



SERVIÇO PÚBLICO FEDERAL
UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARÁ
FACULDADE DE COMPUTAÇÃO – CASTANHAL
CURSO DE BACHARELADO EM ENGENHARIA DA COMPUTAÇÃO

EVAIR DE JESUS SILVA CUNHA

**INVESTIGAÇÃO DE PROPRIEDADES ÓPTICAS PARA PROJETO DE
BIOSSENSORES FOTÔNICOS**

Castanhal – PA

2019

EVAIR DE JESUS SILVA CUNHA

**INVESTIGAÇÃO DE PROPRIEDADES ÓPTICAS PARA PROJETO DE
BIOSSENSORES FOTÔNICOS**

Trabalho de Conclusão de Curso (TCC) apresentado ao Curso de Engenharia da Computação da Faculdade de Computação, Campus Universitário de Castanhal - Universidade Federal do Pará, como requisito parcial para a obtenção do Grau de Bacharel em Engenharia da Computação.

Orientador: Dr. **João Claudio Chamma Carvalho**

EVAIR DE JESUS SILVA CUNHA

**INVESTIGAÇÃO DE PROPRIEDADES ÓPTICAS PARA PROJETO DE
BIOSSENSORES FOTÔNICOS**

Trabalho de Conclusão de Curso (TCC) apresentado ao Curso de Engenharia da Computação da Faculdade de Computação, Campus Universitário de Castanhal - Universidade Federal do Pará, como requisito parcial para a obtenção do Grau de Bacharel em Engenharia da Computação.

Banca Examinadora:

Prof. Dr. - Orientador **João Claudio Chamma Carvalho**

Universidade Federal do Pará – UFPA
Campus Universitário de Castanhal
Faculdade de Computação

Conceito: _____

Prof. Dr. **Tássio Costa de Carvalho**

Universidade Federal do Pará – UFPA
Campus Universitário de Castanhal
Faculdade de Computação

Conceito: _____

Prof. Dr. **Clenilson Rodrigues da Silveira**

Universidade Federal do Pará – UFPA
Campus Universitário de Castanhal
Faculdade de Computação

**Castanhal – PA
2019**

A Deus e a meus pais

AGRADECIMENTOS

Agradeço a Deus por me conduzir nessa jornada, me provendo de força e coragem para tornar possível concluir essa empreitada.

À Universidade Federal do Pará, por ter oportunizado entrar no ensino superior e ter uma excelente formação acadêmica na maior universidade do norte.

Aos meus pais, que mesmo nas dificuldades da vida conseguiram dar todo suporte possível, principalmente a minha mãe com seu incentivo e assistência incondicional, essa conquista é apenas uma das formas que posso retribuir minha imensa gratidão por vocês.

A todos os professores que acreditaram em mim e foram como uma base para minha educação desde criança possibilitando meu crescimento pessoal e acadêmico, o futuro da nação passa pelas mãos de vocês e eu acredito no vosso propósito.

Ao meu orientador *Prof. Dr. João Claudio Chamma Carvalho* pela disponibilidade, pelo aprendizado, pelos conselhos e pelo auxílio na construção desse trabalho.

Aos meus colegas da turma de Engenharia da Computação, da UFPA e de fora dela, que foram responsáveis por ajudar na minha formação durante o curso e também pelos memoráveis momentos que compartilhamos.

À minha noiva *Morgana Silva* que desde o início sempre esteve comigo pela compreensão, respeito e pela atenção dedicada nas horas em que precisei sendo sempre solícita em ajudar no que podia.

E por fim, mas não menos importante, agradeço a todos conhecidos e desconhecidos que, de forma direta ou indireta, participaram desta longa e árdua jornada, se cheguei até aqui foi porque estive sobre os ombros de gigantes.

INVESTIGAÇÃO DE PROPRIEDADES ÓPTICAS PARA PROJETO DE BIOSSENSORES FOTÔNICOS

RESUMO

Este trabalho apresenta um estudo teórico sobre os efeitos das propriedades da prata, ouro e grafeno na sensibilidade e precisão de biossensores ópticos. Esses biossensores são baseados em guias de ondas com diferentes configurações geométricas e diferentes meios dielétricos. O objetivo deste estudo é desenvolver um modelo de biossensor, o qual faça uso das propriedades otimizadas desses materiais para melhorar tanto a sensibilidade quanto a precisão. Para se atingir esse objetivo é feito uma análise utilizando os princípios da Ressonância Plasmônica de Superfície (SPR), mais especificamente analisando o comportamento da refletância (R), com a incidência de ondas do modo TM (Transversal Magnética) sobre a estrutura. O intuito é verificar o comportamento que se estabelece ao incluir novos tipos de materiais para isso foi utilizado o Método da Matriz de Transferência, o qual é o modelo de simulação utilizado no Matlab. Os resultados foram obtidos através de análises numéricas, no simulador Comsol e do pacote científico Matlab. As estruturas foram baseadas na configuração de Kretschmann com o uso de cinco camadas. Os números dos resultados fornecem novas compreensões sobre as respostas observadas na refletância dos biossensores com a utilização do grafeno.

PALAVRAS CHAVE: SPR. Biossensor. Grafeno. Matlab

ABSTRACT

This work presents a theoretical study about the effects of silver, gold and graphene properties on the sensitivity and accuracy of optical biosensors. These biosensors are based on waveguides with different geometric configurations and different dielectric media. The aim of this study is to develop a biosensor model that uses the optimized properties of these materials to improve both sensitivity and accuracy. In order to achieve this objective, an analysis using the principles of surface plasmon resonance (SPR), more specifically analyzing the characteristic of reflectance (R), with the incidence of TM (magnetic transverse) mode waves on the structure. The intention is to verify the characteristic that is established when including new types of materials for this was used the Transfer Matrix Method, which is the simulation model used in Matlab. The results were obtained through numerical analysis, in the Comsol simulator and in the Matlab scientific package. The structures were based on the Kretschmann configuration with the use of five layers. The results numbers provide new insights on the observed responses in biosensor reflectance with the use of graphene.

KEYWORDS: SPR. Biosensor. Graphene. Matlab.

LISTA DE FIGURAS/ILUSTRAÇÕES

Figura 1: Definição da secção com as várias camadas.....	19
Figura 2: Distribuição dos materiais	20
Figura 3: Interpolação para os materiais	20
Figura 4: Parâmetros de portas e domínios para as áreas.....	21
Figura 5: Utilização da função Mesh	21
Figura 6: Função study.....	22
Figura 7: Exemplificação do uso da função results.....	22
Figura 8: Representação de uma onda eletromagnética	27
Figura 9: Esquema utilizado para obter os coeficientes de reflexão e refração, os índices i , r e t significam a incidência, reflexão e transmissão, respectivamente. (a) Modo TE (polarização s), (b) Modo TM (polarização p).....	31
Figura 10: Geometria do guia de placas paralelas.....	34
Figura 11: Geometria do guia de ondas retangular	36
Figura 12: Geometria do guia de ondas circular	40
Figura 13: Esquemático usado para o método da matriz de transferência. Neste modelo um feixe se propaga da esquerda para a direita e cada meio tem seu respectivo valor de refração e tamanho representados, respectivamente, por n e d	45
Figura 14: Um feixe de modo TM atravessa as camadas n_x e n_y da esquerda para a direita. 46	
Figura 15: Classificação dos biossensores	51
Figura 16: Esquema diagramático do princípio chave-fechadura e organização característica dos componentes de um biossensor.....	53
Figura 17: Elementos e características de transdutores (eletrodos) com o princípio eletroquímico.....	54
Figura 18: Diagrama esquemático de um biossensor com princípio de transdução calorimétrica	56
Figura 19: Esquema de um biossensor com princípio de transdução piezoelétrica.....	57
Figura 20: Ilustração de uma ressonância plasmônica de superfície é possível perceber a origem de dipolos elétricos induzidos e a força restauradora em consequência da separação de cargas nas nanopartículas na presença de um campo elétrico	59
Figura 21: Representação de um feixe de luz incidente com consequente propagação do plasmon ao longo da interface metal-dielétrico.....	60
Figura 22: Esquemático da configuração de Kretschmann à direita e Otto à esquerda	61
Figura 23: Esquemático dos modelos uni, bi e tridimensional. Cada cor representada indica a diferença entre os índices de refração.....	62
Figura 24: a) Rede hexagonal dos átomos de carbono para o grafeno e b) Estrutura do grafite apresenta multicamada de folhas de grafeno empacotadas e unidas por forças de Van der Waals com distância interplanar de 0,34 nm	63
Figura 25: Em um sólido os elétrons apresentam uma restrição de faixas, ou bandas de energia. A característica de um semicondutor, isolante ou até mesmo algumas camadas de grafeno, que nessa condição apresenta as características de um semicondutor, é de que um elétron, apenas pode se tornar livre se ele receber uma quantidade suficiente para atravessar o “gap”, o grafeno apresenta propriedades que tornam essa diferença de “gap” infinitesimal,	

essa é a principal razão para que os elétrons do grafeno tenham uma alta mobilidade eletrônica e permite que os elétrons se desloquem a uma velocidade de aproximadamente 106m/s.....	64
Figura 26: Disposição do modelo de múltiplas camadas	66
Figura 27: Comparação entre materiais de adesão.....	68
Figura 28: Curva de refletividade TM em função do ângulo para o sensor com variação entre 30 e 60 nm da espessura do filme de ouro e meio de detecção fixado em 1,33. (a) Comsol (b) Matlab. Por motivos de otimização, em termos de tempo de cálculo computacional, a quantidade de resolução no Comsol foi reduzida, até o ponto que não perdesse a confiabilidade.	69
Figura 29: Visualização do campo magnético em ressonância ao longo da estrutura da Figura 26, com utilização de 50 nm de espessura no filme de ouro a) distribuição magnética vista em 3D e b) vista em corte da estrutura, a barra de coloração representa a intensidade do campo.	70
Figura 30: Curvas de ressonância para o intervalo definido de 30 a 60 nanômetros com igualdade apenas em 30 e 50 nm. a) Curvas no Matlab b) Curvas no Comsol	71
Figura 31: Comparação através do incremento de camadas de Grafeno, onde cada camada possui espessura igual a 0,34 nm. As novas camadas se somam as anteriores. a) Curvas para as sucessivas camadas de grafeno no Matlab b) Curvas para as sucessivas camadas de grafeno no Matlab.....	73
Figura 32: Curvas de SPR para a prata com acréscimo de grafeno. a) Simulação no Matlab com 6 camadas de grafeno e uma espessura de 40 nm de prata. b) Simulação no Comsol com o obtido de 9 camadas.	74
Figura 33: Ilustração dos desempenhos de cada combinação de material	75

LISTA DE TABELAS

Tabela 1: Raízes de p_{nl} para o modo TE	43
Tabela 2: Raízes de p_{nl} para o modo TM	44
Tabela 3: Configurações utilizadas em ambos simuladores.....	67
Tabela 4: Desempenho dos materiais nas propriedades ópticas com ou sem grafeno	75
Tabela 5: Parâmetros de configuração no Comsol	93

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

Au	Ouro
Ag	Prata
ELISA	Enzyme Linked ImmunonoSorbent Assay
FWHM	Full Width at Half Maximum
MATLAB	MATrix LABoratory
PCR	Polymerase Chain Reaction
POC	Point of Care
SPP	Surface Plasmon Polariton
SPR	Surface Plasmon Ressonance
TE	Transversal Elétrico
TM	Transversal Magnético
TMM	Transfer Matrix Method

SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO	14
1.1. JUSTIFICATIVA	15
1.2. OBJETIVOS	18
1.2.1. OBJETIVO GERAL:	18
1.2.2. OBJETIVOS ESPECÍFICOS	18
1.3. METODOLOGIA	18
1.3.1. METODOLOGIA DE SIMULAÇÕES	19
2. GUIAS DE ONDAS ÓPTICOS	25
2.1. EQUAÇÕES DE MAXWELL	25
2.2. GUIAS DE ONDAS PLANARES	33
2.2.1. MODO TE	34
2.2.2. MODO TM	35
2.3. GUIAS DE ONDAS RETANGULARES	36
2.3.1. MODO TE	37
2.3.2. MODO TM	39
2.4. GUIAS DE ONDAS CIRCULARES	40
2.4.1. MODO TE	42
2.4.2. MODO TM	43
2.5. MÉTODO DA MATRIZ DE TRANSFERÊNCIA (TMM)	44
3. BIOSSENSORES	50
3.1. TIPOS DE BIOSSENSORES	50
3.1.1. BIORRECEPTORES	51
3.1.1.1. RECONHECIMENTO BIOCATALÍTICO	52
3.1.1.2. RECONHECIMENTO POR BIOAFINIDADE	52
3.1.2. TRANSDUTORES	53
3.1.2.1. TRANSDUTORES ELETROQUÍMICOS	53
3.1.2.2. TRANSDUTORES CALORIMÉTRICOS	55
3.1.2.3. TRANSDUTORES PIEZOELÉTRICOS	56
3.1.2.4. TRANSDUTORES ÓPTICOS	57
3.2. PROPRIEDADES ÓPTICAS	58
3.2.1. SURFACE PLASMON RESSONANCE (SPR)	58

3.2.2. CRISTAIS FOTÔNICOS	61
3.2.3. GRAFENO.....	63
3.3. MODELO DE SIMULAÇÃO DO SENSOR.....	65
4. RESULTADOS SIMULADOS.....	67
5. CONCLUSÃO	77
REFERÊNCIAS.....	79
APÊNDICE A	87
APÊNDICE B.....	93

Capítulo 1

1. INTRODUÇÃO

Em geral, ao se deparar com a palavra sensor, que vem do latim “sentire”, o que de forma concisa significa identificar, é quase que inevitável ao escutá-la, não vir a mente uma associação aos cinco sentidos do corpo humano: audição, visão, paladar, olfato e tato. Essa habilidade do corpo é generalizada como uma forma de interagir com os sinais e estímulos advindos do ambiente. Em termos técnicos a definição de sensor é incorporada aos dispositivos que receberão estímulos do ambiente externo e responderão a estes (ALI et al., 2017).

Biossensores são pequenos dispositivos que utilizam componentes biológicos como elementos de reconhecimento, os quais são ligados a um sistema de detecção, transdução e amplificação do sinal, onde o mesmo é gerado através da reação do analito-alvo com as estruturas do biossensor, no qual o analito é um patógeno ou componente químico em uma determinada amostra (CALIL; SILVA, 2011).

Para se projetar biossensores, com alta especificidade e sensibilidade, têm sido investigadas as propriedades de diversas substâncias e materiais biológicos para verificar se as mesmas apresentam potencial para funcionarem como elementos detectores. A escolha do material biológico e juntamente com suas combinações são cruciais para um bom desempenho do dispositivo e influenciam diretamente nos resultados. Esses materiais são basicamente compostos por aptâmeros, nucleotídeos, associações, arranjos peptídicos e polímeros impressos em moléculas, os quais têm despertado o interesse dos pesquisadores, uma vez que por trás do conhecimento e domínio das propriedades dessas substâncias e materiais está o caminho para o desenvolvimento e inovação nos biossensores. (MANI; VASDEV, 2018).

A indústria dos biossensores tem alcançado significativos avanços tecnológicos ao longo dos últimos anos. O mercado mundial de biossensores é um dos setores que crescem mais rápido no mundo, mais precisamente a uma taxa anual de crescimento de 7,9%, o qual tem uma previsão de alcançar US\$ 22,8 bilhões em 2020. Nesse segmento, os dispositivos para avaliação de enfermos (POC – *Point-of-Care*) correspondem à cerca de 57% de todo esse mercado (LOPEZ et al., 2017). Existe também uma demanda crescente na busca de métodos de detecção em áreas como segurança alimentar, desenvolvimento de drogas, monitoramento

ambiental, diagnósticos e inclusive podendo abranger outras áreas. Quando comparado com outros métodos de detecção, biossensores têm um apelo especial para uso em todas essas áreas supracitadas, já que são vistos comercialmente como lucrativos, devido aos seus potenciais de reprodutibilidade, baixo custo e miniaturização; além de tecnicamente ter vantagens em relação a sensoriamento remoto, apresentar maior precisão, baixo limite de detecção e confiabilidade (BASTOS et al., 2018).

Pesquisas relacionadas a dispositivos que utilizam técnicas de detecção com alta precisão e com o diferencial de serem mais rápidos que métodos convencionais (PCR ou RT-PCR, REA, ELISA) tiveram início em 1962 com a invenção do primeiro biossensor criado por Clark e Lyons (CLARK; LYONS, 1962), o qual tinha o objetivo de mensurar a glicose por meio de amostras biológicas utilizando a técnica de detecção eletroquímica de oxigênio ou peróxido de hidrogênio. Esse trabalho tem sido utilizado como referência e quando comparado a métodos mais atuais como o utilizado por Fracchiolla et al. (FRACCHIOLLA; ARTUSO; CORTELEZZI, 2013) e Turner (TURNER, 2013) constata-se que desde então ocorreram avanços notáveis no campo do biossensores (VIGNESHVAR et al., 2016).

Existem diversas estratégias de detecção para se projetarem biossensores, as quais são descritas no capítulo 3 deste estudo e nesse trabalho foi escolhido o meio óptico como estratégia para se modelar, isto é, definir os parâmetros geométricos e ópticos da estrutura a ser desenvolvida. O presente trabalho apresenta um estudo teórico sobre os efeitos do grafeno e do ouro, da prata e do grafeno na sensibilidade e na precisão de biossensores ópticos baseados em guias de ondas, com o intuito de fornecer um modelo de biossensor, o qual faz uso das propriedades otimizadas desses materiais, utilizando para análise princípios da Ressonância Plasmônica de Superfície (SPR), mais especificamente a refletância (R), ao ter a incidência de ondas TM (Transversal Magnética) sobre a estrutura e verificar o comportamento que se estabelece ao incluir novos tipos de materiais.

1.1. JUSTIFICATIVA

Os recentes progressos na área de nanofabricação, a demanda crescente por plataformas POC econômicas, portáteis e fáceis de usar, é um dos motivos que tem tornado os biossensores de grande interesse para o meio científico [LOPEZ et al., 2017]. Um exemplo clínico habitual é o sensor de glicose para diabetes, que se tornou um assunto clássico para o estudo no campo dos biossensores. Nesta condição, existe a necessidade de monitorização *in vitro* e *in vivo*, com a possibilidade de gerir a doença de forma totalmente automatizada

através da bomba de infusão de insulina [TURNER; KARUBE; WILSON, 1987]. Desde então um grande esforço de pesquisa tem sido realizado através de diversos trabalhos no sentido de melhorar o desempenho desses dispositivos visando atender às demandas em diversas áreas de aplicação tais como:

- **Clínico/Médico:** Atuar na prevenção da população de males causados por doenças, que no geral são invisíveis nos estágios iniciais ou demandam um tempo considerável para serem detectadas. É o caso das pesquisas voltadas para diagnósticos preventivos de doenças, as quais necessitam de uma detecção antecipada para tomadas de decisão na área médica. Por exemplo, pode-se destacar a detecção de tumores cancerígenos, que é o caso demonstrado por (FAN et al., 2014), não se limitando apenas a este, podendo também auxiliar na detecção de uma série de outras doenças, como a dengue (JAHANSHAH et al., 2014) e a Doença de Chagas (PEREIRA et al., 2011).
- **Indústria de alimentos:** Na segurança alimentar os biossensores tiveram um impulso na sua implementação devido a uma maior adoção das indústrias com interesse no monitoramento em tempo real de sua produção, tendo em vista possíveis prejuízos na produção e consequente perda irreversível da matéria de prima por contaminação. Quando se trata de escala industrial inconvenientes deste tipo causam perdas significativas, causando grande transtorno, a atenção é redobrada em particular na determinação de alguns agentes causadores de doenças alimentares, tais como *Salmonella* CHEN e PARK (2018), *Escherichia coli*, *Listeria monocytogenes* ZHOU et al. (2018), *Staphylococcus aureus* RUBAB et al. (2018), etc. (SKOTTRUP et al., 2007).
- **Poluição ambiental:** Discussões a respeito de monitoramento ambiental têm tido uma importância constante, muito por causa dos efeitos nefastos das ações humanas sobre o meio, tanto na água, solo e o ar do ambiente em que vive, e as frentes para minimizar os impactos nocivos à população são muitas, e no que se refere à prevenção e detecção os biossensores são uma das ferramentas aliadas nesse processo.

Atualmente, as legislações ambientais apresentam limites na emissão de poluentes, o que requer um monitoramento consistente na determinação de agentes compostos, por exemplo: pesticidas, aditivos de gasolina, agentes industriais, metais pesados, Trinitrotolueno (TNT) e dentre outros que possam afetar a saúde humana e os ecossistemas locais. Técnicas analíticas convencionais, embora altamente precisas,

sofrem das desvantagens do alto custo, da necessidade de pessoal treinado e do fato de estarem ligadas ao laboratório. Os biossensores se forem muito específicos e de resposta rápida, têm baixo custo, são portáteis e são capazes de monitorar in situ continuamente, podendo apresentar vantagens distintas sobre as técnicas convencionais (HOMOLA, 2008; MEHRVAR et al., 2000).

- **Defesa militar:** A ameaça de uma guerra biológica traz um clima de tensão para todos países. Avanços em microbiologia e engenharia genética tornaram possível criar microrganismos extremamente perigosos. Como os métodos para detecção desses agentes e tratamentos para infecção são atualmente limitados, o desenvolvimento de sensores altamente sensíveis para a detecção precoce de agentes de guerra biológica é crucial [EDELSTEIN, R. L. et al., 2000].

Neste caso, principalmente, os biossensores podem ser empregados para detectar os ataques bioterroristas, como o uso intencional de entidades biológicas como *Bacillus anthracis*, *Ebola*, *vírus da hepatite C*, etc. [ALI, J. et al., 2017]. O uso de biossensores relacionados à área militar no trabalho de Peng et al. (2016), o uso de biossensores trata não necessariamente sobre doenças nos mais variados ambientes, como água, ar e solo, mas sim sobre uma avaliação da amilase presente na saliva dos soldados, com o auxílio de biossensores na verificação do bem-estar de soldados envolvidos em situações de estresse contínuo, devido ao amplo espectro de fatores de estresse que operações e treinamentos militares exigem.

Dessa maneira, a tecnologia de biossensores ópticos é promissora e com enorme potencial para intervir de forma proativa em diversas áreas citadas anteriormente.

Para se projetar biossensores de alto desempenho uma das principais linhas de investigação consiste na combinação e na compreensão das propriedades ópticas de certos materiais, os quais podem influenciar na sensibilidade e precisão desses biossensores.

Seguindo esta tendência, este trabalho investiga o uso das propriedades ópticas de determinados materiais (ouro, prata e grafeno), pois o estudo dessas propriedades combinadas as técnicas de projetos de guias de ondas formam a base para se projetar dispositivos com desempenho superior aos convencionais.

As principais contribuições desse trabalho são:

- Desenvolvimento de um modelo de biossensor usando os princípios da ressonância plasmônica de superfície.

- Análise da influência das propriedades ópticas do Ouro, Prata e Grafeno na precisão e sensibilidade do dispositivo.

1.2. OBJETIVOS

1.2.1. OBJETIVO GERAL:

Investigar as propriedades desses materiais (ouro, prata e grafeno) através dos mecanismos de interação entre luz e matéria, com a intenção de projetar biossensores ópticos de alto desempenho.

1.2.2. OBJETIVOS ESPECÍFICOS:

- Estudo dos princípios e estruturas indispensáveis para o funcionamento satisfatório dos biossensores;
- Investigar tipos de estruturas dielétricas e metálicas em guias de ondas (com múltiplas camadas) para projetos de biossensores;
- Investigar a influência de um analito alvo (por meio da interação com o meio sensorizado e consequente alteração dos meios dielétricos) na resposta do biossensor;
- Estudo de alguns modelos de simulação para biossensores ópticos;
- Investigar e testar estruturas dielétricas específicas e verificar suas possíveis contribuições para melhorar a resposta do biossensor.

1.3. METODOLOGIA

Este trabalho tem como intuito contribuir para o desenvolvimento de um modelo de biossensor que se aproprie das características otimizadas dos materiais estudados em questão.

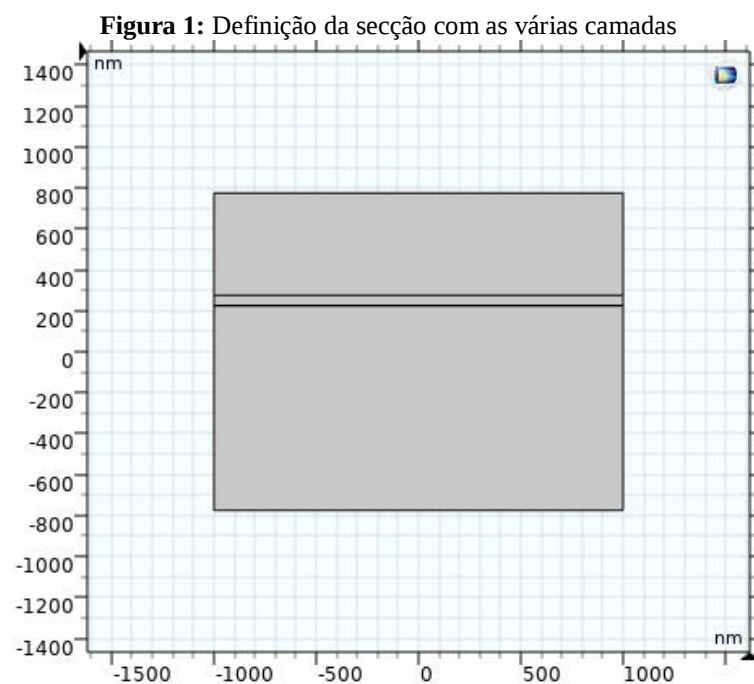
Perante isto, foram utilizados dois simuladores, Comsol e Matlab, que permitiram a simulação das características de um biossensor, no primeiro simulador foram utilizados apenas definições de espessura, tipo de materiais, comprimento de onda, geometria e variação do ângulo. Tendo em vista que o Comsol é uma plataforma com as equações de onda já embutidas, então não foi possível ver muitos detalhes desse tipo. A maior parte do trabalho concentrou-se no Matlab onde foi possível ter maior controle sobre vários parâmetros, pois foi desenvolvido um programa para obtenção dos coeficientes de reflexão e transmissão, para este trabalho apenas a reflexão foi utilizada. Para se atingir isso foi feito uma modelagem

utilizando as derivações das equações de Fresnell com as equações de ondas e o método da matriz de transferência. Além disso, foram implementadas no programa as métricas de avaliação das curvas que foram a sensibilidade e a precisão.

Algumas rotinas de simulações foram realizadas no programa para determinação de parâmetros passíveis de otimização nos ambientes do Matlab e Comsol Multiphysics. O primeiro para cálculos numéricos, análise numérica e produção de gráficos, o segundo sendo um ambiente integrado para resolver sistemas de equações diferenciais dependentes do tempo ou estacionárias de segunda ordem no espaço em até três dimensões, que neste caso serviu para comparações de comportamento do modelo apresentado no Matlab e o que foi feito no Comsol.

1.3.1. METODOLOGIA DE SIMULAÇÕES

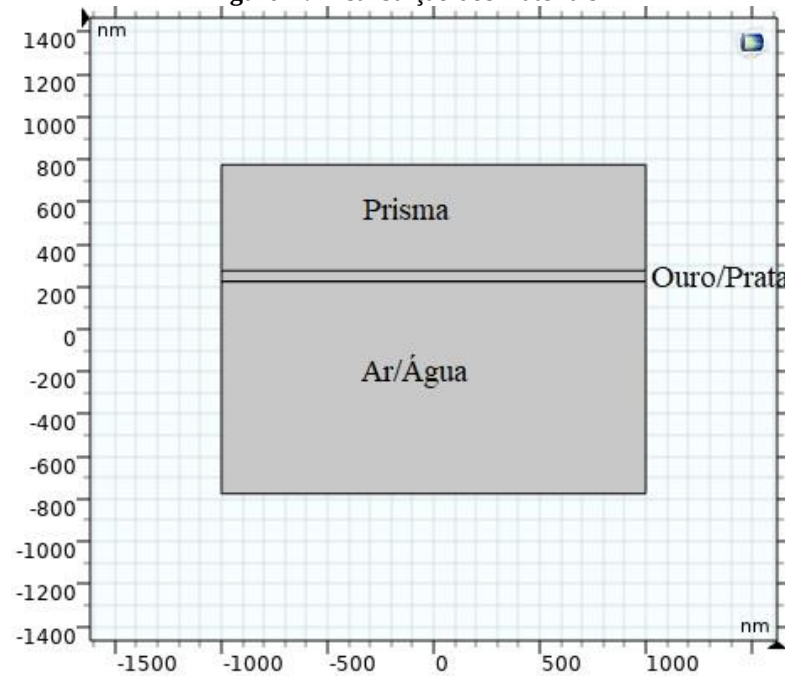
Para realização das simulações no Comsol foi inicialmente pensado em definir no simulador a secção da estrutura de um biossensor, ou seja, apenas uma parte dessa estrutura será analisada, tendo em vista que quando essa análise for expandida ela poderá abranger corretamente as características de funcionamento do biossensor. Essa definição de secção pode ser vista na Figura 1, as dimensões podem ser vistas no Apêndice B.



Fonte: elaborado pelo autor (2019)

Logo após essa definição de geometria é feito a escolha dos materiais e definição das posições desses materiais, sendo assim foi escolhido o lado maior sendo preenchido por um dielétrico no caso o ar, que posteriormente foi substituído por água, o meio ficou preenchido pelos metais que podem ser o ouro ou a prata, a camada mais fina e não visível na figura é a do grafeno e por fim o prisma sendo a última camada nesta ordem.

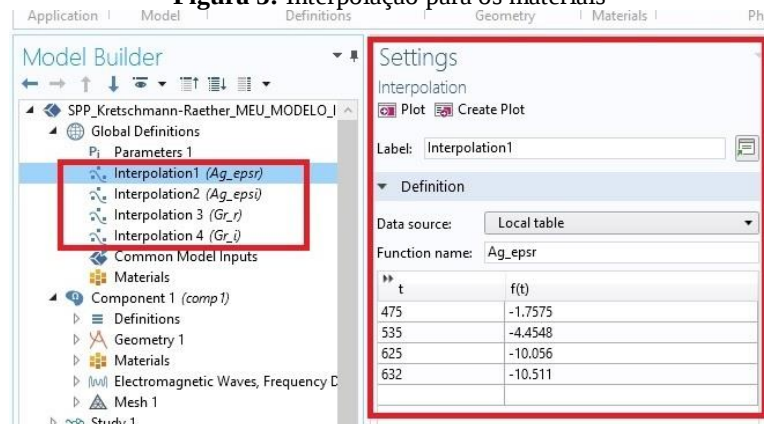
Figura 2: Distribuição dos materiais



Fonte: elaborado pelo autor (2019)

Em seguida é feita uma interpolação com os dados de constantes elétricas reais e imaginárias para 4 comprimentos de onda para o metal e o grafeno, caso esteja sendo utilizado, como pode ser visto na Figura 3.

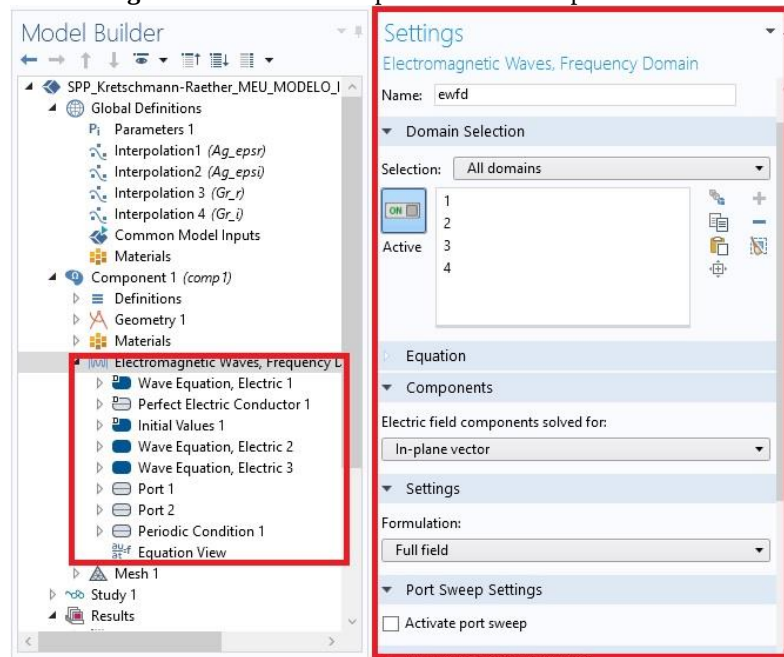
Figura 3: Interpolação para os materiais



Fonte: o autor (2019)

A seguir é feita uma definição de portas e domínios das estruturas na categoria de ondas eletromagnéticas disposta na Figura 4:

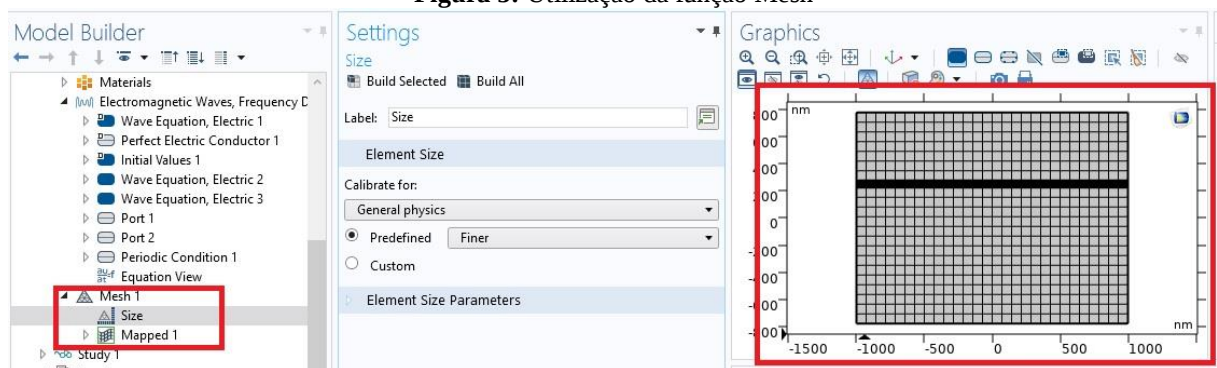
Figura 4: Parâmetros de portas e domínios para as áreas



Fonte: elaborado pelo autor (2019)

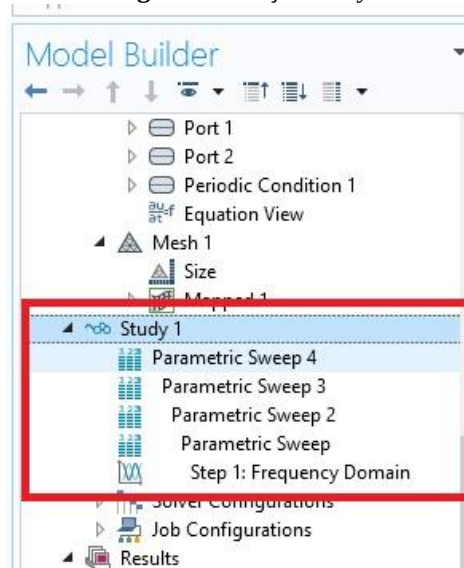
A função Mesh irá discretizar toda a área selecionada para realizar os cálculos de ondas atravessando essa estrutura e essa discretização pode ser refinada ou não a depender da estrutura, como mostrado na Figura 5.

Figura 5: Utilização da função Mesh



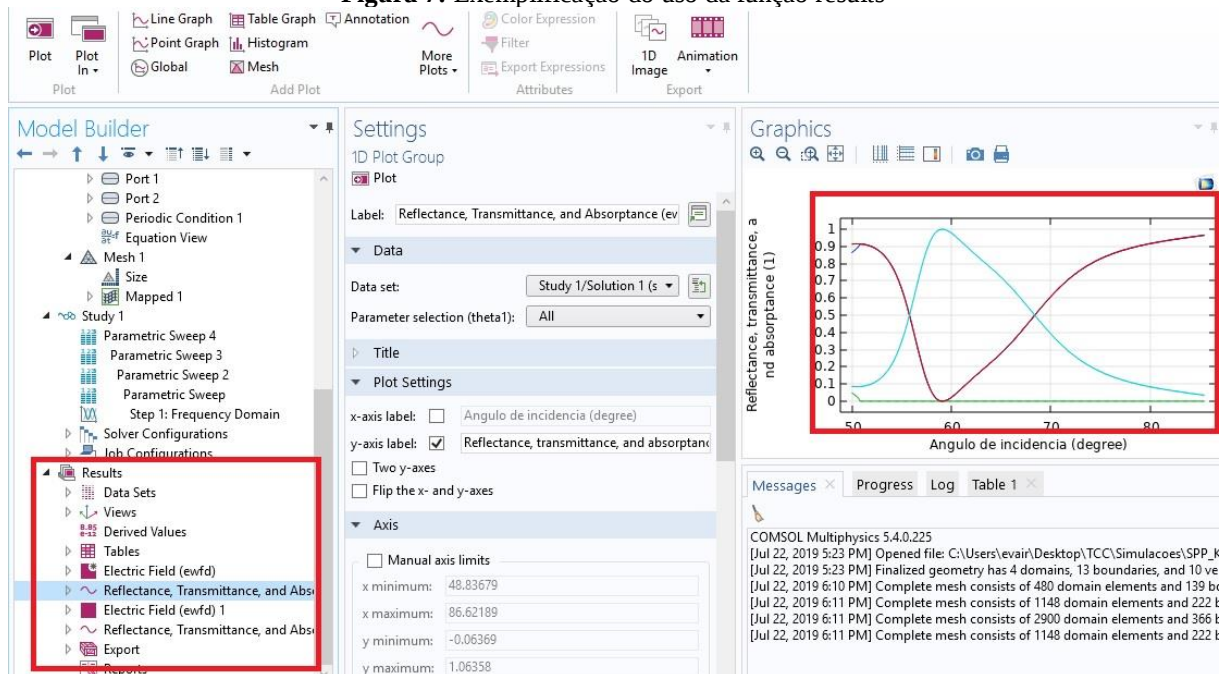
Fonte: elaborado pelo autor (2019)

O próximo passo é a definição dos elementos que serão incrementados durante os ciclos na simulação para que se tenham mudanças nos resultados e posterior análise. A função responsável pelos incrementos nos parâmetros é a *study* onde é possível tornar todos elementos da simulação incrementáveis como pode ser visto na Figura 6.

Figura 6: Função study

Fonte: elaborado pelo autor (2019)

E por fim, para análise dos resultados em gráficos existe a função *results* que torna todas saídas de resultado do Comsol em gráficos customizáveis como mostrado na Figura 7.

Figura 7: Exemplificação do uso da função results

Fonte: elaborado pelo autor (2019)

Para simulação no Matlab foi construído o programa, disponível no Apêndice A, que deveria trabalhar com os coeficientes de reflexão e transmissão em uma estrutura com camadas de diversos tipos de materiais, assim como no Comsol. Iniciou-se pela definição dos materiais em variáveis com suas características inerentes, neste caso a dimensão de espessura

e o índice de refração complexo. Inclui-se a isso o comprimento de onda que será utilizado nessa disposição. Tanto para o Comsol quanto para o Matlab a configuração de Kretschmann foi empregada.

```
% lambda_0= 633E-9;      %Comprimento de onda
% n_prisma = 1.723;      %Índice de refração do prisma SF10
% n_Cr=4.1395-2.3152i;    %Índice de refração do crômio
% n_Au= 0.18344-3.4332i;  %Índice de refração do ouro ou prata
% n_Gr=3-1.149i;         %Índice de refração do grafeno
% d_Cr=1E-9;             %Espessura do crômio
% d_Gr=6.12E-9;          %Quantidade de camadas de grafeno
% d_Au=d_Au;             %Espessura do ouro ou grafeno
```

O método da matriz foi utilizado em conjunto com essa técnica como forma de simplificar a estrutura para escrita do programa. Com a intenção de incrementos foram adicionadas variáveis para amostragem e passos no domínio dos ângulos, com os devidos limites: inferior e superior.

```
% theta_inicio = 45;      %Angulo de inicio
% theta_slut = 68;        %Angulo final
% thetasteps =10000;      %Amostragem
% theta_inicio=theta_inicio/360*2* pi ;    %conversão de angulo
% theta_slut=theta_slut/360*2* pi ;
% deltatheta =( theta_slut-theta_inicio) / ( thetasteps -1);
% for t = 1: 1: thetasteps ;
% theta=theta_inicio+deltatheta *( t -1);   %contador de angulo
% angulo( t )= theta / ( 2* pi ) * 360;     %eixo x (ou angulos)
```

Um ciclo foi utilizado para que todas as características de forma e alteração do objeto analisado fossem calculadas, juntamente com os coeficientes de reflexão e transmissão, deste modo a função com as características eram sempre chamadas e alterada internamente pelo ciclo de um *for* que terminava a execução quando o intervalo de análise acabasse, onde ao final de cada execução é mostrado um gráfico que acumula os resultados anteriores.

```
% for l =1.33:0.005:1.35
% n_buffer =l;
% [ Refletancia ] = Valor_de_refletancia(n_buffer ,d_Au , angulo , theta_inicio , theta_final ,
% deltatheta , thetasteps );
% if l==1.330
```

Dentro de cada incremento é realizado as medições de tamanho da curva, máximo, mínimo e ângulo de incidência. Com essas medições é possível encontrar as métricas de sensibilidade e precisão.

```
plot( angulo , Refletancia , ' k ' )
```

```

[rmin1,xmin1] = min(Refletancia);
[rmax1,xmax1] = max(Refletancia);
xmin1 = (theta_inicio+(xmin1*deltatheta))*(180/pi);
indice_ref1=l;
% ***Calculo de Precisão***
rmin1;
xmin1
rmax1;
Refletancia(end);
Dir = (Refletancia(end)-rmin1)/2
Esq = (rmax1-rmin1)/2
idx_yEsq = min(find(abs(Refletancia-Esq)<0.0003))
idx_yDir = max(find(abs(Refletancia-Dir)<0.0002))
idx_Centro = find(Refletancia==rmin1)
x_Dir = angulo(idx_yDir)
x_Esq = angulo(idx_yEsq)
x_Cen = angulo(idx_Centro)
FWHM = 1/(x_Dir-x_Esq)
plot( angulo , Refletancia , ' k ','LineWidth',1 )
hold on
plot (angulo(idx_Centro), Refletancia(idx_Centro), '*')
plot (angulo(idx_yDir), Refletancia(idx_yDir), '*')
plot (angulo(idx_yEsq), Refletancia(idx_yEsq), '*')

```

% SPR mínimo
 % SPR máximo
 % Conversão para graus
 % Contador

 % Menor amplitude
 % Ângulo de incidência mínimo
 % Maior amplitude da esquerda
 % Maior amplitude da direita

 % Encontrar o ponto médio
 % Encontrar o ponto médio

 % Ângulo médio da direita
 % Ângulo médio da esquerda
 % Ângulo do centro
 % FWHM dividido por 1
 % Plot do resultado

 % Localização do ponto centro
 % Localização do ponto Direita
 % Localização do ponto Esquerda

O capítulo 1 fez uma breve abordagem sobre o que são os biossensores, sua história, influência e perspectivas, como também elencou os objetivos deste trabalho e logo em seguida foi disposta a metodologia para alcançar os objetivos.

Capítulo 2

2. GUIAS DE ONDAS ÓPTICOS

2.1. EQUAÇÕES DE MAXWELL

Tanto fótons quanto elétrons apresentam comportamento de ondas eletromagnéticas, tendo em vista as semelhanças de comportamento isso torna as formas de analisá-los aplicáveis para ambos. Para examinar a propagação e descrever as ondas eletromagnéticas, antes é necessário partir das leis de Maxwell, pois os efeitos de plasmônica, que ocorrem na interface entre o dielétrico e o metal, são na verdade ondas se propagando ao longo destes. Na descrição destas leis seguiram-se as notações dos livros de SARID; CHALLENGER (2010), KLEIN; FURTAK (1986) e MAIER (2007). As equações de Maxwell na presença de matéria são descritas na forma diferencial da maneira a seguir:

$$\nabla \cdot \vec{E} = \frac{\rho}{\varepsilon} \quad (1.1)$$

$$\nabla \cdot \vec{H} = 0 \quad (1.2)$$

$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{H}}{\partial t} \quad (1.3)$$

$$\nabla \times \vec{H} = \mu_0 \vec{J} + \mu_0 \varepsilon_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \quad (1.4)$$

Inicialmente, considera-se que as condições são do espaço livre, isto é, um espaço livre de cargas e correntes, logo $\vec{J} = 0$ e $\rho = 0$, os campos elétricos e magnético são representados por $\vec{E}$ e $\vec{H}$, ρ é a densidade de carga elétrica, ε é a permissividade elétrica sendo ε_0 e μ_0 a permissividade elétrica e a permeabilidade magnética no vácuo, o $\vec{J}$ aqui representa a densidade de corrente elétrica.

Utilizando as equações para os campos elétrico e magnético, podemos determinar o rotacional do campo elétrico da seguinte forma:

$$\nabla \times \vec{E} = \begin{vmatrix} \hat{x} & \hat{y} & \hat{z} \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ E_x & E_y & E_z \end{vmatrix} = i\mu\omega H, \quad (1.5)$$

Onde $\omega = 2\pi f$ é a frequência angular da variação senoidal dos campos eletromagnéticos e f é a frequência. A equação (1.5) gera três componentes do campo magnético H , em função das derivadas parciais do campo elétrico E .

$$\hat{x} \left(\frac{\partial}{\partial y} E_z - \frac{\partial}{\partial z} E_y \right), \quad (1.6)$$

$$\hat{y} \left(\frac{\partial}{\partial z} E_x - \frac{\partial}{\partial x} E_z \right) \quad (1.7)$$

e

$$\hat{z} \left(\frac{\partial}{\partial x} E_y - \frac{\partial}{\partial y} E_x \right). \quad (1.8)$$

De modo similar, apenas trocando-se os campos, agora teremos três componentes de E em função das derivativas parciais de H .

$$\nabla \times \vec{H} = \begin{vmatrix} \hat{x} & \hat{y} & \hat{z} \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ H_x & H_y & H_z \end{vmatrix} = -i\varepsilon\omega E, \quad (1.9)$$

2

Resultando em:

$$\hat{x} \left(\frac{\partial}{\partial y} H_z - \frac{\partial}{\partial z} H_y \right), \quad (2.0)$$

$$\hat{y} \left(\frac{\partial}{\partial z} H_x - \frac{\partial}{\partial x} H_z \right) \quad (2.1)$$

e

$$\hat{z} \left(\frac{\partial}{\partial x} H_y - \frac{\partial}{\partial y} H_x \right). \quad (2.2)$$

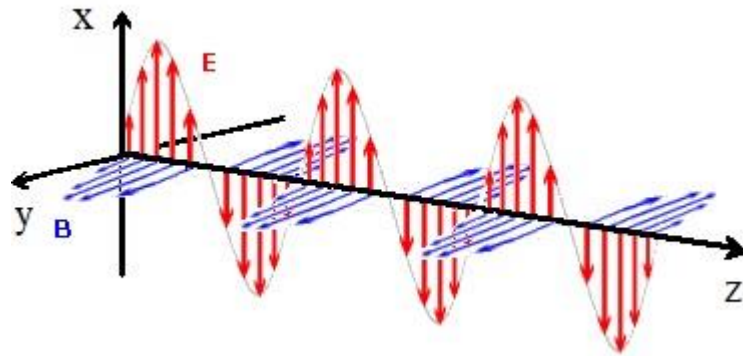
¹ $\varepsilon_0 \approx 8.854 \times 10^{-12} \text{ F/m}$

² $\mu_0 \approx 1.257 \times 10^{-6} \text{ H/m}$

$$\hat{z} \left(\frac{\partial}{\partial x} H_y - \frac{\partial}{\partial y} H_x \right).$$

Como em uma onda plana eletromagnética o campo magnético e o campo elétrico possuem somente uma componente, os quais são perpendiculares entre si, podemos dizer que o vetor intensidade de campo magnético $\vec{B}$ tem sua única componente em y , e para o vetor intensidade de campo elétrico $\vec{E}$ temos a componente em x , com o vetor de propagação k na direção z , o que pode ser visto na Figura 8.

Figura 8: Representação de uma onda eletromagnética



Fonte: (ESPAÇO CIENTÍFICO CULTURAL, [s.d.])

Ao desenvolvermos o lado direito das equações (1.3) e (1.4) teremos:

$$-\mu_0 \frac{\partial}{\partial t} (H_x + H_y + H_z), \quad (2.3)$$

$$\varepsilon_0 \frac{\partial}{\partial t} (E_x + E_y + E_z). \quad (2.4)$$

Pelas considerações feitas de que o campo magnético tem somente uma componente em z e o campo elétrico somente em y . Deste modo, podemos reduzir as equações (2.3) e (2.4) unindo com (1.8) e (2.1), respectivamente, temos:

$$\frac{\partial E_y}{\partial x} = -\mu_0 \frac{\partial H_z}{\partial t}, \quad (2.5)$$

$$\frac{\partial H_z}{\partial x} = \varepsilon_0 \frac{\partial E_y}{\partial t}. \quad (2.6)$$

Derivando a equação (2.5) em relação à x e (2.6) em relação a t , obtemos o seguinte:

$$\frac{1}{\mu_0} \frac{\partial^2 E_y}{\partial x^2} = -\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial H_z}{\partial t} \right), \quad (2.7)$$

$$-\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial H_z}{\partial t} \right) = \varepsilon_0 \frac{\partial^2 E_y}{\partial t^2}. \quad (2.8)$$

Percebe-se que surge uma identidade entre (2.7) e (2.8), a relação disso nos dá o seguinte:

$$\frac{1}{\mu_0} \frac{\partial^2 E_y}{\partial x^2} = \varepsilon_0 \frac{\partial^2 E_y}{\partial t^2} = \nabla \times (\nabla \times \vec{E}) = \nabla \times \left(-\frac{\partial \vec{H}}{\partial t} \right). \quad (2.9)$$

Temos então a equação da onda para E_y :

$$\frac{\partial^2 E_y}{\partial x^2} - \varepsilon_0 \mu_0 \frac{\partial^2 E_y}{\partial t^2} \quad (3.0)$$

Calculando os vetores das equações (1.1), (1.2), (1.3) e (1.4) e eliminando o campo H , tem-se o resultado da equação (3.1) que se assemelha ao da equação (3.0):

$$\nabla^2 E - \frac{n}{c} \frac{\partial^2 E}{\partial t^2} = 0 \quad (3.1)$$

Onde c é a velocidade da luz no espaço livre, n é o índice de refração do meio. Sabendo que a permissividade elétrica no vácuo é representada por ε_0 e a permeabilidade magnética por μ_0 , temos:

$$v_{\text{vácuo}} = c = \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_0 \mu_0}} \cong 3 \times 10^8 \text{ m/s}, \quad (3.2)$$

Podemos obter a equação de onda para H_z fazendo o processo inverso, isto é, derivando (2.5) em relação a t e (2.6) em relação a x , obteremos assim a seguinte equação para H_z :

$$\frac{\partial^2 H_z}{\partial x^2} = \varepsilon_0 \mu_0 \frac{\partial^2 H_z}{\partial t^2}. \quad (3.3)$$

A velocidade de fase da onda (v) depende das características do meio, ela pode ser descrita como:

$$v = \frac{1}{\sqrt{\epsilon\mu}} = \frac{\omega}{k}, \quad (3.3)$$

Onde o vetor de onda no espaço é dado na forma,

$$k_0 = |\vec{k}| = \omega\sqrt{\epsilon_0\mu_0} = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{\omega}{c} \quad (3.4)$$

A solução para a equação (3.1) é dada pela seguinte equação:

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{E}(r)e^{-i\omega t}. \quad (3.5)$$

A equação apresenta dependência em quatro dimensões, onde $\vec{r}$ representa as três coordenadas em cartesiano a_x, a_y, a_z , t representa a dependência em relação ao tempo e ω é a frequência de uma onda plana. A equação (3.5) descreve uma onda que se desloca com velocidade v , que é dado pela equação (3.3). Considerando k da seguinte forma:

$$k = \frac{n}{c} \omega, \quad (3.6)$$

Então utilizando a equação (3.4), (3.5) em (3.1) podemos reduzir a equação eliminando a dependência temporal da forma a seguir:

$$\nabla^2 E = \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial^2 E}{\partial t^2} = \mu_0 \epsilon_0 (j\omega) E(\vec{r}), \quad (3.7)$$

$$\nabla^2 E = -\omega^2 \mu_0 \epsilon_0 E(\vec{r}), \text{ assim:} \quad (3.8)$$

$$\nabla^2 E(\vec{r}) - k_0^2 E(\vec{r}). \quad (3.9)$$

Com intuito de se obter os modos TM e TE das ondas, podemos reescrever as equações de Maxwell da seguinte maneira:

$$\nabla \cdot D = \rho_{ext} \quad (4.0)$$

$$\nabla \cdot B = 0 \quad (4.1)$$

$$\nabla \times E = -\frac{\partial B}{\partial t} \quad (4.2)$$

$$\nabla \times H = j_{ext} + \frac{\partial D}{\partial t} \quad (4.3)$$

Essas equações criam uma relação com os campos macroscópicos, os quais em meios lineares não magnéticos, são descrito como:

- E : Campo elétrico,
- B : Fluxo magnético ($B = \mu_r \mu_0 H$, μ_r representa a permeabilidade relativa),
- D : Campo de deslocamento elétrico (equivalente à densidade de fluxo elétrico, no vácuo. $D = \epsilon_0 \epsilon_r E$),
- H : Campo magnético.

Considerando que permeabilidade relativa é $\mu_r = 1$, a carga externa é $\rho_{ext} = 0$, a densidade de corrente externa é $j = 0$ e a partir de agora para simplificar $\epsilon_r = \epsilon$, a propagação da onda se dá em no eixo x e não há variação espacial no plano x - y , então:

- $\partial/\partial t = -i\omega$; Essa equação indica que há uma dependência harmônica do tempo
- $\partial/\partial x = i\beta$; Essa equação indica que existem ondas se propagando na direção de x , e $\beta = k_x$, que é a constante de propagação,

$$\beta = k_0 \sqrt{\frac{\epsilon_1 \epsilon_2}{\epsilon_1 + \epsilon_2}} \quad (4.4)$$

Onde

- $\partial/\partial y = 0$; Representa a homogeneidade na direção do eixo y

Assumindo as considerações feitas, as equações podem ser descritas como:

$$\begin{aligned} \nabla \times E = -\mu_0 \frac{\partial H}{\partial t} &\Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial E_y}{\partial z} = -i\omega\mu_0 H_x \\ \frac{\partial E_x}{\partial z} - i\beta H_y = i\omega\mu_0 H_y \\ i\beta E_y = i\omega\mu_0 H_z \end{array} \right\} \\ \nabla \times H = \epsilon_0 \epsilon \frac{\partial E}{\partial t} &\Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial H_y}{\partial z} = i\omega\epsilon_0 \epsilon E_x \\ \frac{\partial H_x}{\partial z} - i\beta H_z = -i\omega\epsilon_0 \epsilon E_y \\ i\beta H_y = -i\omega\epsilon_0 \epsilon E_z \end{array} \right\} \end{aligned} \quad (4.5)$$

Os modos TE e TM são modos de polarização da onda eletromagnética, o que define cada uma é as posições dos campos elétrico e magnético em relação ao plano de incidência. No

modo TE o campo elétrico está perpendicular ao plano de incidência já no modo TM é o campo magnético que está no plano de incidência e nunca ambos ocupam a mesma posição ao mesmo tempo, tem-se então a definição para os modos TM, onde os componentes não nulos são E_x, E_z e H_y é possível simplificar a equação da onda, então:

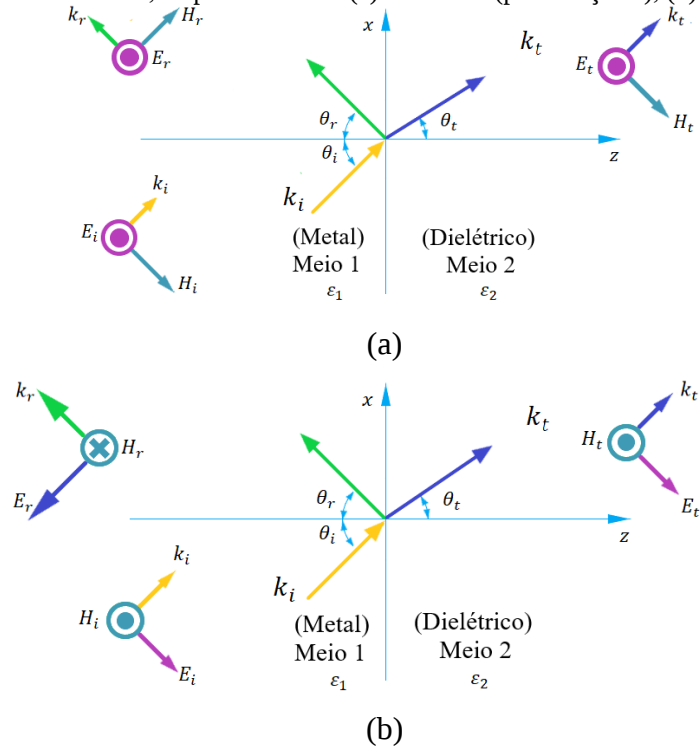
$$\frac{\partial^2 H}{\partial z^2} + (k_0^2 \varepsilon - \beta^2) H_y = 0 \quad (4.6)$$

Seguindo a mesma linha, agora para modos TE, os componentes não nulos são: H_x, H_z e E_y , é obtido então a equação:

$$\frac{\partial^2 E_y}{\partial z^2} + (k_0^2 \varepsilon - \beta^2) E_y = 0 \quad (4.7)$$

Os modos de polarização estão ilustrados na Figura 9. O primeiro caso é quando o campo elétrico, também conhecido como polarização s ou σ , perpendicular ao plano x-y visualmente descrito na Figura 9-a. O segundo caso corresponde a quando o campo magnético (polarização p ou π) for paralelo à interface que é mostrada na Figura 9-b.

Figura 9: Esquema utilizado para obter os coeficientes de reflexão e refração, os índices i, r e t significam a incidência, reflexão e transmissão, respectivamente. (a) Modo TE (polarização s), (b) Modo TM (polarização p)



Fonte: elaborado pelo autor

Conforme pode ser visto na Figura 9, temos que o meio 1 seja um metal de constante dielétrica ε_1 (localizado a partir de $z < 0$) e o meio 2 seja um dielétrico de constante dielétrica ε_2 (localizado a partir de $z > 0$). Deste modo, a interface entre os dois materiais se dá no plano x - y , assim as constantes dielétricas estão em função de z , nessa condição a propagação das ondas são na direção de z , as ondas evanescentes decaem na direção de y e de maneira a dar diferença aos vetores dos componentes de onda paralelos ao eixo z , os vetores tomaram a forma $k_i = k_{z,i}$, sendo $i = 1, 2$. Os modos TE são descritos pelas seguintes equações:

$$\begin{aligned} \text{No dielétrico} &= \left\{ \begin{array}{l} E_y(z) = A e^{i\beta x} e^{-k_2 z} \\ H_x(z) = -iA \frac{1}{\omega \mu_0} k_2 e^{i\beta x} e^{-k_2 z} \\ H_z(z) = A \frac{\beta}{\omega \mu_0} e^{i\beta x} e^{-k_2 z} \end{array} \right\} \\ \text{No metal} &= \left\{ \begin{array}{l} E_y(z) = A e^{i\beta x} e^{k_1 z} \\ H_x(z) = iA \frac{1}{\omega \mu_0} k_1 e^{i\beta x} e^{k_1 z} \\ H_z(z) = A \frac{\beta}{\omega \mu_0} e^{i\beta x} e^{k_1 z} \end{array} \right\} \end{aligned} \quad (4.8)$$

Para respeitar as condições de fronteira os componentes E_y e H_x precisam ser contínuos na interface dos materiais. Isso é satisfeito quando:

$$A(k_1 + k_2) = 0 \quad (4.9)$$

Ou seja, se a soma for maior que zero, implica que a amplitude da onda tem que ser zero ($A = 0$), obrigatoriamente, como consequência não haverá excitação de polaritons, os polaritons serão melhor discutidos no capítulo 3. É necessário destacar que, os polaritons não podem ser excitados pelos modos TE. As equações que descrevem os modos TM, são os seguintes:

$$\text{No dielétrico} = \left\{ \begin{array}{l} H_y(z) = A e^{i\beta x} e^{-k_2 z} \\ E_x(z) = iA \frac{1}{\omega \varepsilon_0 \varepsilon_2} k_2 e^{i\beta x} e^{-k_2 z} \\ E_z(z) = -A \frac{\beta}{\omega \varepsilon_0 \varepsilon_2} e^{i\beta x} e^{-k_2 z} \end{array} \right\} \quad (5.0)$$

$$No\ metal = \left\{ \begin{array}{l} H_y(z) = Ae^{i\beta x} e^{k_1 z} \\ E_x(z) = -iA \frac{1}{\omega \varepsilon_0 \varepsilon_1} k_1 e^{i\beta x} e^{k_1 z} \\ E_z(z) = -A \frac{\beta}{\omega \varepsilon_0 \varepsilon_1} e^{i\beta x} e^{k_1 z} \end{array} \right\}$$

Para satisfazer as condições de continuidade na fronteira dos materiais os componentes E_z e H_y precisam satisfazer a seguinte equação:

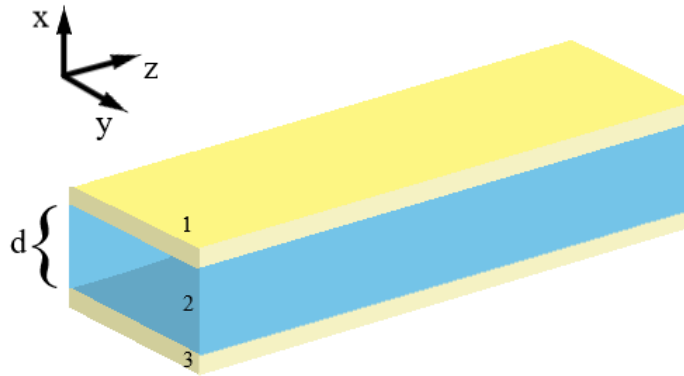
$$\frac{k_2}{k_1} = - \frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1} \quad (5.1)$$

A equação (5.1) diz que como a parte real de k_z das equações de (5.0) é maior que zero então os valores positivos da constante dielétrica ε_2 precisam de a parte real de ε_1 seja menor que zero. Isso permite dizer que as ondas de superfície podem apenas se propagar na fronteira de dois meios tendo os sinais reais de ε opostos. A definição da relação de dispersão para ondas plasmônica de superfícies no modo TM é dada por β da equação (4.4)

2.2. GUIAS DE ONDAS PLANARES

O objetivo dos guias de onda é o de manter presa uma onda no seu interior, com o intuito de transmiti-la até o outro lado do guia. Para isso existem alguns tipos de guia os quais podem variar de acordo com sua geometria e seus meios constitutivos, no caso da geometria existem três tipos básicos que se destacam, eles são os planares, os retangulares e os de secção circular. Será feita uma breve análise sobre eles nesta e nas duas seções seguintes. Parte da metodologia utilizada foi baseada no trabalho de RAMO; WHINNERY; DUZER (2008) e MARCUVITZ (1951).

Os guias de ondas planares são guias de onda com geometria planar, que guiam um feixe de luz em apenas uma dimensão ao longo do eixo z. Um guia desse tipo é constituído de de três dielétricos. O meio central pode ser constituído de um dielétrico como o ar, o meio inferior é conhecido como substrato e o superior de cobertura, conforme ilustrado na Figura 10.

Figura 10: Geometria do guia de placas paralelas

Fonte: (EDUARDO FONTANA, [s.d.])

2.2.1. MODO TE

Admitindo que a propagação da onda esteja na direção de z (Figura 1010) e que na direção de y os campos não têm variação, as equações para os guias apresentados nesse trabalho podem ser melhor . As ondas TE são aquelas em que o $E_z = 0$ e $H_z \neq 0$, ou seja, o que existe é apenas o campo magnético na direção de propagação. Pelo fato de a interface dos meios estar no plano x - y , as constantes dielétricas se encontram em função do eixo z . Considerando o campo $\vec{H}$ se propagando na direção de x pode-se realizar uma transformação tornando o problema bidimensional da seguinte forma:

$$\vec{H}(x, y, z) = H_z e^{ik_x x} \quad (5.2)$$

Utilizando os componentes não nulos H_x , H_z e E_y na determinação da equação (4.8) e reduzindo o operador Laplaciano para segunda derivada na direção de z , tem-se então a equação (5.3), conhecida como equação de Helmholtz:

$$\frac{\partial^2 H_z}{\partial x^2} = (k_0^2 - \beta^2) H_z \quad (5.3)$$

Onde $q^2 = (k_0^2 - \beta^2)$.

Agora uma análise pode ser feita para as componentes dos campos no modo TE em função do valor de x . As soluções podem ser escritas em termos de senóides ou exponenciais, deste modo, a continuidade tangencial do campo H_z necessita que este seja contínuo se $x = 0$ e $x = d$, logo:

$$\begin{aligned}
H_z &= B \cos\left(\frac{n\pi x}{d}\right) \\
H_x &= -\frac{1}{j\omega\mu} \frac{\partial H_z}{\partial x} = \frac{q}{j\omega\mu} A e^{-qx} = \frac{\beta}{q} B \sin\left(\frac{n\pi x}{d}\right) \\
E_y &= \frac{j\omega\mu}{q^2} \frac{\partial H_z}{\partial x} = -\frac{j\omega\mu}{q} B \sin\left(\frac{n\pi x}{d}\right)
\end{aligned} \tag{5.4}$$

$$E_x(0) = E_x(d) = 0$$

$$H_y = 0$$

Onde $\mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{H}$.

2.2.2. MODO TM

Analogamente aos modos TE, assumindo que na direção de y não há variações nos campos, os modos TM são aqueles em que $H_z = 0$ com $E_z \neq 0$, ou seja, o que existe é apenas o campo elétrico na direção de propagação, sendo assim a equação da onda para esse modo irá apresentar a seguinte configuração:

$$\frac{\partial^2 E_z}{\partial x^2} = (k_0^2 - \beta^2) E_z \tag{5.5}$$

Temos que quando $x = 0$ e $x = d$ nessas condições a componente do campo elétrico E_z é nula. Em vista disso, a escrita da equação entra na forma de senóides que é descrita a seguir:

$$E_z = A \sin(qx) \tag{5.6}$$

Sabendo que o campo tangencial à superfície é nulo, então:

$$qd = \pi n \tag{5.7}$$

Feitas as devidas relações, as equações dos componentes de campo magnético e elétrico podem ser obtidas com a pequena adição de ε :

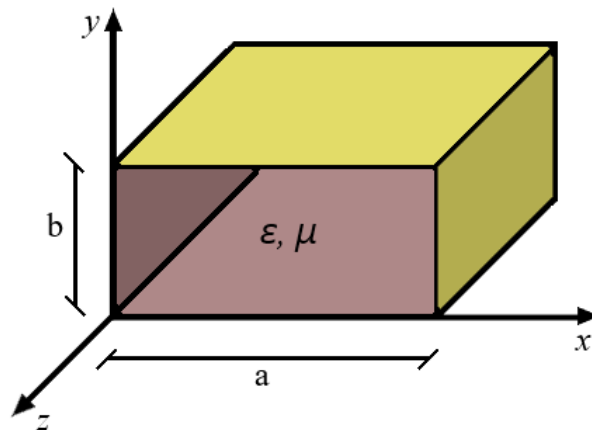
$$\begin{aligned}
E_z &= A \sin\left(\frac{n\pi x}{d}\right) \\
E_x &= -\frac{\beta}{q^2} \frac{\partial E_z}{\partial x} = -\frac{\beta}{q} A \cos\left(\frac{n\pi x}{d}\right) \\
H_y &= -\frac{j\varepsilon\omega}{q^2} \frac{\partial E_z}{\partial x} = -\frac{j\varepsilon\omega}{q} A \cos\left(\frac{n\pi x}{d}\right) \\
H_x(0) &= H_x(d) = 0 \\
E_y &= 0
\end{aligned} \tag{5.8}$$

Para se obter a frequência de corte, pode-se considerar que $\beta = 0$, isto é, não há propagação. Por consequência os valores de q serão alterados $q^2 = (k_0^2 - 0^2)$, utilizando a equação (3.4) juntamente com a equação (5.8), obtêm-se a equação que define a frequência de corte para ambos modos:

$$f_c = \frac{n}{d} \frac{1}{2\sqrt{\varepsilon\mu}} \tag{5.9}$$

2.3. GUIAS DE ONDAS RETANGULARES

Figura 11: Geometria do guia de ondas retangular



Fonte: (EDUARDO FONTANA, [s.d.])

Para o guia de ondas retangular, como o da Figura 1111, iremos considerar que um guia metálico de largura 'a' e altura 'b', onde $0 \leq x \leq a$ e $0 \leq y \leq b$, sendo ($a > b$). O

preenchimento do interior é feito por um material de constantes ϵ e μ que tem comprimento na direção z infinito e as paredes são perfeitamente condutoras, isto é, o campo elétrico tangencial às quatro paredes é considerado nulo, em consequência disso não há perdas. A onda está se propagando na direção de z , sendo $z > 0$.

2.3.1. MODO TE

Considerando a direção de propagação ($z > 0$), para os modos TE tem-se que o campo elétrico na direção de z é zero $E_z = 0$ e para o campo magnético na direção de propagação sendo diferente de zero $H_z \neq 0$. Para encontrar as outras componentes inicialmente a equação bidimensional de Helmholtz deve ser resolvida para H_z .

$$\frac{\partial^2 H_z}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 H_z}{\partial y^2} + k_c^2 H_z = 0 \quad (6.0)$$

Onde $k_c^2 = \beta^2 + \omega^2 \mu \epsilon$. Admitindo que a equação 6.1 seja separável, ou seja, que ela possa ser dividida em funções. Tem-se:

$$H_z = f(x)g(y) \quad (6.1)$$

Utilizando a equação (6.2) em (6.1), obtêm-se o seguinte:

$$\frac{1}{f} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \frac{1}{g} \frac{\partial^2 g}{\partial y^2} + k_c^2 = 0 \quad (6.2)$$

O obtido é uma soma de funções com variáveis independentes, visto que f depende apenas de 'x' e g apenas de 'y', os dois termos iniciais são constantes aqui serão descritos como k_x e k_y . Portanto pode haver uma separação das funções na forma:

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + k_x^2 f = 0 \quad (6.3)$$

$$\frac{\partial^2 g}{\partial y^2} + k_y^2 g = 0 \quad (6.4)$$

As constantes de separação k_x e k_y estão relacionadas à k_c (número de onda de corte) da seguinte maneira:

$$k_x^2 + k_y^2 = k_c^2 \quad (6.5)$$

A solução das equações (6.4) e (6.5) podem ser escritas na forma geral para o campo magnético:

$$H_z(x, y) = \left(A \cos(k_x x) + B \sin(k_x x) \right) \left(C \cos(k_y y) + D \sin(k_y y) \right) \quad (6.6)$$

Na equação (6.7) a primeira parte é $f(x)$ e a segunda $g(y)$. Sabendo que E_x e E_y são dependentes de $\partial H_z / \partial y$ e $\partial H_z / \partial x$, respectivamente, obtêm-se:

$$\text{se } y = 0 \text{ e } y = b, \text{ logo } E_x = 0, \frac{\partial H_z}{\partial y} = 0 \quad (6.7)$$

$$\text{se } x = 0 \text{ e } x = a, \text{ logo } E_y = 0, \frac{\partial H_z}{\partial x} = 0 \quad (6.8)$$

Para aplicar as condições de contorno, primeiramente deriva-se H_z na equação (6.7) em relação à x e y , como resultado tem-se:

$$\frac{\partial H_z}{\partial x} = [C \cos(k_y y) + D \sin(k_y y)] [-A k_x \sin(k_x x) + B k_x \cos(k_x x)] \quad (6.9)$$

$$\frac{\partial H_z}{\partial y} = [A \cos(k_x x) + B \sin(k_x x)] [-C k_y \sin(k_y y) + D k_y \cos(k_y y)] \quad (7.0)$$

Agora se aplica as condições de fronteira (6.8) e (6.9) as equações (7.0) e (7.1), tem-se que:

$$\left(\frac{\partial H_z}{\partial x} \right)_{x=0} = 0 = [C \cos(k_y y) + D \sin(k_y y)] [-A k_x \sin(k_x 0) + B k_x \cos(k_x 0)] \quad (7.1)$$

$$\rightarrow B = 0$$

$$\left(\frac{\partial H_z}{\partial y} \right)_{y=0} = 0 = [A \cos(k_x x) + B \sin(k_x x)] [-C k_y \sin(k_y 0) + D k_y \cos(k_y 0)] \quad (7.2)$$

$$\rightarrow D = 0$$

Com base nisso, a equação (6.7) é reescrita da seguinte forma:

$$H_z = H_0 \cos(k_x x) \cos(k_y y) \quad (7.3)$$

E quando,

$$\left(\frac{\partial H_z}{\partial x} \right)_{x=a} = 0 \text{ e } \left(\frac{\partial H_z}{\partial y} \right)_{y=b} = 0 \quad (7.4)$$

Obtêm-se as constantes de separação k_x e k_y :

$$k_x = \frac{m\pi}{a} \quad (7.5)$$

$$k_y = \frac{n\pi}{b} \quad (7.6)$$

Para m e $n = 0, 1, 2, 3, 4, \dots$, estes índices indicarão o número do modo, por exemplo, TM_{mn} , que é uma configuração de $m \times n$ modos.

A equação (7.4) assume uma nova forma:

$$H_z = H_0 \cos\left(\frac{m\pi x}{a}\right) \cos\left(\frac{n\pi y}{b}\right) \quad (7.7)$$

Os componentes do campo eletromagnético para os modos TE atuando no guia retangular são:

$$H_z = A \cos\left(\frac{m\pi x}{a}\right) \cos\left(\frac{n\pi y}{b}\right) e^{-j\beta z} \quad (7.8)$$

$$E_x = \frac{j\omega\mu n\pi}{k_c^2} \frac{A}{b} \cos\left(\frac{m\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{n\pi y}{b}\right) e^{-j\beta z} \quad (7.9)$$

$$E_y = \frac{-j\omega\mu m\pi}{k_c^2} \frac{A}{a} \sin\left(\frac{m\pi x}{a}\right) \cos\left(\frac{n\pi y}{b}\right) e^{-j\beta z} \quad (8.0)$$

$$H_x = \frac{j\beta m\pi}{k_c^2} \frac{A}{a} \sin\left(\frac{m\pi x}{a}\right) \cos\left(\frac{n\pi y}{b}\right) e^{-j\beta z} \quad (8.1)$$

$$H_y = \frac{j\beta n\pi}{k_c^2} \frac{A}{b} \cos\left(\frac{m\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{n\pi y}{b}\right) e^{-j\beta z} \quad (8.2)$$

Onde A é a amplitude.

2.3.2. MODO TM

O modo TM tem como componente na direção de propagação o campo elétrico $E_z \neq 0$ e o campo magnético nessa mesma direção é nulo ($H_z = 0$). Para esse caso será utilizado os mesmos procedimentos na obtenção das componentes do modo TE, entretanto será mais direto.

$$\frac{\partial^2 E_z}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 E_z}{\partial y^2} + k_c^2 E_z = 0 \quad (8.3)$$

Logo a solução para essa equação é:

$$E_z = E_0 \sin\left(\frac{m\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{n\pi y}{b}\right) e^{-j\beta z} \quad (8.4)$$

Os componentes do campo eletromagnético para os modos TM atuando no guia retangular são:

$$E_z = B \sin\left(\frac{m\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{n\pi y}{b}\right) e^{-j\beta z} \quad (8.5)$$

$$E_x = -\frac{j\beta}{k_c^2} \frac{m\pi}{a} B \cos\left(\frac{m\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{n\pi y}{b}\right) e^{-j\beta z} \quad (8.6)$$

$$E_y = \frac{j\beta}{k_c^2} \frac{n\pi}{b} B \sin\left(\frac{m\pi x}{a}\right) \cos\left(\frac{n\pi y}{b}\right) e^{-j\beta z} \quad (8.7)$$

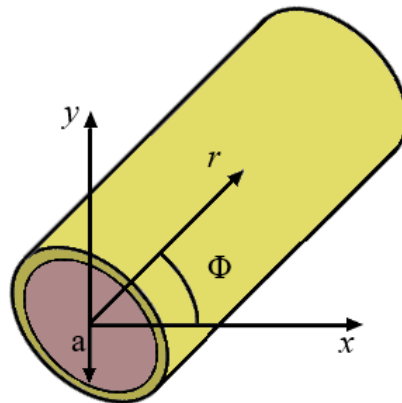
$$H_x = \frac{j\omega\epsilon}{k_c^2} \frac{n\pi}{b} B \sin\left(\frac{m\pi x}{a}\right) \cos\left(\frac{n\pi y}{b}\right) e^{-j\beta z} \quad (8.8)$$

$$H_y = -\frac{j\omega\epsilon}{k_c^2} \frac{m\pi}{a} B \cos\left(\frac{m\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{n\pi y}{b}\right) e^{-j\beta z} \quad (8.9)$$

Onde B é a amplitude.

2.4. GUIAS DE ONDAS CIRCULARES

Figura 12: Geometria do guia de ondas circular



Fonte: (EDUARDO FONTANA, [s.d.])

Assim como nas outras geometrias, o modo TE tem o campo elétrico na direção de z igual a $(H_z = 0)$, na Figura 1212 o r indica a distância do centro do sistema de coordenadas até o ponto, φ indica o ângulo de projeção no ângulo de x - y , a partir do eixo de x e a representa o raio interno do tubo. Para coordenadas cilíndricas a equação é dada por:

$$\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \cdot \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + k_c^2 \quad (9.0)$$

Os modos de propagação TE e TM para coordenadas cilíndricas tem as seguintes equações:

$$E_z = 0 \text{ e } H_z \neq 0 \text{ (Ondas TE)} \quad (9.1)$$

$$H_z = 0 \text{ e } E_z \neq 0 \text{ (Ondas TM)} \quad (9.2)$$

Os componentes transversais em termos de H_z e E_z (componentes longitudinais) nas direções de φ e r são:

$$E_r = -\frac{j}{k_c^2} \left(\beta \frac{\partial E_z}{\partial r} + \frac{\omega \mu}{r} \frac{\partial H_z}{\partial \varphi} \right) \quad (9.3)$$

$$E_\varphi = -\frac{j}{k_c^2} \left(\frac{\beta}{r} \frac{\partial E_z}{\partial \varphi} - \omega \mu \frac{\partial H_z}{\partial r} \right) \quad (9.4)$$

$$H_r = \frac{j}{k_c^2} \left(\frac{\omega \varepsilon}{r} \frac{\partial E_z}{\partial \varphi} - \beta \frac{\partial H_z}{\partial r} \right) \quad (9.5)$$

$$H_\varphi = -\frac{j}{k_c^2} \left(\omega \varepsilon \frac{\partial E_z}{\partial r} - \frac{\beta}{r} \frac{\partial H_z}{\partial \varphi} \right) \quad (9.6)$$

onde $k_c^2 = k^2 - \beta^2$

Para a determinação dos campos de H e E é necessário antes considerar um meio dielétrico sem perdas, sem fontes de campos (ρ e J), linear, isotrópico e homogêneo. Então a equação para E_z em coordenadas cilíndricas pode ser expressa por:

$$\frac{\partial^2 E_z}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial E_z}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \cdot \frac{\partial^2 E_z}{\partial \varphi^2} + k_c^2 E_z = 0 \quad (9.7)$$

A equação para H_z é semelhante à equação (9.7). Pela solução de variáveis encontra-se a solução para equação (9.7) da seguinte forma:

$$E_z(r, \varphi, z) = R(r)F(\varphi)Z(z) \quad Z(z) = e^{-j\beta z} \quad (9.8)$$

Utilizando a equação (9.8) em (9.7), tem-se:

$$FRZ + \frac{1}{r} R'FZ + \frac{R}{r^2} Fk_c^2 RFZ = 0 \quad (9.9)$$

$$r^2 \frac{R''}{R} + r \frac{R'}{R} + \frac{F''}{F} = -k_c^2 r^2 \quad (10.0)$$

$$R'' + \frac{1}{r}R' + \left(k_c^2 - \frac{n^2}{r^2}\right)R = 0 \quad (10.1)$$

$$F'' + n^2F = 0 \quad (10.2)$$

A equação (10.1) é conhecida como equação ordinária de Bessel. Obtêm-se como solução para equação (10.2) e (10.1), respectivamente, as equações a seguir:

$$F(\varphi) = A\cos(n\varphi) + B\sin(n\varphi) \quad (10.3)$$

$$R(r) = CJ_n(k_cr) + DN_n(k_cr) \quad (10.4)$$

onde A, B, C, D são constantes que estão relacionadas as condições de contorno, J_n é a função ordinária de Bessel de ordem n e N_n é a função ordinária de Neuman de ordem n . Os campos devem ser infinitos para $\beta = 0 \rightarrow D = 0$, portanto pode ser feita a substituição de (10.3) e (10.4) em (9.8), tendo como resultado o que vem a seguir:

$$E_z(r, \varphi, z) = (A\sin(n\varphi) + B\cos(n\varphi))J_n(k_cr)e^{-j\beta z} \quad (10.5)$$

O mesmo procedimento é válido para H_z .

$$H_z(r, \varphi, z) = (C\sin(n\varphi) + D\cos(n\varphi))J_n(k_cr)e^{-j\beta z} \quad (10.6)$$

2.4.1. MODO TE

Do mesmo modo que aconteceu no guia retangular, a componente de campo elétrico na direção de propagação é zero ($E_z = 0$), assim a componente nessa direção que é diferente de zero é o campo magnético ($H_z \neq 0$). A condição de contorno define que o campo elétrico tangencial à parede metálica do guia de ondas é nulo, ou seja, $E_\varphi = 0$ em $r = a$.

$$E_\varphi = \frac{j\omega\mu C_n}{k_c} J'_n(k_ca)\cos(n\varphi)e^{-j\beta z} \quad (10.7)$$

aqui $J'_n(k_ca) = \frac{\partial J_n(k_cr)}{\partial(k_cr)}$. Têm-se as condições de contorno:

$$J'_n(k_ca) = 0 \quad (10.8)$$

As raízes da equação (10.8) são dadas por p_{nl} , sendo p'_{nl} a l -ésima raiz de $J'_n(ak_c)$, segue abaixo as raízes de p'_{nl} :

Tabela 1: Raízes de p_{nl} para o modo TE

n	p'_{n1}	p'_{n2}	p'_{n3}
0	3,832	7,016	10,174
1	1,841	5,331	8,536
2	3,054	6,706	9,970

Considerando que o cilindro é preenchido por ar, a frequência de corte é dada por:

$$p_{nl} = k_c a \rightarrow k_c = \frac{p_{nl}}{a} = \frac{2\pi}{\lambda_c} = \frac{\omega_c}{c}, \omega = \left(\frac{p_{nl}}{a}\right) c \quad (10.9)$$

$$\lambda_c = \frac{2\pi a}{p_{ln}} \quad (11.0)$$

Substituindo (10.6) de (9.3) até (9.6) tem-se, portanto as componentes para a onda no modo TE no guia de ondas circular ($E_z = 0$):

$$H_z = J(k_c r) C \sin(n\varphi) e^{-j\beta z} \quad (11.1)$$

$$H_r = -\frac{j\beta}{k_c} J'(k_c r) C \sin(n\varphi) e^{-j\beta z} \quad (11.2)$$

$$H_\varphi = -\frac{j\beta n}{k_c r} J(k_c r) C \cos(n\varphi) e^{-j\beta z} \quad (11.3)$$

$$E_\rho = -\frac{j\omega\mu n}{k_c^2 r} J(k_c r) C \cos(n\varphi) e^{-j\beta z} \quad (11.4)$$

$$E_\varphi = -\frac{j\omega\mu}{k_c^2} J'(k_c r) C \sin(n\varphi) e^{-j\beta z} \quad (11.5)$$

2.4.2. MODO TM

No modo TM a componente de campo magnético na direção de propagação é zero ($H_z = 0$), assim a componente nessa direção que é diferente de zero é o campo elétrico ($E_z \neq 0$). A condição de contorno define que o campo elétrico tangencial à parede metálica do guia de ondas é nulo, ou seja, $E_z = 0$ em $r = a$.

Sendo p_{nl} a l -ésima raiz de $J_n(ak_c)$, segue abaixo as raízes de p_{nl} :

Tabela 2: Raízes de p_{nl} para o modo TM

n	p_{n1}	p_{n2}	p_{n3}
0	2,405	5,520	8,654
1	3,832	7,016	10,174
2	5,135	8,417	11,620

Substituindo (10.5) de (9.3) até (9.6) tem-se, portanto as componentes para a onda no modo TM no guia de ondas circular:

$$E_z = J(k_c r) A \sin(n\varphi) e^{-j\beta z} \quad (11.6)$$

$$H_r = -j \frac{\omega \varepsilon n}{k_c^2 r} J(k_c r) A \cos(n\varphi) e^{-j\beta z} \quad (11.7)$$

$$H_\varphi = -j \frac{\omega \varepsilon n}{k_c^2} J'(k_c r) A \sin(n\varphi) e^{-j\beta z} \quad (11.8)$$

$$E_r = -j \frac{\beta}{k_c^2} J(k_c r) A \cos(n\varphi) e^{-j\beta z} \quad (11.9)$$

$$E_\varphi = -j \frac{\beta}{k_c^2 r} J(k_c r) A \sin(n\varphi) e^{-j\beta z} \quad (12.0)$$

As equações para os modos TE e TM nos guias de geometria básica, como os apresentados acima e outros tipos de geometria podem ser encontradas em (EDUARDO FONTANA, [s.d.]) e (RAMO; WHINNERY; DUZER, 2008).

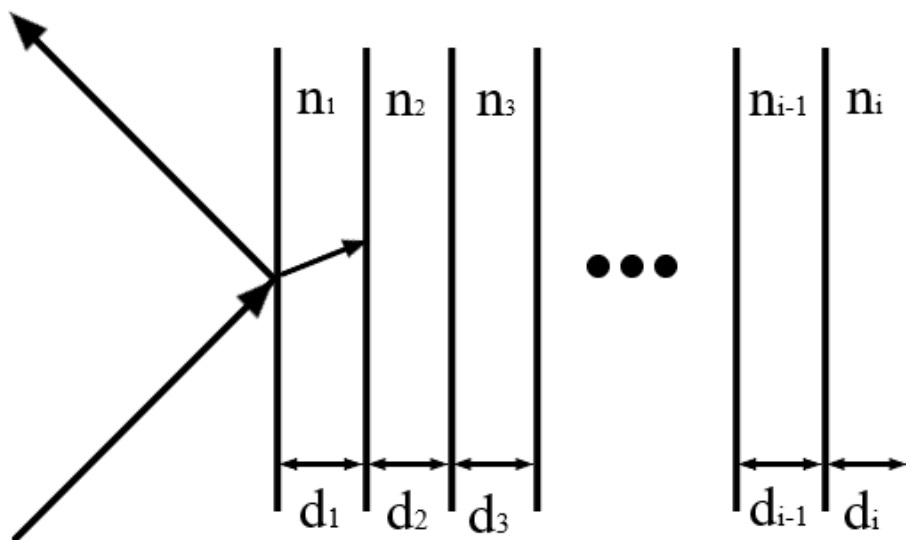
2.5. MÉTODO DA MATRIZ DE TRANSFERÊNCIA (TMM)

As simulações de plasmons de superfície foram conduzidas se utilizando do método da matriz de transferência (TMM do inglês, *Transfer Matrix Method*), que é uma das técnicas matemáticas mais usadas no estudo da transmissão de ondas eletromagnéticas, através de estruturas de uma dimensão, essa técnica permite os cálculos de reflexão, transmissão e

espectros de emissão, além de simplificar avaliações dos modos guiados e diagramas de banda para estruturas multicamada (PÉREZ, 2008).

Uma vez feitas as descrições das equações de Maxwell, pode-se prosseguir para a descrição do problema da propagação de ondas eletromagnéticas em meios estratificados, ou seja, meios que possuem sucessões de camadas de diferentes materiais que é representado na Figura 13. O propósito dessa seção é detalhar, por meio de equações, a reflexão do SPR na fronteira dos meios. Para isso foi utilizado o método da matriz de transferência, no qual foi baseado nos trabalhos de KLEIN; FURTAK (1986), KATSIDIS; SIAPKAS (2002) e BORN; WOLF (2013).

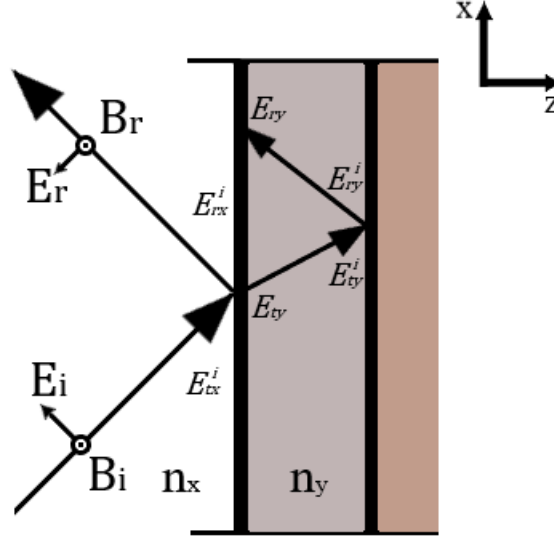
Figura 13: Esquemático usado para o método da matriz de transferência. Neste modelo um feixe se propaga da esquerda para a direita e cada meio tem seu respectivo valor de refração e tamanho representados, respectivamente, por n e d



Fonte: (KATSIDIS; SIAPKAS, 2002).

Inicialmente, para obter os valores de refletância é necessário fazer relações entre o feixe incidente, o refletido e o refratado, isso permitirá saber, por exemplo, se em um sistema o somatório das partes no total é 1, o quanto cada parte detém. A partir dessa relação surgem as equações que posteriormente serão rearranjadas em forma uma matriz. A transição do feixe através das camadas produzirá uma matriz para cada, isso significa que ao final é necessário juntar todas para poder visualizar o resultado, então para isso teremos o produtório de matrizes.

Figura 14: Um feixe de modo TM atravessa as camadas n_x e n_y da esquerda para a direita.



Fonte: elaborado pelo autor

A relação agora pode ser feita com base no que mostra a Figura 1414, que é semelhante à Figura 9-b, com o campo B tendo apenas componente no eixo de y . Os campos incidente, refletido e transmitido, pela condição de continuidade dos componentes tangenciais ao longo da interface em z , podem ser equacionados da seguinte forma:

$$E_{tx}^i \tau_{xy} + E_{rx}^i \rho_{yx} = E_{ty} \quad (12.1)$$

Onde τ_{xy} e ρ_{yx} são respectivamente os coeficientes de transmissão e reflexão nos meios x e y , e são baseados nas equações de Fresnel, os quais são descritos da seguinte maneira para o modo TM:

$$\tau_{xy} = \frac{2(\tilde{n}_x/\tilde{n}_y)}{1+b} = \frac{2n\cos\theta}{n^2\cos\theta + \sqrt{n^2 - \sin^2\theta}} \quad (12.2)$$

$$\rho_{yx} = \frac{1-b}{1+b} = \frac{-n^2\cos\theta + \sqrt{n^2 - \sin^2\theta}}{n^2\cos\theta + \sqrt{n^2 - \sin^2\theta}} \quad (12.3)$$

Onde

$$b = \left(\frac{\tilde{n}_x}{\tilde{n}_y}\right)^2 \left(\frac{k_{z,y}}{k_{z,x}}\right) \quad (12.4)$$

Nas equações há o parâmetro $\tilde{n}$ que representa o índice de refração complexo dos meios, que já foi descrito neste trabalho na equação (3.5) e k é o vetor de onda no meio correspondente. A representação do feixe refletido no meio x é dado por:

$$E_{rx}^i = E_{ry}\tau_{yx} + E_{tx}\rho_{xy} \quad (12.5)$$

Pode-se proceder para uma simplificação das equações (12.1) e (12.5), colocando em evidência o termo $E_{tx}^i\tau_{xy}$, resultando em:

$$E_{rx}^i = E_{ty}\frac{\rho_{xy}}{\tau_{xy}} + E_{ry}\left(\frac{\tau_{yx}\tau_{xy} - \rho_{yx}\rho_{xy}}{\tau_{xy}}\right) \quad (12.6)$$

$$E_{tx}^i = E_{ty}\left(\frac{\tau_{yx}\tau_{xy} - \rho_{yx}\rho_{xy}}{\tau_{xy}}\right) + E_{ry}\frac{\rho_{xy}}{\tau_{xy}} \quad (12.7)$$

Considerando as relações dos coeficientes $\rho_{xy} = -\rho_{yx}$ e $\tau_{yx}\tau_{xy} - \rho_{xy}^2 = 1$, então as equações (12.6) e (12.7) podem ser reduzida a:

$$E_{rx}^i = E_{ty}\frac{\rho_{xy}}{\tau_{xy}} + E_{ry}\left(\frac{1}{\tau_{xy}}\right) \quad (12.8)$$

$$E_{tx}^i = E_{ty}\left(\frac{1}{\tau_{xy}}\right) + E_{ry}\frac{\rho_{xy}}{\tau_{xy}} \quad (12.9)$$

O termo $1/\tau_{xy}$ é repetido nas equações, deste modo esse termo pode ser colocado em evidência e assim ser feita a transformação das equações em uma matriz 2x2 que é denominada na literatura como matriz dinâmica, o resultado da transformação é o seguinte:

$$\begin{pmatrix} E_{rx}^i \\ E_{tx}^i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ \tau_{xy} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & \rho_{xy} \\ \rho_{xy} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_{ry} \\ E_{ty} \end{pmatrix} = D_{l-1} \begin{pmatrix} E_{ry} \\ E_{ty} \end{pmatrix} \quad (13.0)$$

Outra matriz importante que fará parte da solução é a matriz de propagação descrita como:

$$P_l \begin{pmatrix} E_{ry} \\ E_{ty} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{-i\beta y} & 0 \\ 0 & e^{-i\beta y} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_{ry} \\ E_{ty} \end{pmatrix} \quad (13.1)$$

onde

$$\beta_y = \frac{2\pi}{\lambda} n_y \cdot d_y \cdot \cos(\theta_y) \quad (13.2)$$

O fator de fase β_y (fase da onda) utiliza n_y e d_y que é o índice de refração e espessura da camada. Para um sistema de N camadas e N+1 interfaces as matrizes tomam a seguinte forma:

$$\begin{pmatrix} E_{rx}^i \\ E_{tx}^i \end{pmatrix} = D_0^{-1} \left(\prod_{l=1}^N D_l P_l D_l^{-1} \right) D_{N+1} \begin{pmatrix} E_{i+1} \\ E_{i+1} \end{pmatrix} \quad (13.3)$$

Logo, tem-se uma matriz de transferência resultante 2x2:

$$= \begin{bmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} E_{i+1} \\ E_{i+1} \end{pmatrix} \quad (13.4)$$

Para se obter os valores de refletância e transmitância é necessária a realização de simulações com os valores de índices de refração, deste modo obtêm-se:

$$t = \left| \frac{1}{M_{22}} \right|^2 \quad (13.5)$$

$$r = \left| \frac{M_{12}}{M_{22}} \right|^2 \quad (13.6)$$

Para avaliação da sensibilidade S que é a métrica para dizer o quanto a variação é boa ou ruim. Para isso é necessário ter a razão da variação do ângulo de incidência ($\Delta\theta_{SPR}$) pela variação do índice de refração do meio de detecção, para as simulações este trabalho utilizou uma variação de (Δn_s) = 0,005, a grandeza resultante será denominada de sensibilidade (S) e é dada em graus/RIU (*Refractive Index Unit*).

$$S = \frac{\Delta\theta}{\Delta n_s} \quad (13.7)$$

E na avaliação da precisão foi utilizado a métrica FWHM (do inglês, *full width at half maximum*), que está relacionado a quanto tempo um biossensor leva para ter uma reposta adequada. O FWHM utiliza a meia altura da curva de SPR para tomar a diferença entre dois pontos naquela altura e em seguida há a divisão por 1 do FWHM para normalização. A precisão é representada por (P), a unidade é da forma graus^{-1} e a equação é descrita da seguinte forma:

$$P = \frac{1}{FWHM} \quad (13.8)$$

O capítulo 2 tratou de mostrar, através de cálculos, como agem os campos nos principais e mais básicos guias de ondas e também mostra o método da matriz e equações utilizadas para modelagem.

Capítulo 3

3. BIOSSENSORES

Segundo THÉVENOT et al. (2001) biossensor é um dispositivo híbrido que combina técnicas físicas e químicas para aferir de forma quantitativa e seletiva alterações bioquímicas específicas, pela adesão de espécies de interesse à camada de reconhecimento biomolecular.

Os biossensores movem uma grande variedade de áreas e profissionais; é possível verificar a existência de pesquisas nos mais diversos jornais científicos e revistas, desde meados da década de 80, essa multidisciplinaridade permite uma ascendência constante no mercado de sensores e isso se reflete no meio comercial com a publicação de várias patentes e uma expansão em termos de comércio, que é resultado dos investimentos milionários no ramo (ANDRADE, 2006).

Uma das temáticas que tem se popularizado nos últimos anos juntamente com os biossensores é a Internet das Coisas (Internet of Things - IoT), pois ela entra nesse contexto justamente visando o desenvolvimento de dispositivos que poderão monitorar de forma autônoma a saúde de pessoas e animais, o meio ambiente, os alimentos e outras diversas aplicações que surgem diariamente.

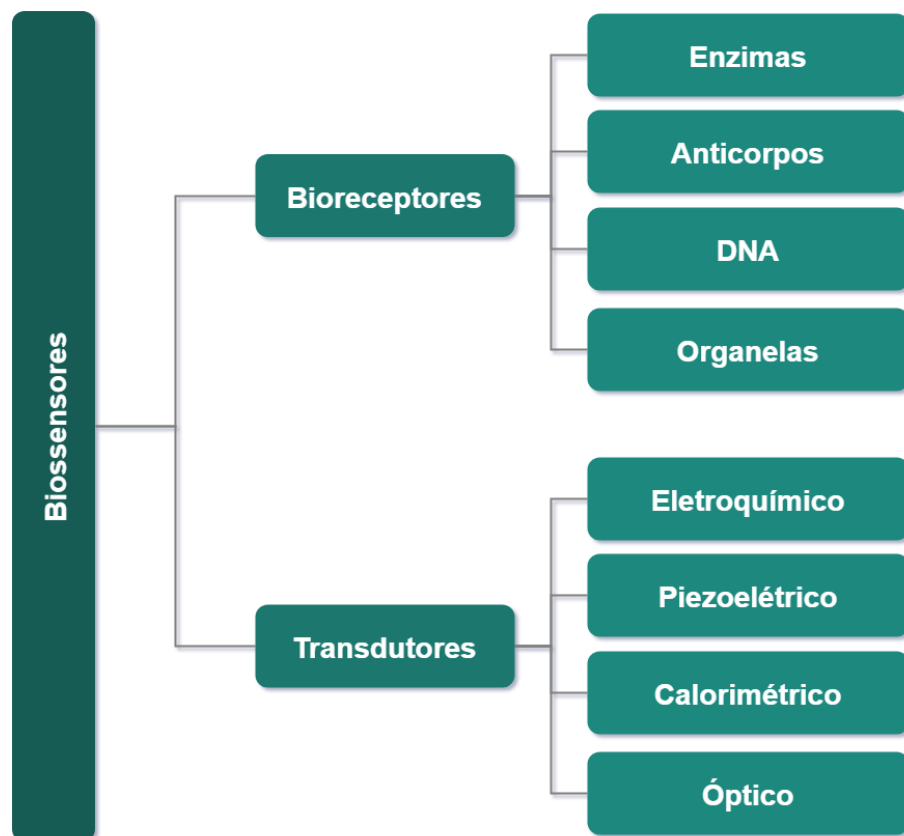
3.1. TIPOS DE BIOSSENSORES

Os biossensores consistem de três partes: elemento biológico sensível (biorreceptores), transdutor e elemento detector. O elemento biológico sensível é referente à parte que entrará em contato com o analito de interesse e produzirá um sinal, o transdutor por sua vez atua na forma de um conversor/intermediador, conversor porque age na transformação dos sinais biológicos em sinais elétricos e na forma de um intermediador pelo motivo de estar e ser o comunicador entre o que acontece na parte biológica para a parte de processamento (circuitos-elétricos) (ALI et al., 2017).

Segundo as recomendações das divisões da União Internacional de Química Pura e Aplicada (IUPAC), essas divisões são: Físico-Química (Comissão I.7 sobre Química Biofísica) e a Química Analítica (Comissão V.5 sobre Química Eletroanalítica). As

definições, classificações e nomenclaturas para biossensores eletroquímicos, podem ser extendidas para abranger outros tipos de biossensores. A classificação de biossensores pode ser feita de duas formas, a primeira é pela especificidade biológica, que é a habilidade que as biomoléculas têm de identificar suas contrapartes correspondentes para se combinar, a segunda forma de se classificar é pelo modo de transdução do sinal físico-químico, ou, alternativamente, levando-se em conta que é possível haver a integração entre o elemento transdutor e a parte de reconhecimento biológico, a combinação em série destes elementos também permite que tenham classificação e representação das classificações que podem ser vistas na Figura 1515 (THÉVENOT et al., 2001).

Figura 15: Classificação dos biossensores



Fonte: (ISAHGE et al., 2016)

3.1.1. BIORRECEPTORES

Dentro da classe de biorreceptores os biossensores podem ser classificados de duas formas, elas podem ser: dispositivos biocatalíticos ou dispositivos de bioafinidade (WANG, 2000). Os materiais utilizados na composição dos biorreceptores variam de acordo com o

reconhecimento e interação com o analito em questão, alguns dos materiais biológicos podem ser exemplificados como: tecidos, microrganismos, organelas, células receptoras, enzimas, anticorpos, ácidos nucleicos, receptores sintéticos, etc. (MEHRVAR et al., 2000).

3.1.1.1. RECONHECIMENTO BIOCATALÍTICO

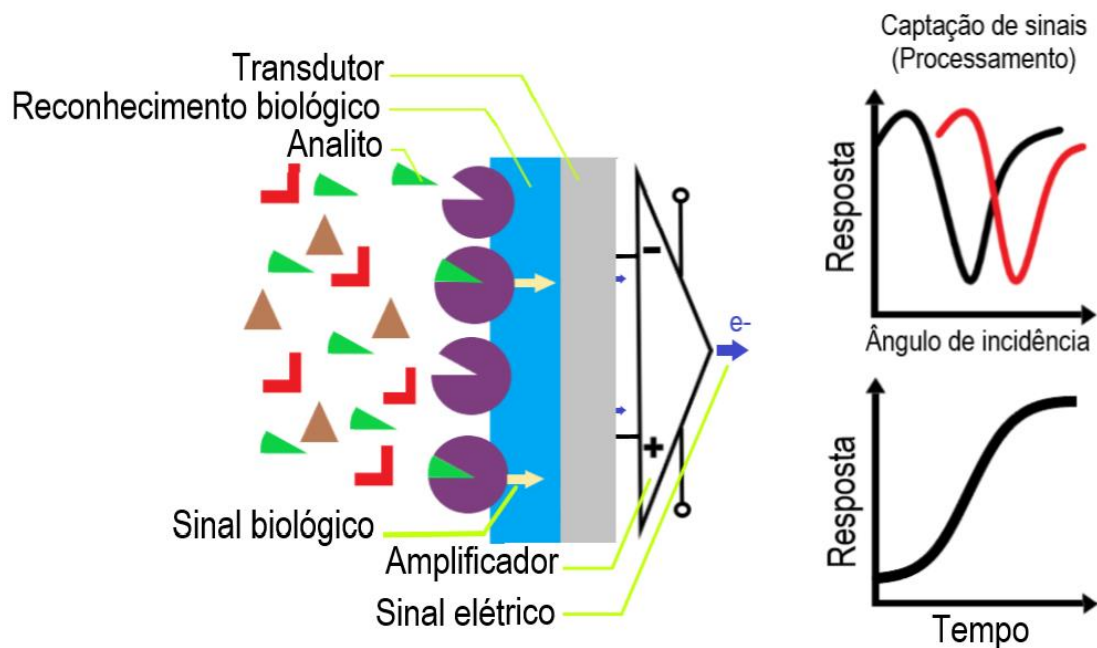
Os dispositivos biocatalíticos utilizam como princípio as reações catalisadas por macromoléculas, eles contêm um biocatalisador, tal como uma enzima para reconhecer seletivamente o analito, que estão presentes em seu ambiente biológico natural, foram antecipadamente isoladas ou foram fabricadas. O sistema catalisador-substrato permanece estável, embora esteja em um estado de transição, e esse estado é difícil de ser quantificado. Qualquer variação no produto ou no substrato será reportada pelos biossensores biocatalíticos. Oxigênio, peróxido de hidrogênio, calor e fótons são, usualmente, parâmetros que estes tipos de biossensores detectam. São usados frequentemente três tipos de biocatalisadores: Enzimas (mono ou multi-enzimas), celulares (bactérias, células eucariontes, fungos, microrganismos) e tecidos (segmentos de planta ou animal) (AIZAWA, 1991; THÉVENOT et al., 2001).

3.1.1.2. RECONHECIMENTO POR BIOAFINIDADE

Nos biossensores por afinidade, por outro lado, encontram-se anticorpos, antígenos e ácidos nucleicos. Tem como fundamento a interação do analito com uma macromolécula, que foi removida e isolada do seu meio natural ou sintetizada. As interações do analito-alvo ocorrem de forma seletiva ou específica formando um complexo termodinamicamente estável, capaz de gerar um sinal de transdução, a detecção acontece sem a necessidade de um marcador, algumas vezes essas interações são monitoradas usando interações biocatalíticas complementares (PORFÍRIO, 2014; THÉVENOT et al., 2001).

Devido às moléculas biológicas interagirem de forma específica e reversível, pode ocorrer uma mudança em uma ou mais das propriedades físico-químicas associadas à interação, isso significa que o material empregado nessa camada apresenta uma alta seletividade, ou seja, não permite que outra espécie se junte a camada sem que ela realmente apresente compatibilidade, tal identificação se denominou como princípio chave-fechadura (lock-key) o esquema de organização do dispositivo e do princípio descrito é representado na Figura 1616 (MEHRVAR et al., 2000; SCHELLER et al., 1984).

Figura 16: Esquema diagramático do princípio chave-fechadura e organização característica dos componentes de um biossensor



Fonte: (PALMSENS, [s.d.]; SUVARNAPHAET; PECHPRASARN, 2017)

3.1.2. TRANSDUTORES

O elemento transdutor de um biossensor é usado para converter a etapa de reconhecimento biológico, ou seja, atuando como uma interface que mede alterações físicas que ocorrem no biorreceptor e transformando essa energia em um sinal elétrico mensurável, o qual pode ser acoplado a um microprocessador. Em seguida temos o elemento detector, onde os dados são amplificados, analisados e convertidos em unidades de concentração para que finalmente sejam transferidos para um dispositivo de armazenamento para controle e exibição (PATHAK et al., 2007; SETHI, 1994). Os transdutores são divididos principalmente em quatro categorias: transdutores eletroquímicos, ópticos, piezoelétricos e calorimétricos, os quais são descritos em mais detalhes a seguir.

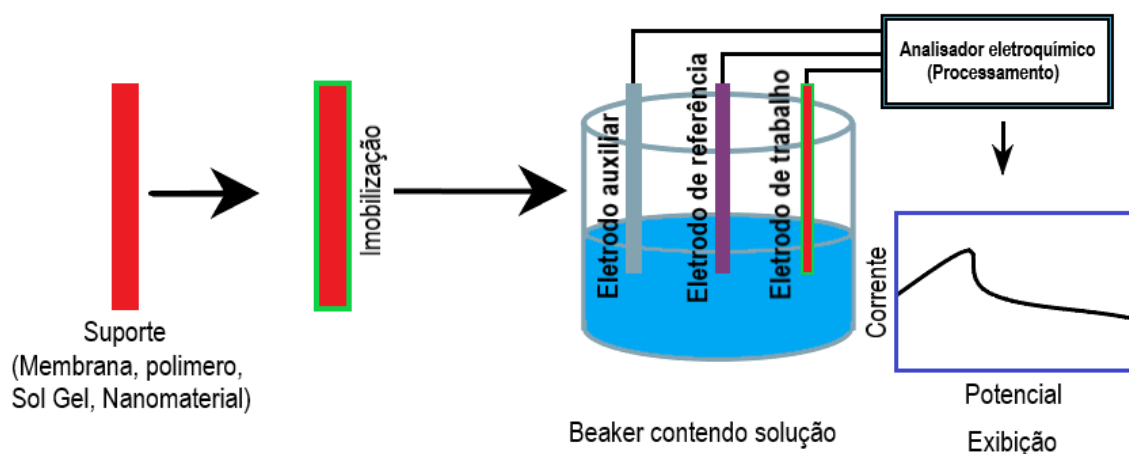
3.1.2.1. TRANSDUTORES ELETROQUÍMICOS

Os biossensores eletroquímicos, já existem desde meados do século passado, sendo um dos primeiros biossensores a existir e, portanto, tiveram a dianteira na questão de

evolução antes do surgimento de outros meio de transdução, tendo inclusive parte de suas classificações e definições adotadas por outros tipos de biossensores.

O princípio fundamental dessa classe de biossensores é que as reações químicas entre a biomolécula imobilizada e o analito-alvo produzem ou consomem íons ou elétrons, o que afeta as propriedades elétricas mensuráveis da solução, dentre elas a corrente elétrica ou potencial (MONOŠÍK; STREĎANSKÝ; ŠTURDÍK, 2012). A Figura 1717 mostra os princípios de um transdutor eletroquímico.

Figura 17: Elementos e características de transdutores (eletrodos) com o princípio eletroquímico



Fonte: (RATHEE et al., 2016)

Um biossensor eletroquímico de acordo com a definição da IUPAC é um dispositivo integrado independente, que é capaz de fornecer informações analíticas quantitativas ou semiquantitativas específicas usando um elemento de reconhecimento que é retido em contato direto ou espacial com o elemento de transdução (THÉVENOT et al., 2001).

Existem três tipos de biossensores eletroquímicos – amperométricos, potenciométricos e condutimétricos. A baixa relação sinal-ruído (RSR) nos condutimétricos faz com que as técnicas de maior sensibilidade tenham um maior utilização como os potenciométricos e, principalmente, amperométricos, pois apresenta características melhores de precisão, rapidez e sensibilidade em comparação com o potenciométrico (MELLO; KUBOTA, 2002; PEREIRA; SANTOS; KUBOTA, 2002).

- Biossensores amperométricos: Este tipo de biossensor mede a corrente produzida por uma reação química de uma espécie eletroativa a um potencial constante aplicado, que está relacionado à concentração da espécie em solução (MELLO; KUBOTA, 2002). Um fator de grande impacto no funcionamento dos biossensores amperométricos é a transferência eletrônica entre molécula

catalítica e a superfície do eletrodo na maioria das vezes envolvendo uma mediação ou polímero condutor (GERARD; CHAUBEY; MALHOTRA, 2002).

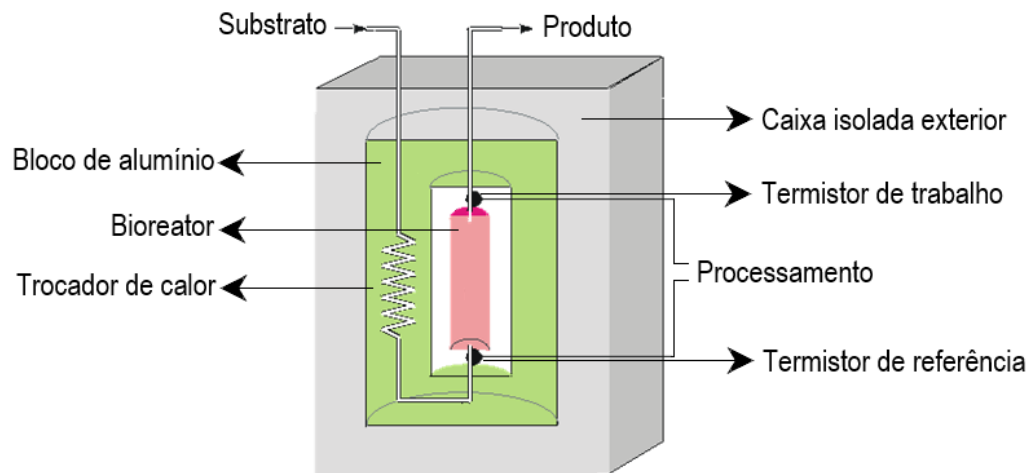
- **Biossensores condutimétricos:** Os biossensores condutimétricos baseiam-se no princípio da mudança de condutividade do meio quando organismos metabolizam substratos descarregados, como carboidratos, para intermediar como um ácido láctico. As mudanças de condutividade do meio são detectáveis entre dois eletrodos. A taxa de metabólitos carregados é diretamente proporcional à taxa de crescimento do organismo e é facilmente quantificável (MELLO; KUBOTA, 2002).
- **Biossensores potenciométricos:** Nos biossensores baseados em potenciometria, uma membrana ou superfície sensível a uma espécie desejada gera um potencial proporcional aos logaritmos da concentração da espécie ativa, medida em relação a um eletrodo de referência. Este tipo de biossensor consegue medir variações de pH e concentração de íons (THÉVENOT et al., 2001).

3.1.2.2. TRANSDUTORES CALORIMÉTRICOS

Transdutores Calorimétricos são biossensores que utilizam transdutores de detecção calorimétrica e trabalham com o princípio fundamental de que todas as reações bioquímicas envolvem uma mudança na entalpia, ou seja, absorção ou produção de calor (GERARD; CHAUBEY; MALHOTRA, 2002).

Em virtude do analito entrar em contato com o biocomponente o calor de reação é medido e calibrado contra a concentração do analito. O calor total produzido ou absorvido é proporcional à entalpia dos molaes e ao número total de moléculas presentes na reação. O desenvolvimento desses dispositivos é feita com a combinação de moléculas de enzima com termistores, conhecidos como termistores de enzimas, eles são utilizado na medição de temperatura de reações biológicas (MOHANTY; KOUGIANOS, 2006). A Figura 188 ilustra os princípios de um transdutor calorimétrico.

Figura 18: Diagrama esquemático de um biossensor com princípio de transdução calorimétrica

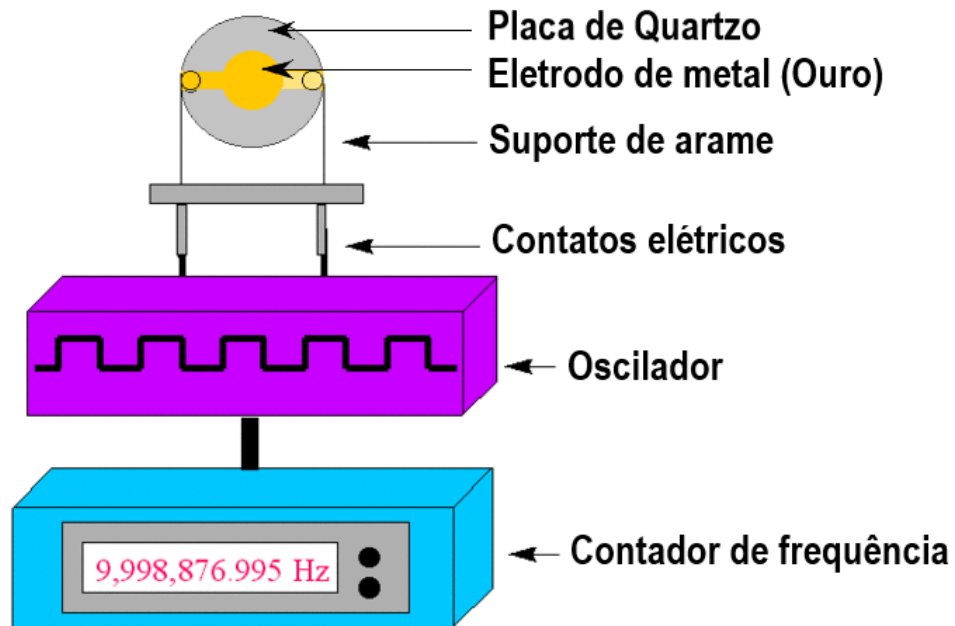


Fonte: (TIQUIA-ARASHIRO, 2014)

3.1.2.3. TRANSDUTORES PIEZOELÉTRICOS

Este tipo de transdutor opera com o princípio da geração de dipolos elétricos ao submeter um cristal anisotrópico natural ao mecanismo de estresse. Devido à adsorção de um analito, a massa do cristal é aumentada resultando em frequências alteradas de oscilação, em outras linhas uma onda acústica é propagada por uma corrente alternada aplicada externamente entre dois eletrodos depositados em um substrato piezoelétrico, tal como o quartzo. A alteração resultante poderá ser medida eletricamente essa aferição é importante, pois servirá para a determinação de massa adicional positiva ou negativa. Os biossensores que utilizam este tipo de transdução são utilizados para detecção de amônia, hidrogênio, metano, monóxido de carbono e *Salmonella* (ALI et al., 2017; GERARD; CHAUBEY; MALHOTRA, 2002; GUPTA et al., 2006; MONOŠÍK; STREĎANSKÝ; ŠTURDÍK, 2012). A Figura 199 ilustra os princípios de um transdutor piezoelétrico.

Figura 19: Esquema de um biossensor com princípio de transdução piezoelétrica



Fonte: (SRIVASTAVA; VAN RIJN; JONGSMA, 2016)

3.1.2.4. TRANSDUTORES ÓPTICOS

Transdutores ópticos em biossensores são aplicados para medir as respostas à iluminação ou à emissão de luz. A investigação e uso das propriedades dielétricas e princípios ópticos podem ser usados para elaborar elementos transdutores ópticos, os quais apresentam características competitivas com outros tipos de biossensores. Os biossensores ópticos oferecem vantagens em termos de miniaturização, baixo custo, descartabilidade e sem interferência elétrica. Os desenvolvimentos no campo das telecomunicações contribuíram para o desenvolvimento e melhoria da tecnologia de fibra óptica. Esta mesma tecnologia da fibra óptica pode ser aplicada nos biossensores como métodos de transdução utilizando absorbância, refletância, fluorescência, extinção de fluorescência, onda evanescente, ressonância plasmônica de superfície (do inglês, *Surface Plasmon Resonance*) e biossensores de luminescência que podem competir com biossensores eletroquímicos (MEHRVAR et al., 2000).

Embora biossensores ópticos apresentem consideráveis vantagens no campo de detectores, os mesmos apresentam alguns desafios tecnológicos a serem superados, os quais são objetos de pesquisa. Esses desafios tecnológicos estão relacionados abaixo:

- Quanto ao desenvolvimento de meios reagentes adequados para detecção:

Nesta categoria de biossensor o trabalho do dispositivo apenas poderá ter curso se o desenvolvimento de reagentes apropriados ao que se quer investigar for feito (MEHRVAR et al., 2000).

- Quanto às suas características ópticas:
Dispositivos ópticos tem uma alta sujeição à interferência da iluminação ambiente. Tal problema pode ser resolvido pelo uso de um ambiente escuro ou radiação modulada. Outro fato é o de que alguns reagentes podem apresentar fotolabilidade, característica de moléculas que se degradam frente à luz (MELLO; KUBOTA, 2002).
- Quanto às ferramentas utilizadas para detecção:
Para manter o funcionamento é necessária uma fonte com alta quantidade de energia, pois os tempos de respostas podem ser demorados, devido à troca de massa entre analito e reagente. A irreversibilidade é um problema, pois se não for possível a regeneração do sítio onde o reagente foi utilizado, considerando o alto valor do reagente, isso impossibilitará a reutilização (MEHRVAR et al., 2000; MELLO; KUBOTA, 2002).
- Quanto à largura do domínio detectável de espécies:
Os biossensores ópticos possuem um desafio quanto ao que eles podem detectar. Atualmente eles são aplicáveis à apenas uma estreita faixa de índices de refração, isso os limita quanto ao que pode ser detectado (MEHRVAR et al., 2000).

Outro fator que tem sido um grande desafio é a portabilidade, o que de fato tem sido um obstáculo para o alcance do seu completo potencial, a busca pela mitigação de limitações relacionadas à sensibilidade, limite de detecção, seletividade em soluções biológicas complexas, detecção sensível de espécies associadas às membranas, e a adaptação de elementos sensores para POC são questões de imprescindíveis discussões nas pesquisas dos próximos anos se apoiando em estratégias para tornarem sensores baseados em SPR ferramentas indispensáveis à rotina biomédica de diagnósticos (SINGH, 2016).

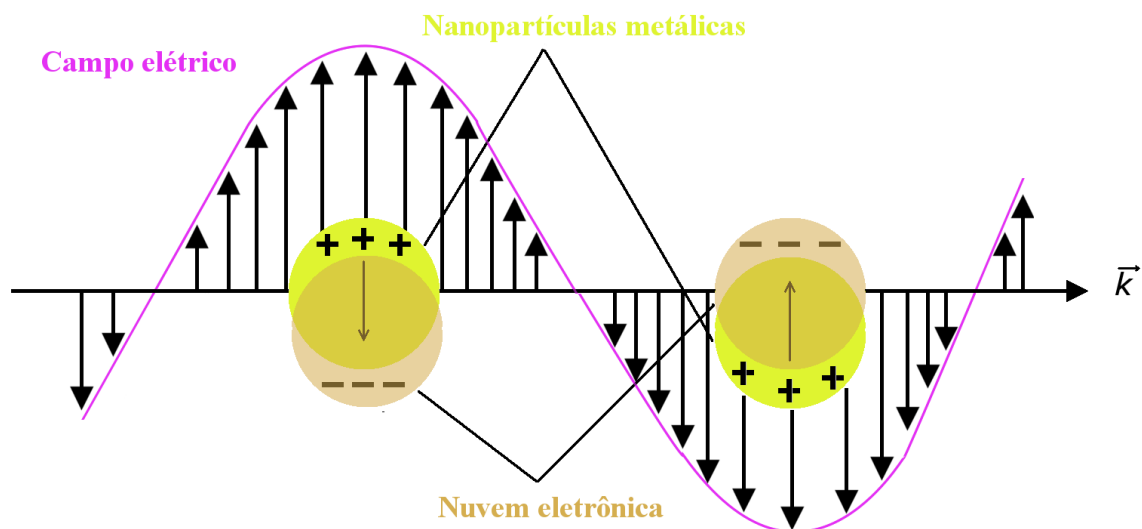
3.2. PROPRIEDADES ÓPTICAS

3.2.1. SURFACE PLASMON RESSONANCE (SPR)

A nanotecnologia presenciou um avanço exponencial nas últimas duas décadas, esse crescimento está muito ligado ao desenvolvimento de novos materiais, ao mesmo passo que técnicas mais avançadas de fabricação e caracterização surgem. Estruturas nanométricas vêm sendo estudadas de forma extensiva durante esse período, devido ao fato de ocorrerem alguns fenômenos exclusivos nessa ordem de tamanho, entre eles está a plasmônica. Embora todo desenvolvimento tenha se dado nesse curto espaço de tempo, a interação entre fótons e nanopartículas metálicas e semicondutoras é um fenômeno conhecido há mais de séculos. Entretanto, apenas recentemente o nome plasmônica foi intitulado para categorizar o rápido crescimento dessa área (STROBBIA; LANGUIRAND; CULLUM, 2015).

O campo da plasmônica pode ser descrita como o estudo dos plasmons ou oscilações de carga coletiva na superfície de materiais condutores e semicondutores com a interação de radiação eletromagnética. Estas interações em certas condições levam a uma excitação coletiva de elétrons de banda condutiva, tais excitações são comumente chamadas de plasmons de superfície (SP do inglês, *surface plasmon*) na Figura 20 é mostrada a resposta a uma onda polarizada, resultando em plasmons de superfície localizada (STROBBIA; LANGUIRAND; CULLUM, 2015; ZHONG et al., 2015).

Figura 20: Ilustração de uma ressonância plasmônica de superfície é possível perceber a origem de dipolos elétricos induzidos e a força restauradora em consequência da separação de cargas nas nanopartículas na presença de um campo elétrico

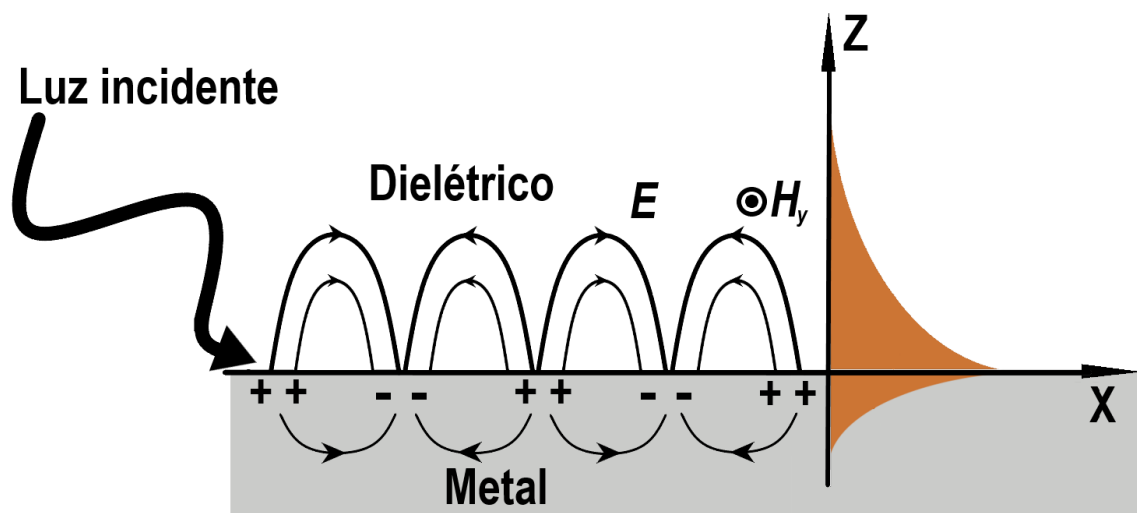


Fonte: (SANTOS et al., 2016)

Os polaritons de plasma de superfície (SPPs, do inglês *Surface Plasmon Polaritons*) são ondas de modo TM que se propagam na direção paralela a interface planar de metal-dielétrico em consequência da excitação provocada pela luz acoplada aos plasmons. Eles são

excitados quando a luz sofre reflexão interna total, logo surge um campo evanescente perpendicular ao filme metálico que os excitará, o esquema de polaritons de plasma de superfície é mostrado na Figura 2121 (YANG et al., 2017).

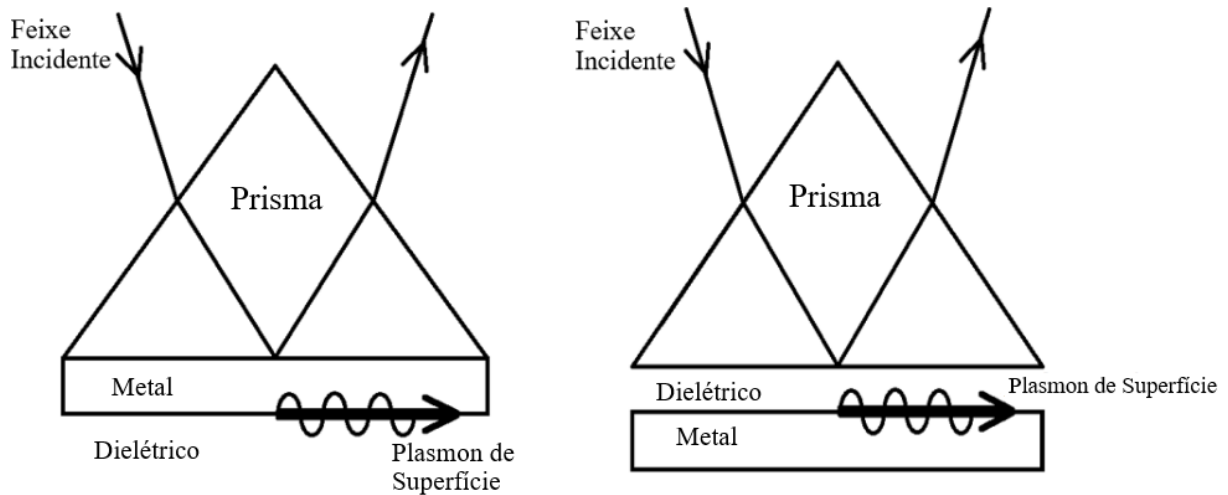
Figura 21: Representação de um feixe de luz incidente com consequente propagação do plasmon ao longo da interface metal-dielétrico



Fonte: (DAS et al., 2016)

Ressonância Plasmônica de Superfície é um fenômeno físico relacionado à excitação óptica da Onda Plasmônica de Superfície na fronteira entre um metal e um dielétrico. Esse fenômeno é uma das técnicas de óptica mais utilizada como padrão de detecção de sensores ópticos. Sensores ópticos baseados em SPR são altamente sensíveis a variações no índice de refração do meio vizinho, o que lhes permitiu ser altamente proficientes para aplicações de sensoriamento, como nas áreas de química, estudos ambientais e sistemas biológicos. Sensores SPR de fibra ótica surgiram a partir da configuração fundamental do SPR baseada na configuração de Kretschmann, que apresenta certa semelhança com a configuração Otto, como pode ser visto na Figura 2222 (SINGH; KALER, 2018).

Figura 22: Esquemático da configuração de Kretschmann à direita e Otto à esquerda



Fonte: (TIWARI, 2015a).

A estrutura de Kretschmann é uma das configurações geométricas mais utilizadas na confecção de sensores baseados em SPR, a razão para que haja uma maior preferência nesse tipo de configuração reside no fato de que ela apresenta algumas vantagens e podem ser resumidas em: não necessitar que haja um feixe de luz através do adsorvato, em comparação a outras configurações inclusive a de Otto, apresenta uma estrutura simplificada e fácil de construção, além de também oferecer alta sensibilidade (PATTNAIK, 2005; SOHRABI; HAMIDI, 2016).

3.2.2. CRISTAIS FOTÔNICOS

Visando deter o controle sobre propriedades como, por exemplo, emissão, propagação ou absorção de luz, para isso é necessário que se desenvolva um material com determinado padrão de periodicidade em sua estrutura.

Ondas eletromagnéticas ao trafegarem em meios que possuem seções de diferentes tipos de materiais ou perturbações periódicas na estrutura sofrem múltiplos espalhamentos, quando seu comprimento de onda é análogo ao das perturbações na estrutura. Tendo como exemplo, elétrons ou ondas eletrônicas que se propagam em um cristal sofrem inúmeros espalhamentos nos átomos da rede, distribuídos periodicamente no espaço. Satisfeitas certas condições, as ondas que se espalharam anteriormente poderão exercer interferência construtiva na direção oposta àquela de propagação da onda, o que irá resultar em uma onda estacionária. Nestas circunstâncias, a onda não pode se propagar através do cristal, sucedendo em frequências (energias) com propagação proibida. As frequências permitidas formam, nesse

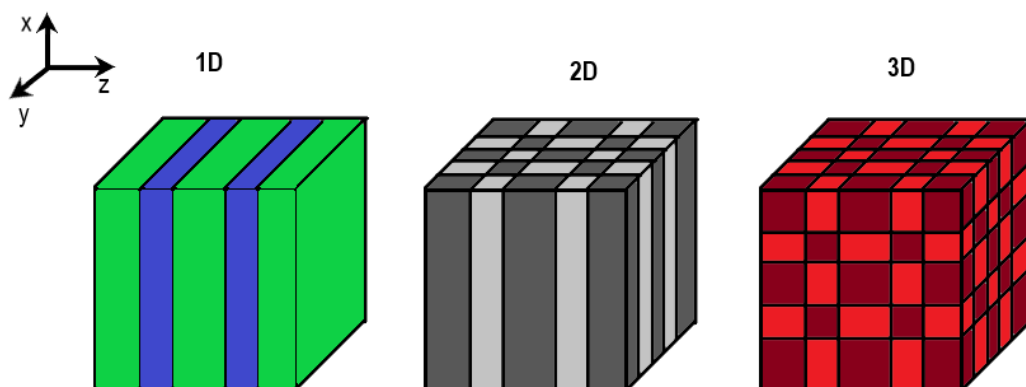
caso, bandas separadas por *gaps* (intervalos) de estado de energia *band-gap eletrônico* (QUIÑÓNEZ, 2006).

O conceito de cristais fotônicos foi concebido usando a analogia entre a propagação de um elétron em um potencial periódico e uma onda eletromagnética em um meio com alteração periódica do índice de refração no espaço (SERGEY V. GAPONENKO, 2010).

Podemos então definir que cristais fotônicos são estruturas que possuem constante dielétrica (índice de refração) periódica, usualmente gerando bandas de *gap fotônicos* (Photonic Band Gap – PGB), intervalos de frequência para os quais a energia não pode se propagar através do meio, onde é obrigatório que as estruturas apresentem uma periodicidade correspondente com a escala do comprimento de luz incidente (DIAS, 2011).

Cristais fotônicos podem apresentar periodicidade em uma, duas ou três dimensões, como descrito na Figura 23. Um cristal fotônico unidimensional adquire propriedades de PGB, apenas quando a luz incidente é paralelo ao eixo z, ou seja, atravessando as camadas no sentido de z. Em estruturas com periodicidade nas duas dimensões, são os chamados bidimensionais, eles apresentam um terceiro eixo que é homogêneo, com característica PGB relativa à luz incidente, atuando no plano y-z. A periodicidade em três dimensões de um cristal fotônico é similar a um cristal real, uma vez que cristais reais podem ter PGB em qualquer direção normal à incidência de luz. É necessário salientar que nessa estrutura a onda eletromagnética sofrerá proibição em qualquer ângulo –*band gap* completo, apenas quando a onda estiver dentro do intervalo de frequência da banda proibida (ANDRADE, 2010; QUIÑÓNEZ, 2006).

Figura 23: Esquemático dos modelos uni, bi e tridimensional. Cada cor representada indica a diferença entre os índices de refração



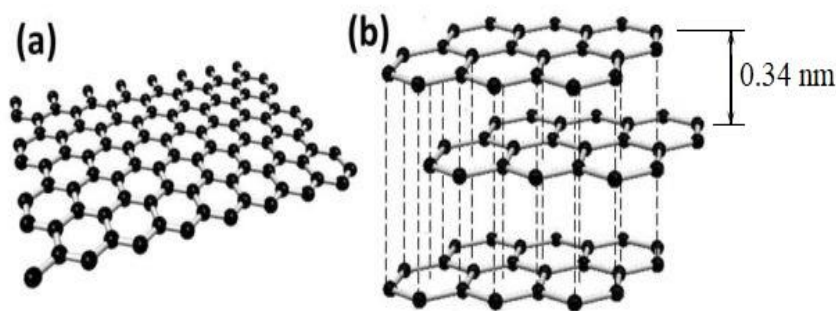
Fonte: (BIRÓ et al., 2007)

3.2.3. GRAFENO

Em 2004, o grafeno era descoberto por um grupo de pesquisadores da universidade de Manchester que pesquisavam filmes gráfitico monocristalinos NOVOSELOV et al. (2004), trabalho inclusive agraciado com o Nobel em 2010. A palavra grafeno proposta por Hanns-Peter Boehm em 1962, surgiu da resultante entre a palavra grafite com o sufixo –eno, devido a dupla ligação existente, sufixo esse que é usado para denominar hidrocarbonetos aromáticos policíclicos fundidos (BOEHM; SETTON; STUMPP, 1994).

O grafeno consiste de uma monocamada plana de átomos de carbono hibridizados na forma sp^2 , o que resulta em um elétron livre por átomo na camada orbital p , onde os átomos ficam dispostos nos vértices de hexágonos regulares em uma estrutura bidimensional (2D) comumente associada a favos de mel (Figura 24a) a junção ordenada dessas estruturas por ligações covalentes (forte) formam uma rede infinita do tipo hexagonal (SEGUNDO; VILAR, 2016; TRANSPARENTE; PIMENTEL; SILVA, 2014).

Figura 24: a) Rede hexagonal dos átomos de carbono para o grafeno e b) Estrutura do grafite apresenta multicamada de folhas de grafeno empacotadas e unidas por forças de Van der Waals com distância interplanar de 0,34 nm

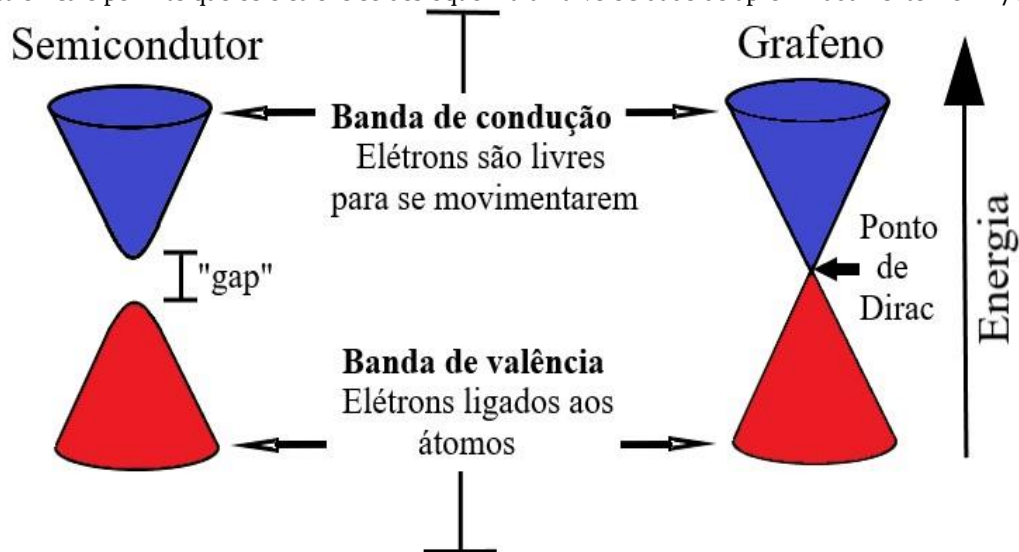


Fonte: (KUMAR; LEE, 2013; SILVA, 2011).

Uma alta condutividade elétrica e mobilidade eletrônica são as características de uma monocamada de grafeno, em termos numéricos: até 2×10^4 S/cm e 2×10^5 cm²/V.s (número 100 vezes superior a mobilidade eletrônica do silício) respectivamente, e isso é resultante da pequena massa efetiva que os elétrons desse composto possuem. As propriedades eletrônicas do grafeno se alteram em função do número de camadas e a posição relativa dos átomos nas camadas adjacentes determinadas pela ordem de empilhamento. Visto que a estrutura eletrônica de uma monocamada de grafeno sobrepõe dois pontos cônicos na

zona de Brillouin, os portadores de carga podem ser compreendidos como elétrons sem massa ou férmions de Dirac, ou seja, agem efetivamente como partículas relativísticas sem massa, próximos aos pontos de Dirac, esquema apresentado na Figura 25, em um espaço-tempo de (1+2) dimensões, sendo uma dimensão temporal e duas espaciais (CHAOHE et al., 2013; SEGUNDO; VILAR, 2016; WEI; KIVIOJA, 2013; ZANELLA; JIMENEZ; DARTORA, 2015).

Figura 25: Em um sólido os elétrons apresentam uma restrição de faixas, ou bandas de energia. A característica de um semicondutor, isolante ou até mesmo algumas camadas de grafeno, que nessa condição apresenta as características de um semicondutor, é de que um elétron, apenas pode se tornar livre se ele receber uma quantidade suficiente para atravessar o “gap”, o grafeno apresenta propriedades que tornam essa diferença de “gap” infinitesimal, essa é a principal razão para que os elétrons do grafeno tenham uma alta mobilidade eletrônica e permite que os elétrons se desloquem a uma velocidade de aproximadamente 10^6 m/s



Fonte: (CHAOHE et al., 2013; SEGUNDO; VILAR, 2016).

As propriedades ópticas do grafeno estão atreladas fortemente com suas propriedades eletrônicas, da mesma maneira que sua estrutura eletrônica de baixa energia, na qual bandas cônicas se encontram no ponto de Dirac, resultado em uma inesperada alta opacidade. Como, por exemplo, foi demonstrado por meio de experimentos, que em uma monocamada de grafeno é possível absorver apenas 2,3% da luz branca e ter uma refletância mínima de 0,1%, onde essa característica de absorção óptica do grafeno aumenta linearmente com a adição de novas camadas (NAIR et al., 2008; YAO; COJOCARU, 2014).

Segundo YE et al. (2013) com a utilização de uma ou mais camadas de grafeno é possível absorver mais modo de luz TE (*Transverse Electric*) do que o modo TM na estrutura de reflexão interna total. Isto significa que o modo TM por ter uma menor atenuação,

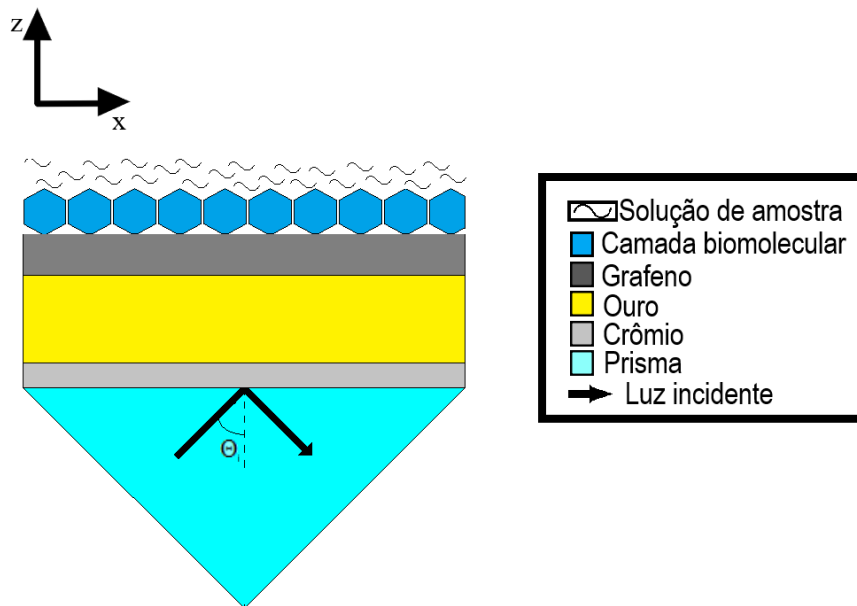
consequentemente, conseguirá ter uma maior penetração do campo no meio e uma maior refletância dos modos TM em comparação com os modos TE.

A resolução e sensibilidade de um sistema podem ser melhoradas pela medição da diferença de intensidade de luz refletida do modo TM e do modo TE. A condutividade do grafeno pode facilmente ser afetada pelo ambiente externo, devido à alta mobilidade eletrônica que afeta diretamente a constante dielétrica. O grafeno possui um grande potencial para medir intensidades de campos magnéticos. Nos sensores de fibra óptica, a propriedade de adsorção óptica do grafeno pode melhorar substancialmente a resolução, entretanto, é necessário que a polarização que mantém a fibra seja usada no sensor (ZHAO et al., 2016).

3.3. MODELO DE SIMULAÇÃO DO SENSOR

A estrutura do dispositivo óptico usado como sensor se baseou no modelo de Kretschmann, o qual é constituído de uma pilha com N camadas formadas por dielétricos e metais. Neste trabalho foram usadas cinco camadas, onde a disposição de cada camada tem uma ordem, a qual deve ser mantida para o alcance do melhor desempenho, conforme disposto na Figura 2626.

As camadas são colocadas da seguinte maneira, de baixo para cima: prisma, crômio, ouro/prata, grafeno, camada biomolecular e solução de amostra. Nesta estrutura, cada camada possui propriedades intrínsecas, mais especificamente, o índice de refração que é um dos fatores que os distinguem entre si. Para simular esta estrutura foi utilizado o método da matriz de transferência TMM (TIWARI, 2015a) descrito detalhadamente na seção 2.4 do capítulo 2, tal método permite o cálculo dos coeficientes de transmissão e reflexão do dispositivo.

Figura 26: Disposição do modelo de múltiplas camadas

Fonte: elaborado pelo autor

Considerando a estrutura multicamada mostrada na Figura 26, quando a luz incide sobre o prisma e reflete de volta, uma onda evanescente é produzida no filme de metal que o percorre ao longo da direção x com uma propagação constante. A condição para que ocorra essa excitação da onda plasmônica de superfície (OPS), é descrita parcialmente pelo vetor de propagação na equação (4.4).

A construção do código em Matlab tomou como base o trabalho feito por POULSEN (2010), o qual foi adaptado para se adequar aos parâmetros utilizados e também foram criadas funções de mensuração da sensibilidade e precisão. No final deste trabalho, no apêndice, é descrita a rotina do programa em Matlab e as configurações utilizadas no Comsol.

O capítulo 3 apresentou as definições, características e tipos de biossensores existentes, além de dar ênfase sobre como atuam os biossensores ópticos e uma breve introdução sobre as propriedades ópticas tendo no final o modelo de simulação do biossensor idealizado para este trabalho.

Capítulo 4

4. RESULTADOS SIMULADOS

As simulações foram conduzidas, inicialmente, com o intuito de se acumular valores das execuções dos cenários parametrizados, diga-se parametrizados: cada cenário possui uma configuração diferente, onde para cada coleção de valores (resultantes das simulações) são selecionados os resultados, os quais apresentaram melhores sensibilidades (mesmo com pequenas diferenças de valores) em relação aos outros.

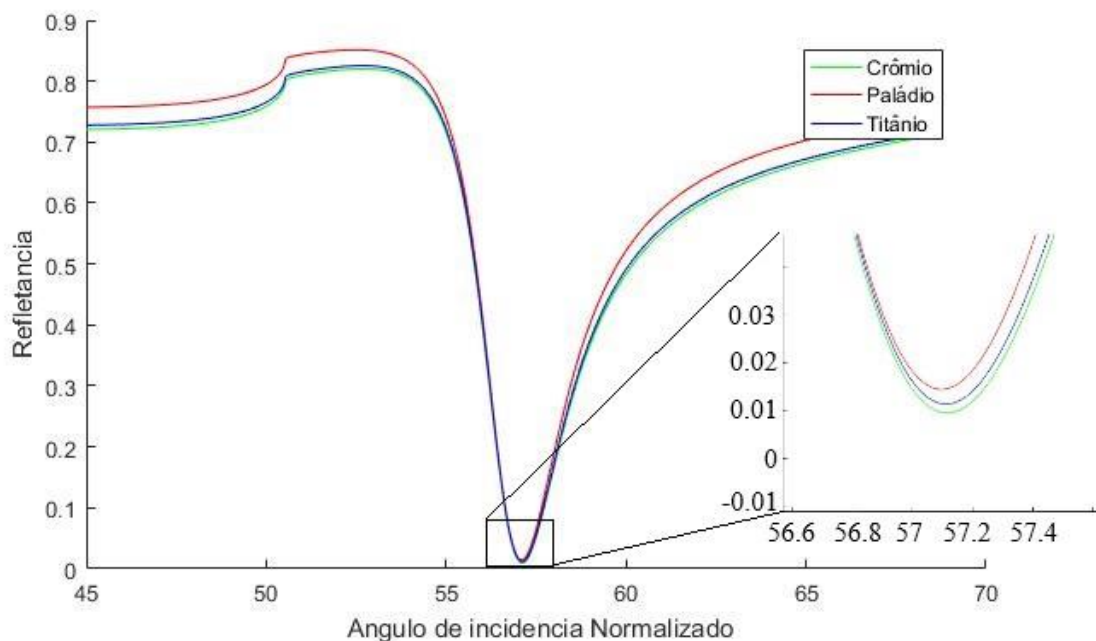
A Tabela 1 mostra de maneira simplificada os parâmetros utilizados para as simulações. Todas as propriedades dos materiais estão sujeitas a um feixe de luz com polarização TM de comprimento de onda $\lambda = 633\text{nm}$, esse comprimento de onda foi mantido em todas as simulações. Um dos motivos do emprego da polarização em modo TM, de acordo com ZHAO et al. (2016), é pelo fato de o grafeno, quando utilizado juntamente com esse modo de polarização, obter uma melhor interação do que os modos TE, haja vista, que os modos TE obtêm maior absorção óptica do que os modos TM.

Tabela 3: Configurações utilizadas em ambos simuladores

Parâmetros ópticos dos materiais			
Material	Índice de refração (n)	Coeficiente de extinção (k)	Referências
Prisma (SF10)	1,723	0	(POLYANSKIY, [s.d.])
Ouro (Au)	0,18344	3,4332	(JOHNSON; CHRISTY, 1972)
Prata (Ag)	0,05620	4,2776	(JOHNSON; CHRISTY, 1972)
Crômio (Cr)	3,1395	3,3152	(JOHNSON; CHRISTY, 1974)
Grafeno (Gr)	3	1,1491	[BRUNA; BORINI, 2009]
Meio de detecção	1,33 — 1,35	0	

A razão para escolha do Crômio como camada de adesão entre ouro e o prisma, ao invés de outros como Titânio e Paládio, foi pelo fato do Crômio apresentar um maior índice de refração e um menor coeficiente de extinção que os demais materiais, quando se considera o comprimento de onda utilizado (633 nm) e seguindo os modelos de JOHNSON e CHRISTY (1974). Isto implica uma menor absorção, ou seja, uma menor capacidade de atenuar a luz. Isso também resulta também em um melhor desempenho em relação à precisão, pois haverá uma maior penetração da onda evanescente (menor atenuação) na camada imediatamente colada ao prisma quando o material utilizado é o crômio. Esse efeito pode ser constatado na Figura 277, a qual apresenta o resultado das simulações.

Figura 27: Comparação entre materiais de adesão

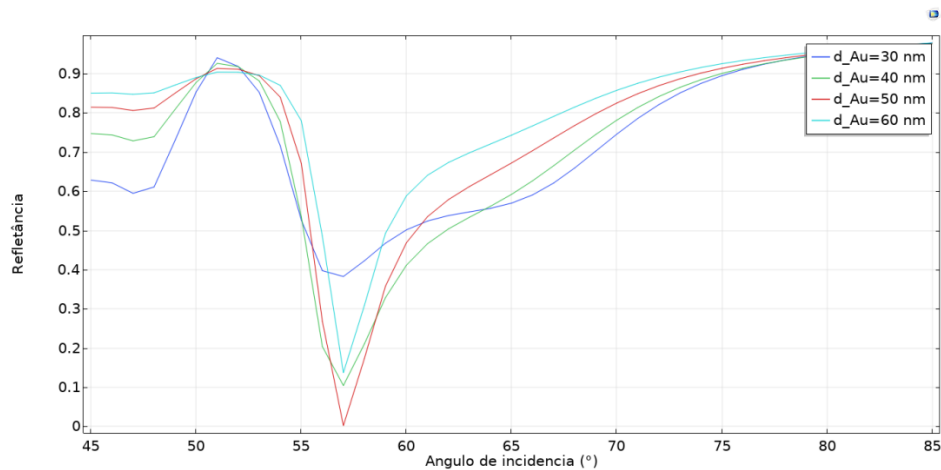


Fonte: elaborado pelo autor

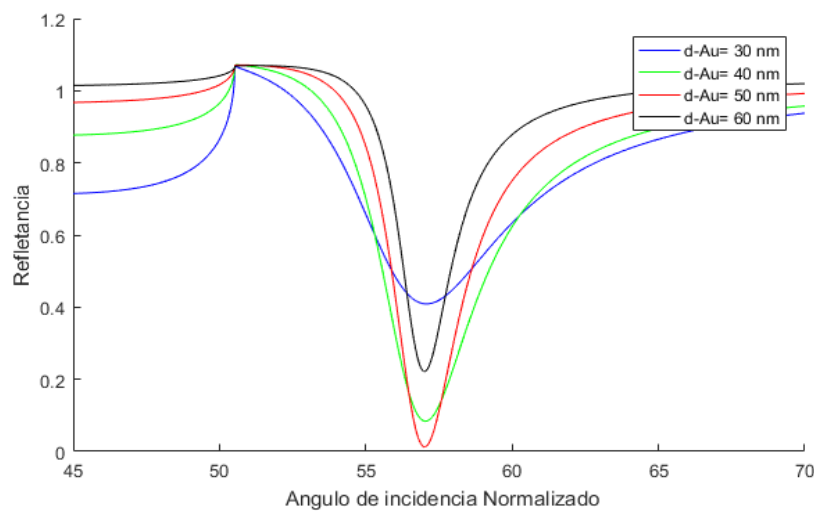
Os parâmetros para a realização da primeira simulação foram constituídos de todas as camadas presentes na Figura 2626, exceto a camada de grafeno, a qual foi adicionada posteriormente em outras simulações. Para encontrar valores baixos de Refletância usando-se ouro e para um dado ângulo de incidência, procedeu-se da seguinte maneira: investigou-se o comportamento da refletividade em função do ângulo de incidência usando-se diferentes valores de espessuras de filme metálico, como pode visto na Figura 2828. Este procedimento primeiro foi feito utilizando-se o Comsol, desenhando a estrutura do dispositivo e usando as suas funções internas (Figura 288-a). Posteriormente este procedimento foi feito usando o modelo analítico, o qual é descrito utilizando os coeficientes de reflexão das equações de Fresnel juntamente com o Método da Matriz de Transferência, o resultado é expresso na

Figura 288-b. Ambos os valores para Comsol e Matlab, estão de bom acordo e com valor mínimo em 57° e espessura em 50 nm. Este comportamento também ocorreu para outros valores de espessura. É notória a diferença de suavidade entre as curvas da Figura 28-a e Figura 28-b, ocorre pelo fato de o Matlab permitir uma maior amostragem sem que haja um grande custo computacional, que no caso do Comsol torna-se inviável, sendo assim, foi utilizada uma quantidade menor de amostragem. Percebe-se que os menores valores de refletividade encontram-se no intervalo de 40 a 50 nanômetros. Isto é também reportado por AL-SAAIDY et al. (2016); CAIDE e SUI (2000); JIA et al. (2019); PALIWAL et al. (2014).

Figura 28: Curva de refletividade TM em função do ângulo para o sensor com variação entre 30 e 60 nm da espessura do filme de ouro e meio de detecção fixado em 1,33. (a) Comsol (b) Matlab. Por motivos de otimização, em termos de tempo de cálculo computacional, a quantidade de resolução no Comsol foi reduzida, até o ponto que não perdesse a confiabilidade.



(a)

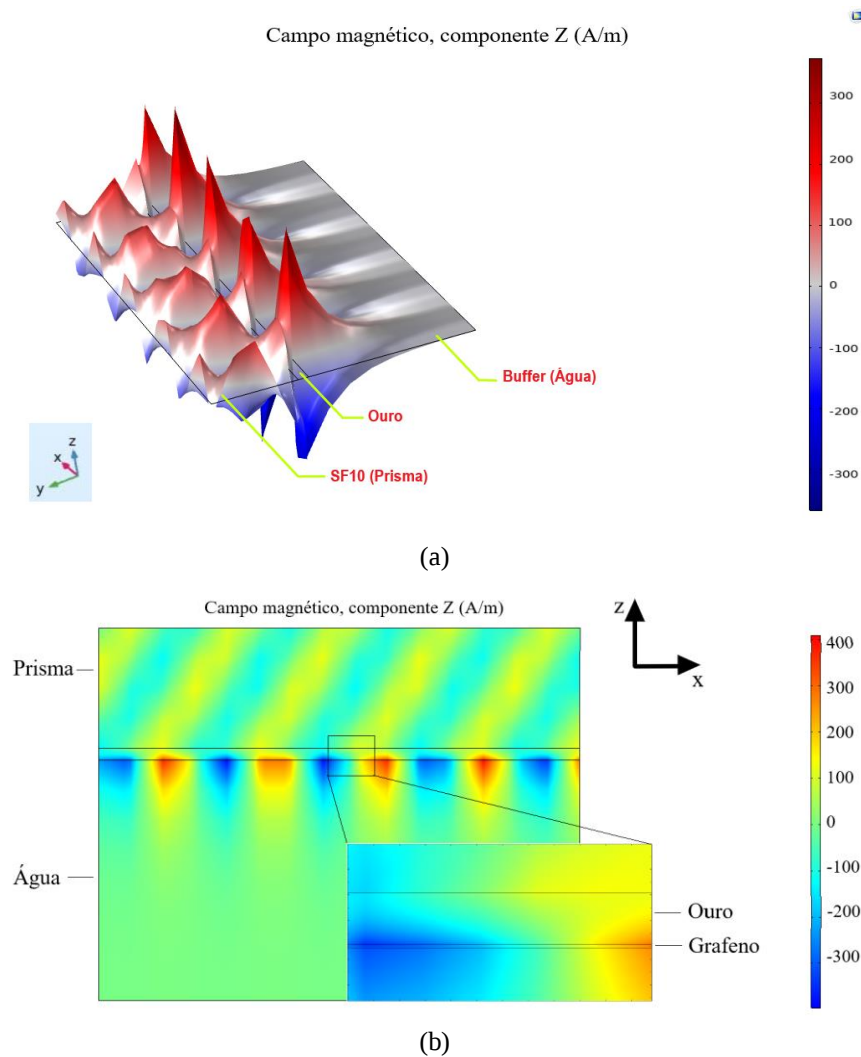


(b)

Fonte: elaborado pelo autor

A Figura 299 mostra a distribuição do campo magnético em ressonância, onde no ângulo de ressonância (57°) um plasmon de superfície é formado e propaga-se ao longo da interface. É possível verificar com mais detalhe esse comportamento na imagem em corte da estrutura 3D, onde os elementos que o compõem estão perfilados e a onda interage com os materiais ao longo da estrutura, onde é possível perceber na Figura 299-a que logo após atingir a ressonância na interface dos materiais a onda decai exponencialmente na direção y. Já na Figura 299-b, somente é possível perceber a camada de grafeno com a ampliação, isto se dá devido ao seu tamanho ínfimo.

Figura 29: Visualização do campo magnético em ressonância ao longo da estrutura da Figura 26, com utilização de 50 nm de espessura no filme de ouro a) distribuição magnética vista em 3D e b) vista em corte da estrutura, a barra de coloração representa a intensidade do campo

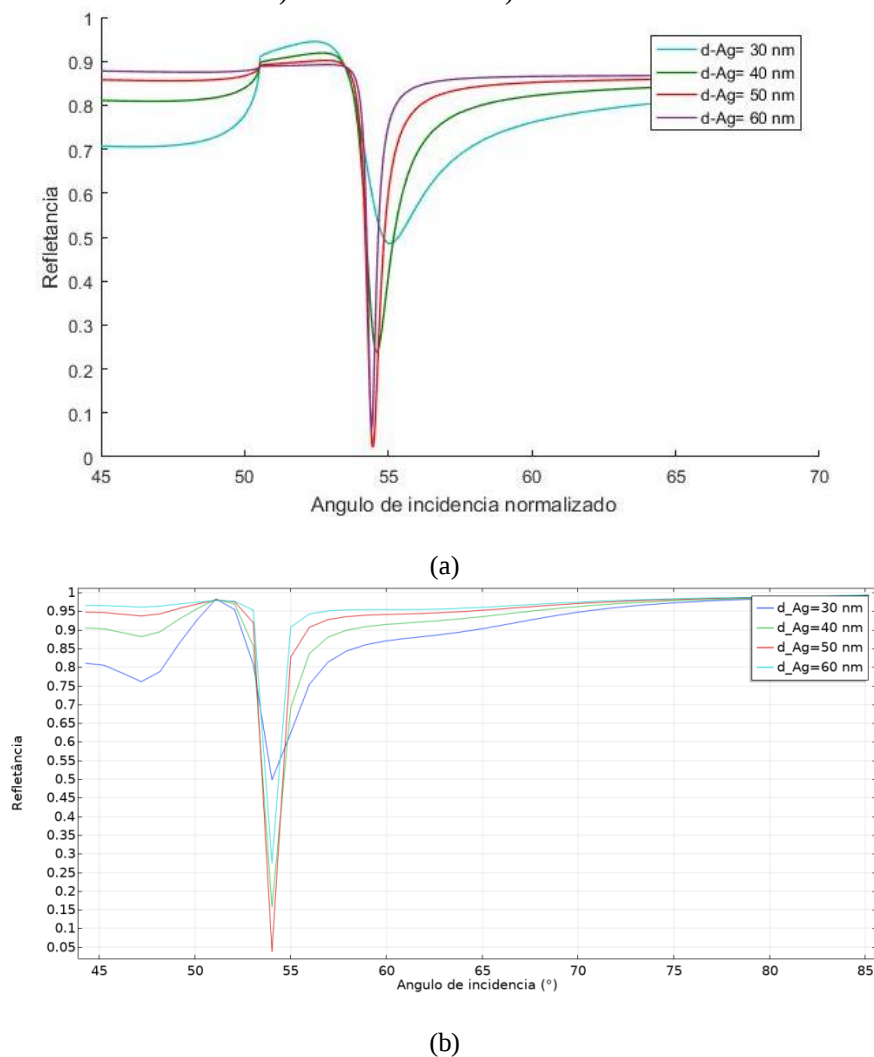


Fonte: elaborado pelo autor

Após as simulações com a camada de ouro, essa camada de metal foi retirada e no seu lugar foi inserida a prata para realização das simulações, apenas com esse metal. Conforme

reportado na literatura e com os resultados obtidos nas simulações foi observado que os parâmetros de espessura da camada de metal para a prata estão próximos ao intervalo que se observa na Figura 30, que é o mesmo intervalo utilizado nas simulações para o ouro. Observou-se que houve, assim como no ouro, o menor pico localizando-se em 50 nm, mas aqui houve uma diferença, porque logo na sequência a espessura de 60 nm ficou com o segundo menor pico, no Matlab, e terceiro menor pico no Comsol, no Matlab a espessura de 40 nm ficou em terceiro e em 30 nm novamente ambos simuladores estão convergindo para os mesmos resultados.

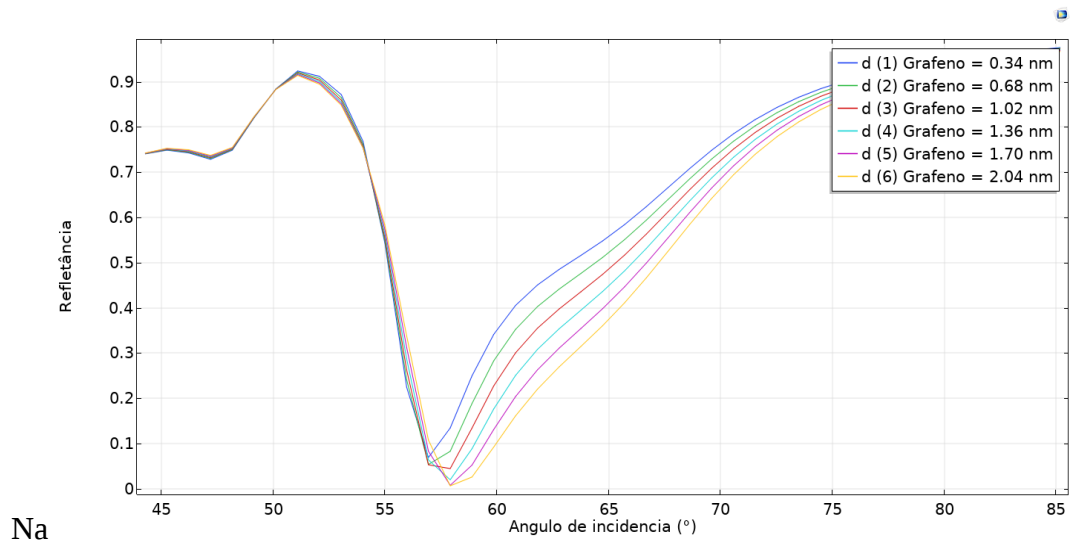
Figura 30: Curvas de ressonância para o intervalo definido de 30 a 60 nanômetros com igualdade apenas em 30 e 50 nm. a) Curvas no Matlab b) Curvas no Comsol



Fonte: elaborado pelo autor

Assim, após análise foi observado que, em comparação com as curvas do ouro, a prata tem uma melhor precisão, pois a abertura é menor em todos os perfis de espessura, embora não tenha o mesmo desempenho quanto à profundidade da curva. Com a variação de 0.005 no índice de refração no intervalo de 1.33 até 1.35 foi possível verificar uma sensibilidade

máxima de 69.978 graus/RIU com a utilização de apenas prata mantendo uma precisão de $2.3756 \text{ graus}^{-1}$.



(b)

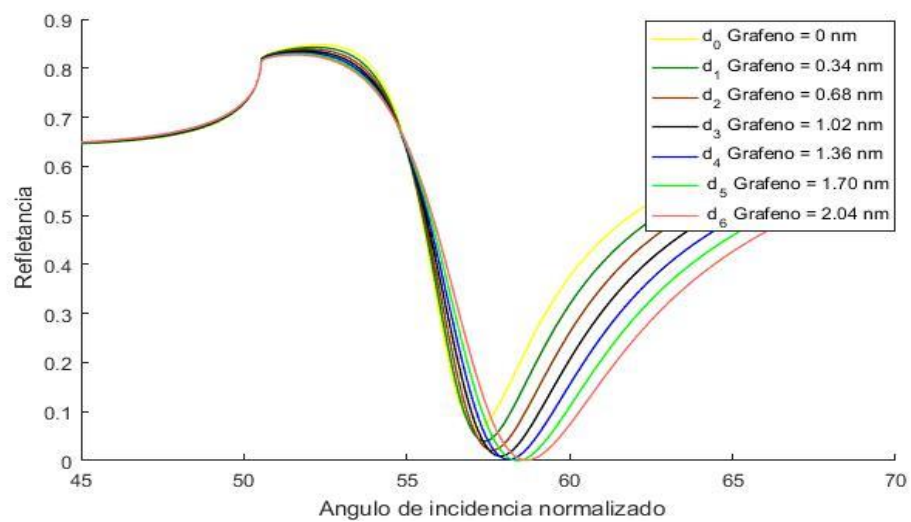
Fonte: elaborado pelo autor

0 é mostrada uma comparação entre diferentes configurações para o valor da camada de grafeno, onde o valor d_0 corresponde a não existência de uma camada de grafeno, ou seja, o que existe é apenas o ouro. Ao incrementar a camada de grafeno em uma unidade (0,34 nm) há uma variação no ângulo de incidência $\Delta\theta_{\text{SPR}}$ de $0,4235^\circ$ o que corresponde a 88,4graus/RIU, significando um ganho na sensibilidade se comparado ao resultado da primeira simulação que obteve variação de $0,3867^\circ$, seguido de 77,3 graus/RIU.

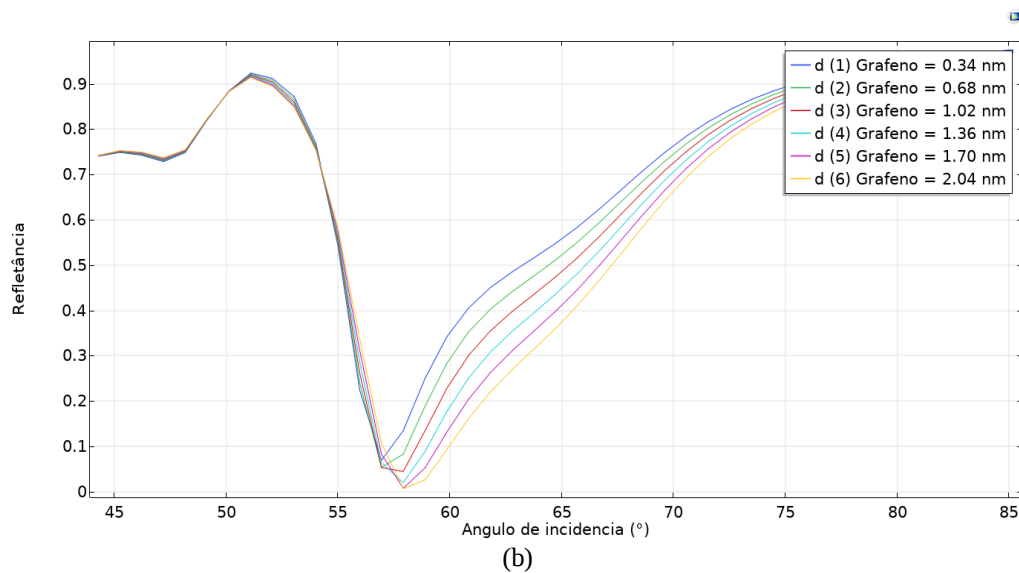
Um ponto a ser levado em consideração, com os resultados, é que mesmo tendo o valor mínimo na faixa de 50 nm para a camada de ouro, ele não atingiu um ápice de desempenho como esperado com a adição de camadas de grafeno, o que apenas veio a ser visto na utilização de uma camada de 40 nm, inclusive superando as marcas de 50 nm, a respeito da profundidade da curva de SPR. Outro ponto a ser avaliado é na utilização do ouro em dois simuladores, que trazem métodos diferentes de cálculo para as estruturas de múltiplas camadas, não ter apresentado grandes desvios na sensibilidade o que é perceptível pela semelhança entre a Figura 311-a e Figura 31-b.

Pelo fato do Comsol não aceitar valores nulos, a contagem de camadas nele começou a partir da inclusão de uma camada, o que não influencia no resultado final, já que a não utilização de camada serve apenas como referência visual para as próximas curvas.

Figura 31: Comparação através do incremento de camadas de Grafeno, onde cada camada possui espessura igual a 0,34 nm. As novas camadas se somam as anteriores. a) Curvas para as sucessivas camadas de grafeno no Matlab b) Curvas para as sucessivas camadas de grafeno no Matlab



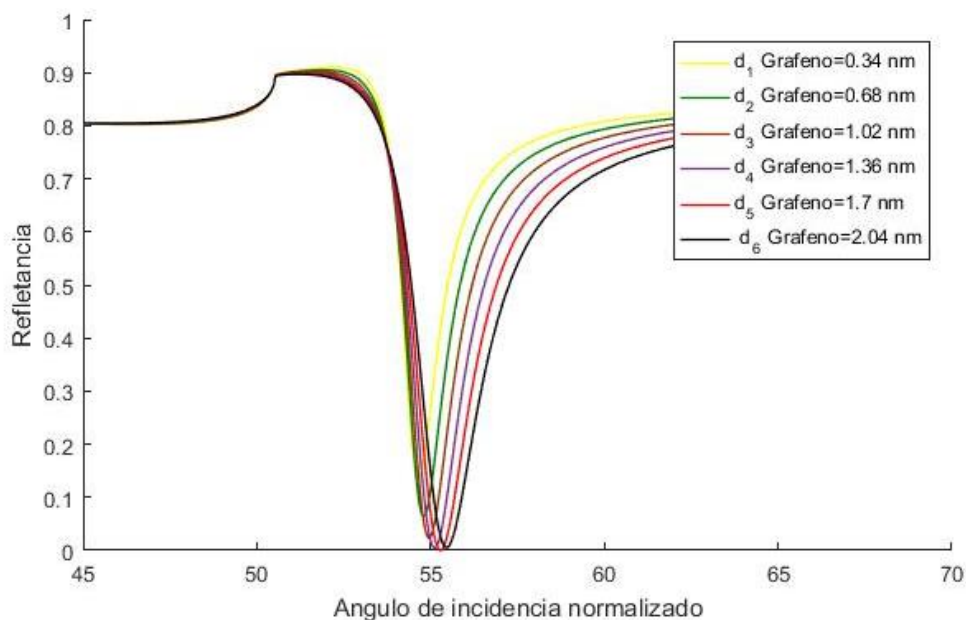
(a)

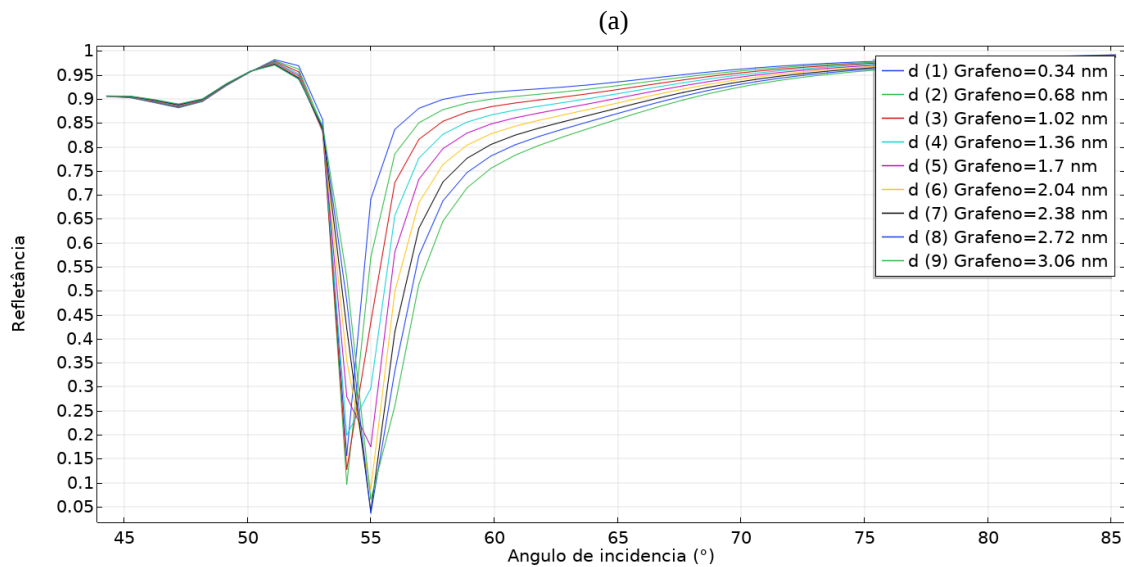


Fonte: elaborado pelo autor

Com a inclusão de grafeno no sistema a prata apresentou um aumento na sensibilidade, como o esperado. Entretanto, houve características diferentes das que ocorreram no ouro, uma delas foi o fato do Comsol necessitar de três camadas a mais para alcançar o mesmo desempenho medido no Matlab, como pode ser visto na Figura 32, este que precisou de apenas seis para alcançar o melhor valor de sensibilidade que foi de 72.2272 graus/RIU, o que representa um aumento de 3,11% na sensibilidade, comparado ao valor inicial sem grafeno. Também foi possível aferir a precisão do sistema que marcou $0.4405 \text{ graus}^{-1}$, uma queda brusca, mas que ainda sim permanece maior que o valor de precisão do ouro com ou sem grafeno.

Figura 32: Curvas de SPR para a prata com acréscimo de grafeno. a) Simulação no Matlab com 6 camadas de grafeno e uma espessura de 40 nm de prata. b) Simulação no Comsol com o obtido de 9 camadas.





Fonte: elaborado pelo autor

Por fim, percebe-se que a prata apresenta um bom desempenho quanto à precisão, mas não oferece um grande aumento de sensibilidade com a inclusão de grafeno, o contrário do que ocorre com o ouro, quando é inserida ao menos uma camada de grafeno, pois há um aumento maior na sensibilidade e na profundidade da curva. São contrapontos que devem ser levados em conta para cada tipo de projeto que se queira desenvolver na intenção de escolher qual o melhor em cada situação. Estão elencados na Tabela 4 os resultados das simulações com os melhores valores em cada camada, tendo como resultado o melhor valor encontrado para cada configuração correspondente.

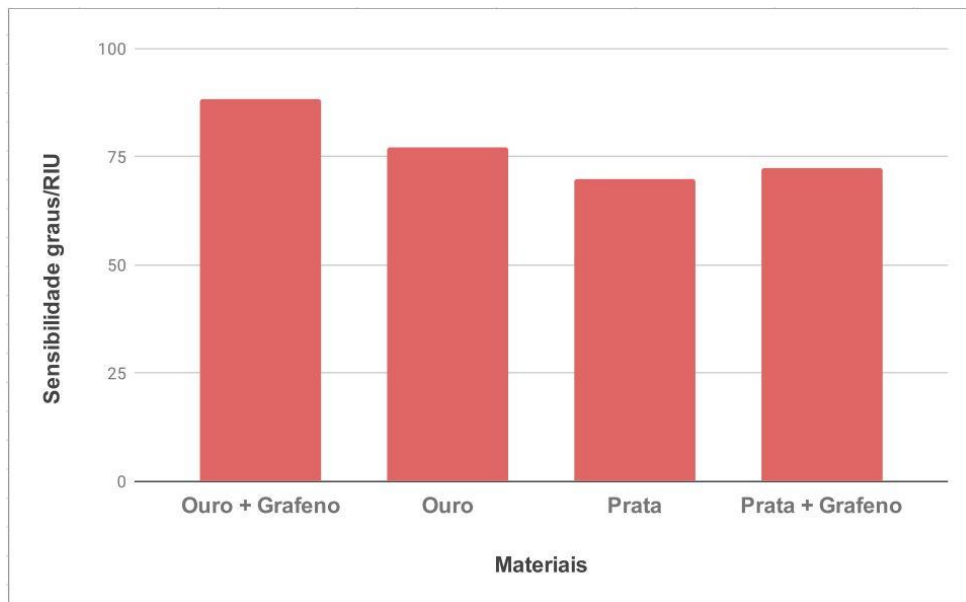
Tabela 4: Desempenho dos materiais nas propriedades ópticas com ou sem grafeno

Metal	Grafeno	Sensibilidade (graus/RIU)	Precisão (graus⁻¹)
Prata (40 nm)	2.04 nm	72.2	0.4405
Prata (40 nm)	-	69.9	2.3756
Ouro (40 nm)	2.04 nm	88.4	0.1653
Ouro (40 nm)	-	77.3	0.2812

É válido ressaltar que foi possível continuar aumentando a sensibilidade na prata e no ouro após a sexta camada de grafeno, todavia isso representou uma perda significativa na profundidade da curva e um espaçamento maior entre os meios das curvas, o que representa

uma perda de precisão, retardo na resposta de detecção e um menor campo evanescente atuando na região de detecção. A Figura 33 mostra os perfis de configuração em série, onde é possível notar que a prata juntamente com o grafeno fica próximo ao desempenho do ouro e que o ouro com o grafeno tem a maior sensibilidade registrada.

Figura 33: Ilustração dos desempenhos de cada combinação de material



Fonte: elaborado pelo autor

O capítulo 4 apresentou os resultados obtidos das simulações e fez análises sobre os parâmetros dos materiais utilizados com base nas métricas utilizadas de sensibilidade e precisão.

Capítulo 5

5. CONCLUSÃO

O presente trabalho apresentou um estudo teórico através de análise numérica sobre os efeitos na sensibilidade com o uso de ouro, prata e grafeno em biossensores. Para analisar o comportamento das ondas que trafegavam através das multicamadas foi utilizado o Método da Matriz de Transferência, que permitiu uma análise simplificada dessa interação entre ondas eletromagnéticas e matéria. Após as simulações foi possível constatar que houve um aumento na sensibilidade, partindo do valor inicial obtido de 77,3 graus/RIU utilizando apenas ouro, aumentando para 88,4graus/RIU, valor máximo para essa simulação no Matlab. Isso aconteceu após as inclusões sucessivas de camadas de grafeno, para o qual se obteve uma curva maior após a inclusão da sexta camada de grafeno, resultado semelhante ao que verificado no Comsol com resultado de 86,7deg/RIU, o que representa um aumento de no mínimo 12% sendo maior inclusive que os valores encontrados na literatura, junto às

inserções de camadas e aumento da sensibilidade veio a perda de precisão, isso porque houve também um progressivo espaçamento na curvatura o que torna o sistema menos ágil as interações e consequentemente menos preciso.

No caso da utilização de prata dos seus valores iniciais de 69,976 graus/RIU passou para os 72,227 graus/RIU, o que corresponde a 3,1% de aumento. Tal valor foi alcançado com a inclusão de seis camadas no Matlab e nove no Comsol, essa diferença de camadas pode estar relacionada ao fato de que o Comsol utiliza o método das diferenças finitas e no Matlab foi utilizado o método da matriz de transferência. Vale ressaltar que o valor obtido para sensibilidade, pela prata em combinação com grafeno é próximo ao da configuração apenas com a camada de ouro sem grafeno. Esse aumento se deve a habilidade de absorção das biomoléculas de grafeno. Pelo que foi observado aparentemente a precisão é inversamente proporcional à sensibilidade, pois quando a tende a crescer sensibilidade do outro lado a precisão tende a diminuir, fato observado tanto para o ouro quanto para a prata.

A precisão da prata foi maior em todos os casos quando comparada ao ouro, um fato verificado foi que a prata sofre uma perda de 81,4% na precisão após a inclusão do grafeno que é uma perda considerável, já o ouro perde apenas 41,2%, ou seja, na proporção o ouro perdeu apenas metade do que a prata perdeu.

Os resultados obtidos sugerem dizer que, o uso de grafeno tem grande potencial no desenvolvimento de sensores ópticos, para os mais variados propósitos e a utilização em conjunto com a prata pode se equivaler a estruturas que utilizam apenas ouro com a vantagem de ter uma maior precisão na detecção, a depender dos custos das técnicas de fixação do grafeno, pode ser uma alternativa para a redução de custo.

Para trabalhos futuros pretende-se usar novos tipos de materiais que venham a tornar o desenvolvimento de biossensores com um custo menor, sem que se perca ou diminua drasticamente a qualidade de detecção, isso aliado às técnicas já conhecidas pela comunidade científica.

Outro ponto de interesse para trabalhos futuros é o de utilizar um algoritmo genético na determinação automática de valores para tamanho, de acordo com as melhores combinações de materiais, tornando o trabalho mais eficiente, haja vista que, atualmente a determinação dos vários parâmetros é quase que um trabalho “manual-aleatório” pelo fato de não se ter uma ideia exata de quais são as melhores combinações em tempo hábil.

A área da fotônica apresenta amplas perspectivas com crescente destaque durante as últimas décadas, da mesma forma como foi na expansão com o transistor na década 50, e é

esperado que se mantenha, pois novas aplicações continuam a surgir. No que se refere aos biossensores fotônicos, o mesmo julgamento é feito, é um campo de elevada importância que ainda há muito que se desenvolver e aperfeiçoar.

REFERÊNCIAS

AIZAWA, M. Principles and applications of electrochemical and optical biosensors.

Analytica Chimica Acta, v. 250, p. 249–256, 1991.

AL-SAAIDY, M. F. S. et al. Design study and Modeling of Surface Plasmon Resonance (SPR) -based Optical Fiber Sensor Utilizing Zinc Oxide and Gold. p. 14036–14042, 2016.

ALI, J. et al. Biosensors: Their Fundamentals, Designs, Types and Most Recent Impactful Applications: A Review. **Journal of Biosensors & Bioelectronics**, v. 08, n. 01, p. 1–9, 2017.

ANDRADE, H. D. DE. **Ressorador retangular de fenda com quatro camadas fotônicas.**

[s.l.] UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO NORTE, 2010.

ANDRADE, V. M. DE. **CONFECÇÃO DE BIOSSENSORES ATRAVÉS DA IMOBILIZAÇÃO DE BIOCOMPONENTES POR ELETROPOLIMERIZAÇÃO DE PIRROL.** [s.l: s.n.].

- BASTOS, A. R. et al. Integrated optical Mach-Zehnder interferometer based on organic-inorganic hybrids for photonics-on-a-chip biosensing applications. **Sensors (Switzerland)**, v. 18, n. 3, p. 1–11, 2018.
- BIRÓ, L. P. et al. Living photonic crystals: Butterfly scales - Nanostructure and optical properties. **Materials Science and Engineering C**, v. 27, n. 5–8 SPEC. ISS., p. 941–946, 2007.
- BOEHM, H.; SETTON, R.; STUMPP, E. INTERNATIONAL UNION OF PURE AND SOLID STATE CHEMISTRY * NOMENCLATURE AND TERMINOLOGY Nomenclature and terminology of graphite. **Pure & Appl. Chem.**, v. 66, n. 9, p. 1893–1901, 1994.
- BORN, M.; WOLF, E. **Principles of Optics: Electromagnetic theory of propagation, interference and diffraction of light**. [s.l.] Elsevier, 2013.
- BRUNA, M.; BORINI, S. Optical constants of graphene layers in the visible range. **Applied Physics Letters**, v. 94, n. 3, p. 1–4, 2009.
- CAIDE, X.; SUI, S.-F. Characterization of surface plasmon resonance biosensor. **Sensors and Actuators, B: Chemical**, v. 66, p. 174–177, 2000.
- CALIL, S. S.; SILVA, P. R. Q. Biossensores : estrutura, funcionamento e aplicabilidade. **6ª Mostra de Produção Científica da Pós-Graduação Lato Sensu PUC-GO**, p. 1–20, 2011.
- CHAOHE, X. et al. Graphene-based electrodes for electrochemical energy storage Chaohe. n. May 2014, 2013.
- CHEN, J.; PARK, B. Label-free screening of foodborne Salmonella using surface plasmon resonance imaging. **Analytical and Bioanalytical Chemistry**, v. 410, n. 22, p. 5455–5464, 2018.
- CLARK, L. C.; LYONS, C. Electrode Systems for Continuous Monitoring in Cardiovascular Surgery. **Annals of the New York Academy of Sciences**, v. 102, n. 1, p. 29–45, 1962.
- DAS, G. et al. Plasmonic nanostructures for the ultrasensitive detection of biomolecules Plasmonic nanostructures for the ultrasensitive detection of biomolecules. **DEL NUOVO CIMENTO**, v. 39, p. 547–586, 2016.
- DIAS, B. L. **SÍNTESE, CARACTERIZAÇÃO E NANOESTRUTURAÇÃO DE ESFERAS FUNCIONAIS SUBMICROMÉTRICAS**. [s.l.] UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA, 2011.

EDUARDO FONTANA. **Eletromagnetismo - Parte 2 - Capítulo 7 - Ondas**

Eletromagnéticas. Disponível em:

<<https://www3.ufpe.br/fontana/Eletromagnetismo2/EletromagnetismoWebParte02/mag2cap7.htm>>. Acesso em: 22 jul. 2019.

ESPAÇO CIENTÍFICO CULTURAL. **A natureza da luz e o princípio da superposição**.

Disponível em: <http://www.ecientificocultural.com/ECC3/polar02_03.htm>. Acesso em: 22 jul. 2019.

FAN, C. et al. Silicon Nanomaterials Platform for Bioimaging, Biosensing, and Cancer Therapy. **Accounts of Chemical Research**, v. 47, n. 2, p. 612–623, 2014.

FRACCHIOLLA, N. S.; ARTUSO, S.; CORTELEZZI, A. Biosensors in clinical practice: Focus on oncohematology. **Sensors (Switzerland)**, v. 13, n. 5, p. 6423–6447, 2013.

GERARD, M.; CHAUBEY, A.; MALHOTRA, B. D. Application of conducting polymers to biosensors. v. 17, p. 345–359, 2002.

GUPTA, N. et al. Advances in sensors based on conducting polymers. v. 65, n. July, p. 549–557, 2006.

HOMOLA, J. Surface plasmon resonance sensors for detection of chemical and biological species. **Chemical Reviews**, v. 108, n. 2, p. 462–493, 2008.

ISAHGE, I. et al. **Design of Biosensor using COMSOL Multiphysics**. [s.l.] Sudan University of Science And Technology, 2016.

JAHANSHAH, P. et al. Rapid immunoglobulin M-based dengue diagnostic test using surface plasmon resonance biosensor. **Scientific Reports**, v. 4, p. 1–7, 2014.

JIA, G. Y. et al. Ultrasensitive plasmonic biosensors based on halloysite nanotubes/MoS₂/black phosphorus hybrid architectures. **Journal of Materials Chemistry C**, 2019.

JOHNSON, P. B.; CHRISTY, R. W. Optical Constants of the Noble Metals. **Physical Review B**, v. 6, n. 12, p. 4370–4379, 15 dez. 1972.

JOHNSON, P.; CHRISTY, R. Optical constants of transition metals: Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, and Pd. **Physical Review B**, v. 9, n. 12, p. 5056–5070, jun. 1974.

KATSIDIS, C. C.; SIAPKAS, D. I. General transfer-matrix method for optical multilayer systems with coherent, partially coherent, and incoherent interference. **Applied Optics**, v. 41, n. 19, p. 3978, 2002.

- KLEIN, M. V; FURTAK, T. E. **Optics**. [s.l.] John Wiley & Sons, 1986.
- KUMAR, A.; LEE, C. H. Synthesis and Biomedical Applications of Graphene: Present and Future Trends. **IntechOpen**, p. 55–75, 2013.
- LOPEZ, G. A. et al. Recent advances in nanoplasmonic biosensors: Applications and lab-on-a-chip integration. **Nanophotonics**, v. 6, n. 1, p. 123–136, 2017.
- MAIER, S. A. **PLASMONICS: FUNDAMENTALS AND APPLICATIONS**. [s.l.] Springer Science & Business Media, 2007.
- MANI, I.; VASDEV, K. Current Developments and Potential Applications of Biosensor Technology. **Journal of Biosensors & Bioelectronics**, v. 09, n. 02, p. 8–11, 2018.
- MARCUVITZ, N. **Waveguide handbook**. [s.l.] Iet, 1951.
- MEHRVAR, M. et al. Fiber-Optic Biosensors. Trends and Advances. **Analytical Sciences**, v. 16, n. 7, p. 677–692, 2000.
- MELLO, L. D.; KUBOTA, L. T. Review of the use of biosensors as analytical tools in the food and drink industries. v. 77, p. 237–256, 2002.
- MOHANTY, S. P.; KOUGIANOS, E. Biosensors: A tutorial review. **IEEE Potentials**, v. 25, n. 2, p. 35–40, 2006.
- MONOŠÍK, R.; STREĎANSKÝ, M.; ŠTURDÍK, E. Biosensors — classification, characterization and new trends. v. 5, n. 1, p. 109–120, 2012.
- NAIR, R. R. et al. Fine Structure Constant Defines Visual Transparency of Graphene. **Science**, v. 320, n. 5881, p. 1308–1308, 2008.
- NOVOSELOV, K. S. et al. Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films. **Science**, 2004.
- PALIWAL, A. et al. Dielectric Properties of SnO₂ Thin Film Using SPR Technique for Gas Sensing Applications. v. 2014, 2014.
- PALMSENS, C. E. I. **Biosensor**. Disponível em: <<https://www.palmsens.com/biosensor/>>. Acesso em: 26 fev. 2019.
- PATHAK, P. et al. Nanobiosensors and Their Use in Cancer. **J. Nanotechnol. Online**, p. 1–27, 2007.
- PATTNAIK, P. Surface Plasmon Resonance: Applications in Understanding Receptor–

Ligand Interaction. **Applied Biochemistry and Biotechnology**, v. 126, n. 2, p. 079–092, 2005.

PEREIRA, A. C.; SANTOS, A. DE S.; KUBOTA, L. T. TENDÊNCIAS EM MODIFICAÇÃO DE ELETRODOS AMPEROMÉTRICOS PARA APLICAÇÕES ELETROANALÍTICAS. **Química Nova**, v. 25, n. 6, p. 1012–1021, 2002.

PEREIRA, S. V. et al. A microfluidic device based on a screen-printed carbon electrode with electrodeposited gold nanoparticles for the detection of IgG anti-Trypanosoma cruzi antibodies. **Analyst**, v. 136, n. 22, p. 4745–4751, 2011.

PÉREZ, E. X. **Design, fabrication and characterization of porous silicon multilayer optical devices**. [s.l.] Universitat Rovira i Virgili, 2008.

POLYANSKIY, M. N. **Refractive Index Database**. Disponível em: <<https://refractiveindex.info/>>. Acesso em: 1 fev. 2019.

PORFÍRIO, F. F. DE O. Aplicação de Biossensores na Análise da Qualidade de Bebidas : Revisão. p. 1–33, 2014.

POULSEN, M. G. Investigation of the feasibility of SPR as a method for detection of Troponin-I by antibody binding for whole blood analysis. n. August 2009, 2010.

QUIÑÓNEZ, F. A. **Cristais Fotônicos 2D: Projeto e Fabricação**. [s.l.] Universidade Estadual de Campinas, 2006.

RAMO, S.; WHINNERY, J. R.; DUZER, T. VAN. **Fields and waves in communication electronics**. Third Edit ed. [s.l.] John Wiley & Sons, 2008.

RATHEE, K. et al. Biosensors based on electrochemical lactate detection : A comprehensive review. **Biochemistry and Biophysics Reports**, v. 5, p. 35–54, 2016.

RUBAB, M. et al. Biosensors for rapid and sensitive detection of Staphylococcus aureus in food. **Biosensors and Bioelectronics**, v. 105, n. January, p. 49–57, 2018.

SANTOS, J. F. L. et al. Ressonância de plasmon de superfície localizado e aplicação em biossensores e células solares. **Química Nova**, v. 39, n. 9, p. 1098–1111, 2016.

SARID, D.; CHALLENGER, W. A. **MODERN INTRODUCTION TO SURFACE PLASMONS Theory , Mathematica Modeling and Applications**. [s.l.] Cambridge University Press, 2010.

SCHELLER, F. W. et al. Biosensors : Trends and Commercialization *. p. 135–160, 1984.

SEGUNDO, J. E. D. V.; VILAR, E. O. Grafeno: uma revisão sobre propriedades, mecanismos de produção e potenciais aplicações em sistemas energéticos. **Revista Eletrônica de Materiais e Processos**, v. 11, n. 2, p. 54–57, 2016.

SERGEY V. GAPONENKO. **Introduction to Nanophotonics Nanophotonics**. [s.l.] Cambridge University Press, 2010.

SETHI, R. S. Transducer aspects of biosensors. **Biosensors and Bioelectronics**, v. 9, p. 243–264, 1994.

SILVA, D. D. DA. **PRODUÇÃO DE GRAFENO A PARTIR DO ÓXIDO DE GRAFITE E SUA APLICAÇÃO EM NANOCOMPÓSITOS DE MATRIZ EPOXÍDICA**. [s.l.] UNIVERSIDADE DO ESTADO DE SANTA CATARINA, 2011.

SINGH, P. SPR Biosensors: Historical Perspectives and Current Challenges. **Sensors and Actuators, B: Chemical**, v. 229, p. 110–130, 2016.

SINGH, S.; KALER, R. S. Performance analysis of evanescent wave absorption plasmonic optical sensor with COMSOL FEM method simulation. **Procedia Computer Science**, v. 125, p. 376–381, 2018.

SKOTTRUP, P. D. et al. detection Ph . D thesis Monoclonal antibody-based Surface Plasmon Resonance sensors for pathogen detection Peter Skottrup Hansen. 2007.

SOHRABI, F.; HAMIDI, S. M. Neuroplasmonics: From Kretschmann configuration to plasmonic crystals. **European Physical Journal Plus**, v. 131, n. 7, 2016.

SRIVASTAVA, S. K.; VAN RIJN, C. J. M.; JONGSMA, M. A. Biosensor-based detection of tuberculosis. **RSC Advances**, v. 6, n. 22, p. 17759–17771, 2016.

STROBBIA, P.; LANGUIRAND, E.; CULLUM, B. M. Recent advances in plasmonic nanostructures for sensing: a review. **Optical Engineering**, v. 54, n. 10, p. 100902, 2015.

SUVARNAPHAET, P.; PECHPRASARN, S. Graphene-based materials for biosensors: A review. **Sensors (Switzerland)**, v. 17, n. 10, 2017.

THÉVENOT, D. R. et al. Technical report Electrochemical biosensors : recommended definitions and classification. v. 16, p. 121–131, 2001.

TIQUIA-ARASHIRO, S. M. **Thermophilic Carboxydorophs and their Applications in**

Biotechnology. [s.l.] Springer, 2014.

TIWARI, K. K. **BIMETALLIC-WAVEGUIDE COUPLED SENSORS FOR TUNABLE PLASMONIC DEVICES**. [s.l.] The University of Texas at Arlington, 2015.

TRANSPARENTE, C.; PIMENTEL, E.; SILVA, D. Filmes De Grafeno Para Aplicação Como Óxido. 2014.

TURNER, A. P. F. Biosensors: Sense and sensibility. **Chemical Society Reviews**, v. 42, n. 8, p. 3184–3196, 2013.

TURNER, A. P. F.; KARUBE, I.; WILSON, G. S. **BIOSENSORS Fundamentals and Applications**. [s.l.: s.n.]. v. 53

VIGNESHVAR, S. et al. Recent Advances in Biosensor Technology for Potential Applications – An Overview. **Frontiers in Bioengineering and Biotechnology**, v. 4, n. February, p. 1–9, 2016.

WANG, J. From DNA biosensors to gene chips. v. 28, n. 16, p. 3011–3016, 2000.

WEI, D.; KIVIOJA, J. Graphene for energy solutions and its industrialization. **Nanoscale**, v. 5, p. 10108–10126, 2013.

YANG, A. et al. Coherent Light Sources at the Nanoscale. **Annual Review of Physical Chemistry**, v. 68, n. 1, p. 83–99, 2017.

YAO, F.; COJOCARU, C. S. Carbon-Based Nanomaterials as an Anode for Lithium Ion Battery Carbon-Based Nanomaterials as an Anode for Lithium Ion Battery. p. 1–173, 2014.

YE, Q. et al. Polarization-dependent optical absorption of graphene under total internal reflection. **Applied Physics Letters**, v. 102, n. 2, 2013.

ZANELLA, F.; JIMENEZ, M. J. S.; DARTORA, C. A. Os fundamentos da física dos férmions de Dirac sem massa em $(1 + 2) - D$ e o grafeno. **Revista Brasileira de Ensino de Física**, v. 37, p. 3301, 2015.

ZHAO, Y. et al. Review on the graphene based optical fiber chemical and biological sensors. **Sensors and Actuators, B: Chemical**, v. 231, n. 61371200, p. 324–340, 2016.

ZHONG, Y. et al. Review of mid-infrared plasmonic materials. **Journal of Nanophotonics**, v. 9, n. 1, p. 093791, 2015.

ZHOU, C. et al. Fiber optic surface plasmon resonance sensor for detection of E. coli

O157:H7 based on antimicrobial peptides and AgNPs-rGO. **Biosensors and Bioelectronics**, v. 117, p. 347–353, 2018.

APÊNDICE A

Com intuito de dar continuação para o aprimoramento deste trabalho o código fonte, geometrias e as configurações, que foram utilizadas para obtenção dos resultados, serão tornados públicos para que sejam utilizados e modificados a quem interessar.

```
function Calculo_de_SPR
%variaveis de comprimento de onda, indice de refração complexo e angulo de incidencia
dentro do prisma
d_Au =40E-9;           %espessura do ouro/prata
theta_inicio = 45;      %Angulo de inicio
theta_slut = 68;        %Angulo final
thetasteps =10000;      %Amostragem
theta_inicio=theta_inicio/360*2* pi ; %conversão de angulo
theta_slut=theta_slut/360*2* pi ;
deltatheta =( theta_slut-theta_inicio) / ( thetasteps -1);
for t = 1: 1: thetasteps ;
theta=theta_inicio+deltatheta *( t -1);      %contador de angulo
angulo( t )= theta / ( 2* pi ) * 360;  %eixo x
end
figure ( 1 ) ;
hold on
for l =1.33:0.005:1.35
n_buffer =l;
[ Refletancia ] = Valor_de_refletancia(n_buffer ,d_Au , angulo , theta_inicio , theta_final ,
deltatheta , thetasteps );

if l==1.330
plot( angulo , Refletancia , ' k ' )
[rmin1,xmin1] = min(Refletancia); % SPR minimo
[rmax1,xmax1] = max(Refletancia);
xmin1 = (theta_inicio+(xmin1*deltatheta))*(180/pi);
indice_ref1=l;
% ***Calculo de Precisão***
```

```

rmin1; %Menor amplitude
xmin1 %Angulo de incidencia minimo
rmax1; %Maior amplitude da esquerda
Refletancia(end); % Maior amplitude da direita
Dir = (Refletancia(end)-rmin1)/2
Esq = (rmax1-rmin1)/2
idx_yEsq = min(find(abs(Refletancia-Esq)<0.0003))
idx_yDir = max(find(abs(Refletancia-Dir)<0.0002))
idx_Centro = find(Refletancia==rmin1)
x_Dir = angulo(idx_yDir) % ângulo médio da direita
x_Esq = angulo(idx_yEsq) % ângulo médio da esquerda
x_Cen = angulo(idx_Centro) %ângulo do centro
FWHM = 1/(x_Dir-x_Esq) % FWHM dividido por 1
plot( angulo , Refletancia , 'k','LineWidth',1 )
hold on
plot (angulo(idx_Centro), Refletancia(idx_Centro), '*')
plot (angulo(idx_yDir), Refletancia(idx_yDir), '*')
plot (angulo(idx_yEsq), Refletancia(idx_yEsq), '*')
end
%if l==1.335
%plot( angulo , Refletancia , 'g' )
%[rmin2,xmin2] = min(Refletancia); % SPR minimo
%xmin2 = (theta_inicio+(xmin2*deltatheta))*(180/pi);
%xmin2;
%rmin2 % valor minimo de Y
%diferenca_angulo=xmin2-xmin1;
%indice_ref2=l;
%dif_indice=indice_ref2-indice_ref1;
%sensitividade=diferenca_angulo/dif_indice
%end
%if l==1.340
%plot( angulo , Refletancia , 'm' )
%[rmin3,xmin3] = min(Refletancia); % SPR minimo
%xmin3 = (theta_inicio+(xmin3*deltatheta))*(180/pi);
%diferenca_angulo=xmin3-xmin2;

```

```

%indice_ref3=l;
%dif_indice=indice_ref3-indice_ref2;
%sensitividade=diferenca_angulo/dif_indice
%end
%if l==1.345
%plot( angulo , Refletancia , ' c ' )
%[rmin4,xmin4] = min(Refletancia); % SPR minimo
%xmin4 = (theta_inicio+(xmin4*deltatheta))*(180/pi);
%rmin4 %valor mínimo de Y
%xmin4
%diferenca_angulo=xmin4-xmin3;
%indice_ref4=l;
%dif_indice=indice_ref4-indice_ref3;
%sensitividade=diferenca_angulo/dif_indice
%end
%if l==1.350
%plot( angulo , Refletancia , ' b ' )
%[rmin4,xmin5] = min(Refletancia); % SPR minimo
%xmin5 = (theta_inicio+(xmin5*deltatheta))*(180/pi);
%diferenca_angulo=xmin5-xmin4;
%indice_ref5=l;
%dif_indice=indice_ref5-indice_ref4;
%sensitividade=diferenca_angulo/dif_indice
end

legend ( ' n_3= 1.330 ' , ' n_3= 1.335 ' , ' n_3= 1.340 ' , ' n_3= 1.345 ' , ' n_3= 1.350 ' , ' Location ' ,
' NorthEastOutside ' )
xlabel ( ' Angulo de incidencia Normalizado' )
ylabel ( ' Refletancia ' )

end
end

function [ Refletancia ] = Valor_de_refletancia(n_buffer ,d_Au , angulo , theta_inicio ,
theta_final , deltatheta , thetasteps )
lambda_0= 633E-9;          %Comprimento de onda

```

```

n_prisma = 1.723;           %Indice de refração do prisma SF10
n_Cr=4.1395-2.3152i;        %Indice de refração do cromo
n_Au= 0.18344-3.4332i;      %Indice de refração do ouro ou prata
n_Gr=3-1.149i;              %Indice de refração do grafeno
d_Cr=1E-9;                  %Espessura do cromo
d_Gr=6.12E-9;               %Quantidade de camadas de grafeno (1 camada = 0.34 nm)
d_Au=d_Au;                   %Espessura do ouro ou grafeno
n1=n_prisma;
n2=n_Cr ;
n3=n_Au;
n4=n_Gr;
%n5=n_Ma;
n5=n_buffer ;
eps1=n1^2; %prisma
eps2=n2^2; %cromio
eps3=n3^2; %ouro
eps4=n4^2; %Grafeno
eps5=n5^2; %buffer
k=2*pi /lambda_0 ; %Omega
for t = 1: 1: thetasteps
theta=theta_inicio+deltatheta *( t -1);
kx=k* n_prisma * sin( theta ) ;
kz1=sqrt (-(kx^2)+k^2*eps1 ) ;
if imag ( kz1 ) >0,
kz1=-kz1 ;
end
kz2=sqrt(-(kx^2)+k^2*eps2 ) ; %cromio
if imag ( kz2 ) >0,
kz2=-kz2 ;
end
kz3=sqrt(-(kx^2)+k^2*eps3 ) ; %ouro
if imag( kz3 ) >0,
kz3=-kz3 ;
end
kz4=sqrt(-(kx^2)+k^2*eps4 ) ; %grafeno

```

```

if imag ( kz4 )>0,
kz4=-kz4 ;
end
kz5=sqrt(-(kx^2)+k^2*eps5 ) ; % buffer
if imag ( kz5 ) >0,
kz5=-kz5 ;
end
beta_Cr=kz2*d_Cr; %2*pi /lambda_0*(n_Cr*d_Cr*cos( theta ) ) ;
beta_Au=kz3*d_Au; %2*pi /lambda_0*(n_Au*d_Au*cos( theta ) ) ;
%beta_Ma=kz5*d_Ma; %2*pi /lambda_0*(n_Gr*d_Gr*cos( theta ) ) ;
beta_Gr=kz4*d_Gr;
%***matriz de propagacao***
Propagacao_Cr=zeros( 2 ) ;
Propagacao_Cr(1 ,1)= exp(-1i *beta_Cr ) ;
Propagacao_Cr(2 ,2)= exp ( 1i *beta_Cr ) ;
Propagacao_Au=zeros( 2 ) ;
Propagacao_Au(1 ,1)= exp(-1i *beta_Au ) ;
Propagacao_Au(2 ,2)= exp ( 1i *beta_Au ) ;
Propagacao_Gr=zeros( 2 ) ;
Propagacao_Gr(1 ,1)= exp(-1i *beta_Gr ) ;
Propagacao_Gr(2 ,2)= exp ( 1i *beta_Gr ) ;
%Propagacao_Ma=zeros( 2 ) ;
%Propagacao_Ma(1 ,1)= exp(-1i *beta_Ma ) ;
%Propagacao_Ma(2 ,2)= exp ( 1i *beta_Ma ) ;
b1=(n1/n2 )^2*( kz2 / kz1 ) ;
b2=(n2/n3 )^2*( kz3 / kz2 ) ;
b3=(n3/n4 )^2*( kz4 / kz3 ) ;
b4=(n4/n5 )^2*( kz5 / kz4 ) ;
%b5=(n5/n6 )^2*( kz6 / kz5 ) ;
%***coeficientes de reflexao***
reflexao_prisma_Cr=(1-b1)/(1+ b1 );
reflexao_Cr_Au=(1-b2)/(1+ b2 ) ;
reflexao_Au_Gr=(1-b3)/(1+b3);
reflexao_Gr_buffer=(1-b4)/(1+ b4 ) ;
%***coeficientes de transmissao***

```

```

transmissao_prisma_Cr=(2*( n1/n2 ))/(1+ b1 ) ;
transmissao_Cr_Au=(2*( n2/n3 ))/(1+ b2 ) ;
transmissao_Au_Gr=(2*( n3/n4 ))/(1+ b3 ) ;
transmissao_Gr_buffer=(2*( n4/n5 ))/(1+ b4 ) ;
%***matriz dinamica***
D_prisma_Cr=ones( 2 )/ transmissao_prisma_Cr ;
D_prisma_Cr(1,2)= reflexao_prisma_Cr / transmissao_prisma_Cr ;
D_prisma_Cr(2,1)= reflexao_prisma_Cr / transmissao_prisma_Cr ;
D_Cr_Au=ones( 2 )/transmissao_Cr_Au ;
D_Cr_Au(1,2)=reflexao_Cr_Au/transmissao_Cr_Au ;
D_Cr_Au(2,1)=reflexao_Cr_Au/transmissao_Cr_Au ;
D_Au_Gr=ones( 2 )/transmissao_Au_Gr;
D_Au_Gr(1,2)=reflexao_Au_Gr/transmissao_Au_Gr;
D_Au_Gr(2,1)=reflexao_Au_Gr/transmissao_Au_Gr;
%D_Gr_Ma=ones( 2 )/transmissao_Gr_Ma;
%D_Gr_Ma(1,2)=reflexao_Gr_Ma/transmissao_Gr_Ma;
%D_Gr_Ma(2,1)=reflexao_Gr_Ma/transmissao_Gr_Ma;
D_Gr_buffer=ones( 2 ) / transmissao_Gr_buffer ;
D_Gr_buffer (1,2)= reflexao_Gr_buffer / transmissao_Gr_buffer ;
D_Gr_buffer (2,1)= reflexao_Gr_buffer / transmissao_Gr_buffer ;
S_prisma_buffer=D_prisma_Cr*Propagacao_Cr*D_Cr_Au*Propagacao_Au*D_Au_Gr*Prop
agacao_Gr*D_Gr_buffer ; %Produtorio das matrizes P e D
Refletancia ( 1 , t)=( abs ( S_prisma_buffer ( 1 , 2 ) / S_prisma_buffer ( 2 , 2 ) ) )^2 ;
                                %Valor da refletancia normalizado

end
end

```

APÊNDICE B

A Tabela 5 apresenta as configurações utilizadas no Comsol para simulações.

Tabela 5: Parâmetros de configuração no Comsol

lambda	632[nm]	6.32E-7 m	Comprimento de onda
f0	c_const/lambda	4.7436E14 1/s	Frequência
t_Ag	50[nm]	5E-8 m	Tamanho da camada de prata ou ouro
t_glass	500[nm]	5E-7 m	Tamanho da camada do prisma
t_air	1000[nm]	1E-6 m	Tamanho da camada do ar
L	2000[nm]	2E-6 m	Largura
theta1	0[deg]	0 rad	Angulo de incidência
n1	1.723	1.723	Índice de refração do prisma (SF10)
n2	1.33	1.33	Índice de refração da água
theta2	asin(sin(theta1)*n1/n2)	0 rad	Angulo de refração
eps1	n1^2	2.9687	
eps2	n2^2	1.7689	
t_Gr	0.34[nm]	3.4E-10 m	Tamanho da camada de grafeno