseje, ele tem a opção de definir e escrever por si próprio tais propriedades; isso é feito através da lista criada na seção *"Parameters"* do menu *"Global Definitions"*. Durante nosso trabalho escolhemos pelo último caso no momento de atribuir as características dos meios, isso porque tínhamos mais controle sobre o que ocorria com elas ao longo da simulação.

Portas de entrada e saída

Na modelagem de campos eletromagnéticos é necessário atribuir ao longo das fronteiras da janela computacional as denominadas portas, pois elas indicam por onde as ondas incidem e atravessam sua estrutura. Esse recurso é de extrema importância em problemas que desejamos determinar a transmissão e/ou reflexão de um sinal em termos de algum parâmetro criado pelo usuário. Por isso mesmo, as portas são vastamente aplicadas em simulações de guias de onda planar e antenas. A vantagem em se utilizar essa ferramenta consiste no fato de que ao longo de seu contorno ela é "casada" com o meio delimitado pela mesma, isto é, uma frente de onda que, por exemplo, incide sobre ela não é refletida.

Adotamos duas classes de portas em nossas simulações. Na primeira, denominada porta de entrada, como o próprio nome sugere, é por onde a onda incidente entra no ambiente da janela computacional. Em contrapartida, na porta de saída os campos deixam a janela. Os dois tipos de porta utilizadas no trabalho estão esquematizadas na figura 60. Ela informa que a onda incide de cima para baixo, mas também podemos adotar o sentido inverso. Convencionalmente para obter as curvas de transmissão, o COMSOL calcula previamente as amplitudes dos campos (proporcionais às intensidades refletida e/ou transmitida) que passam nessas duas portas. Feito isso o plote dos gráficos é automático. Entretanto esse procedimento é válido quando não há PML em torno da janela computacional (já que as portas são "casadas").

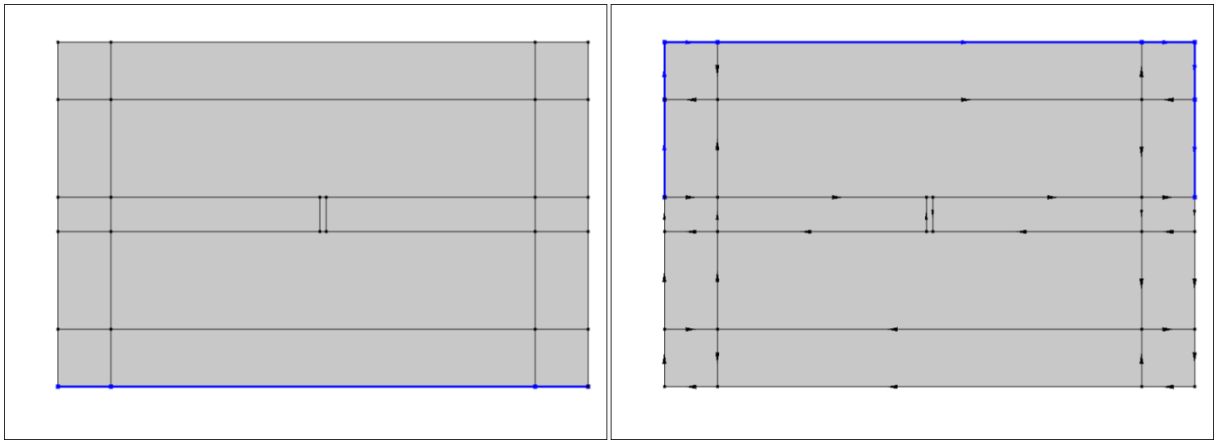


Figura 60 - Representações das portas de entrada (à esquerda) e saída (à direita) utilizadas em nossa modelagem.

Para obtermos resultados proporcionais à transmissão óptica, nos valemos de um recurso disponível na versão 4.2 do software. É importante destacar que a radiação transmitida e detectada no experimento corresponde ao campo espalhado (E_{esp}) pela fenda, e não ao campo incidente (E_{inc}). O campo elétrico total corresponde à soma desses últimos dois, ou seja, $E_t = E_{inc} + E_{esp}$. O módulo RF nos permitiu gerar dois ambientes de estudo para as ondas eletromagnéticas: o primeiro associado à onda incidente que simula o filme sem a presença da fenda; enquanto isso, o segundo ambiente se relaciona com a onda espalhada. Os plotes dos campos incidente e espalhado estão representados na figura 61.

No primeiro ambiente não foi necessário aplicarmos a PML, dado que nele consideramos os filmes sem a fenda, e como condutores são refletores no regime visível do espectro, consequentemente a onda transmitida é praticamente nula (basta verificar a grande área azul da figura 61 (a) que na escala de cores denota um campo aproximadamente zero).

Entretanto, no segundo ambiente em que consideramos a presença da fenda, referente à onda espalhada, o uso da PML se tornou fundamental devido aos motivos já mencionados anteriormente. Os gráficos de transmissão óptica foram obtidos a partir deste ambiente; após o processamento de uma rotina, o COMSOL disponibiliza ao usuário diversas quantidades físicas que podem ser plotadas em função de determinado parâmetro, definidos previamente por ele, como comprimento de onda ou espessura do filme, por exemplo.

A maior parte dos gráficos presentes em nosso trabalho foi gerada em termos da "*potência integrada*". Neste caso, o software integrou a quantidade denominada "*Power outflow*" ao longo da fronteira da janela de saída da figura 61 (b), em que o campo é espalhado. Esta grandeza apresenta dimensão de vetor de Poynting, que ao ser integrada num comprimento resulta em valores com dimensões proporcionais a W/m.

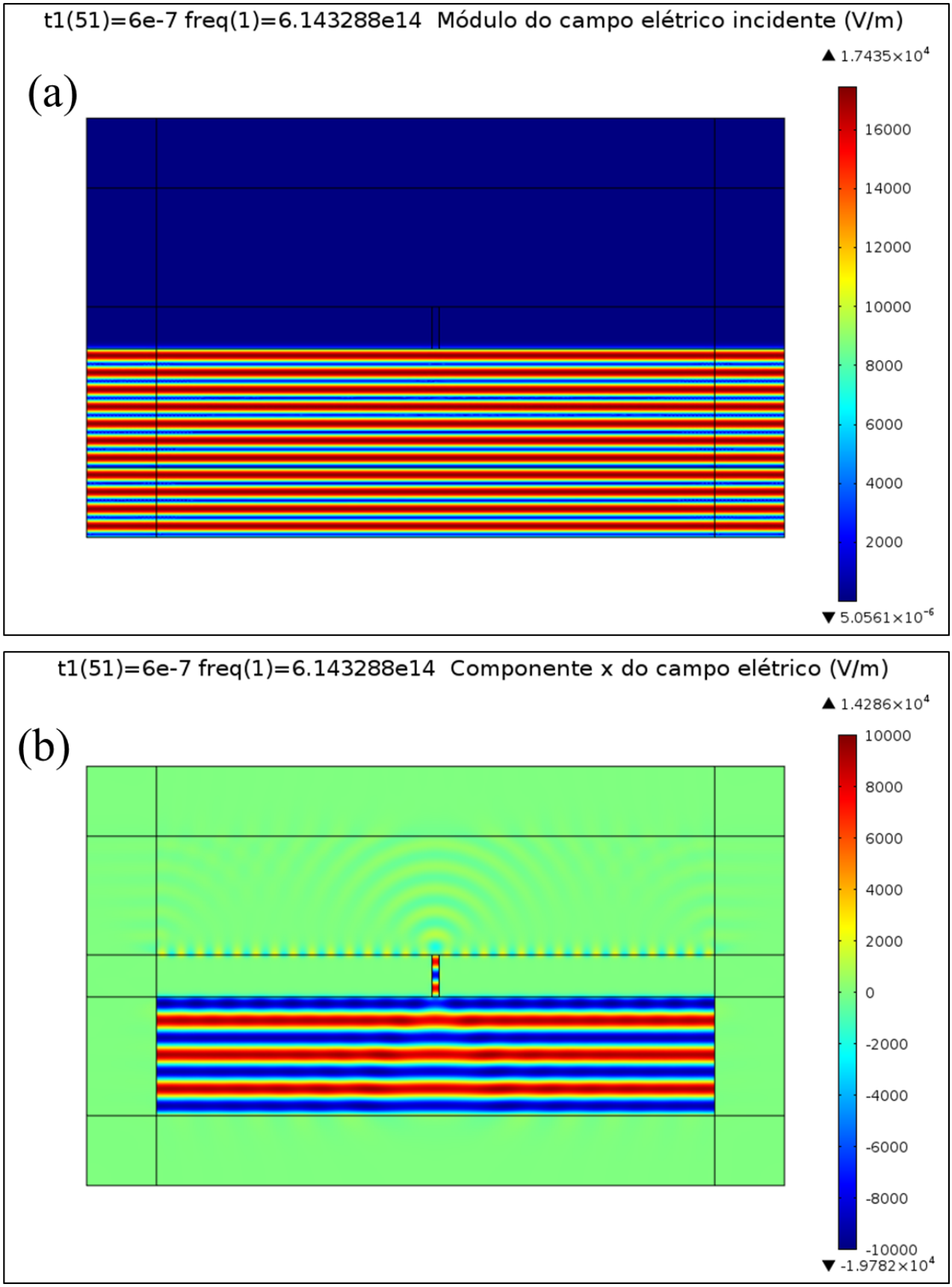


Figura 61 - Plotes dos campos incidente (a) e espalhado (b). No primeiro caso consideramos a ausência da fenda no filme metálico, isso porque, para calcularmos a transmissão associada à fenda, primeiramente temos de desconsiderar a contribuição da transmissão do próprio filme. Já na situação seguinte, temos o campo espalhado, que é o efetivamente detectado e utilizado nos cálculos da transmissão óptica.