

## ANÁLISE DE PERFORMANCE DE SENSORES NANOFOTÔNICOS NA CONFIGURAÇÃO DE KRETSCHMANN

Gustavo Jonson Silva (IC) e Dario Andres Bahamon Ardila (Orientador)

**Apoio: PIBIC Mackpesquisa**

### RESUMO

Este artigo aborda os conceitos de plasmons de superfície, ressaltando o fenômeno e as propriedades que podem ser observadas na presença deste evento físico, a fim de introduzir o princípio de funcionamento de sensores nanofotônicos, em especial, os sensores nanofotônicos na configuração de Kretschmann, que tem os seus principais elementos descritos, dando noções básicas necessárias para o entendimento desse sistema. Além disso, são vistos e usados importantes conceitos ópticos como polarização de luz, refração e coeficientes de refletividade de Fresnel, que não só são úteis para os sensores nanofotônicos, mas, para praticamente todos os sistemas ópticos. O que serviu de base para a simulação de situações simples, como um arranjo óptico de duas camadas com índices de refração diferentes, que foi usado para verificação dos métodos de simulação, que assim que confirmados, evoluiu o modelo para um conjunto de três meios, que passou a considerar mais frequências de luz. A nova configuração foi comparada com o arranjo anterior, repetindo as camadas utilizadas, e comparando com as informações já obtidas na literatura do tema. Nesses dois primeiros casos, foram observados os comportamentos da refletividade para as diferentes polarizações de luz e como os plasmons reagem na presença de cada uma. Levando em consideração os resultados obtidos, um novo meio foi adicionado ao modelo, e, com variações controladas dos parâmetros do sistema, foram calculados fatores importantes para a avaliação do sensor, como sensibilidade e figura de mérito, a partir dos quais foi estipulada uma melhor condição de operação.

**Palavras-chave:** Sensibilidade. Configuração de Kretschmann. Plasmons de superfície.

### ABSTRACT

This article approaches the concepts of plasmons and surface plasmons, emphasizing this phenomenon and properties that can be witnessed in the presence of this physical event, with the goal of introducing the operation principle of nanophotonic sensors, focusing in the nanophotonic sensors in the Kretschmann configuration, which has its main elements described, giving the basic notions necessary for the understanding of the system. Furthermore, relevant optical concepts are used, like light polarization, refraction, and Fresnel coefficients for reflection, useful not only for nanophotonic sensor, but for basically any optical system. These are the basis for simple simulations, like two layers optical arrangement with different refractive indexes, used to verify the simulation methods, and once confirmed,

evolved the model to a three-layer optical joint, also considering more light frequencies. The new configuration was compared to the previous arrangement, repeating the used layers, and comparing it with information available in the theme literature. In the two first models, observations about the behavior of the reflectance for the different polarizations and about the plasmons in the presence of these polarizations were taken. Considering the obtained results, a new media was added, and with controlled parameters variations in the system, key factors for the sensors evaluation were calculated, such as sensitivity and figure of merit, enabling to stipulate a best operation condition.

**Keywords:** Sensitivity. Kretschmann configuration. Surface Plasmons.

## 1. INTRODUÇÃO

Após vivenciar uma era de pandemia, tornou-se ainda mais evidente a necessidade de entender melhor vírus, anticorpos e biomoléculas, sendo essencial detectá-los e analisá-los de uma maneira rápida e precisa. Nesse quesito os biossensores ópticos oferecem detecção em tempo real e sem rótulos; além disso, em comparação com sensores elétricos ou químicos os biossensores ópticos oferecem grande seletividade, alta sensibilidade e resistência a corrosão. Dentre as técnicas ópticas de sensoriamento, o uso de plasmons de superfície (SP) está entre as tecnologias mais promissoras para atingir baixos limites de detecção.

Existem diferentes configurações de sensores SP, sendo uma delas a configuração de Krestchman, que é uma das mais utilizadas e a abordada neste trabalho. Além disso, quando se considera a configuração de Krestchman, há distintas maneiras de se trabalhar, como por exemplo, utilizando uma frequência de luz fixa e variando o seu ângulo de incidência (interrogação angular), ter o ângulo de incidência fixo e variar a frequência de luz incidida (interrogação em frequência), e ainda observando a mudança da fase da onda eletromagnética ao interagir com os plasmons (interrogação em fase). Com isto em vista, neste trabalho será estudado o comportamento desses sensores nanofotônicos plasmonicos em cada uma dessas situações e avaliada a condição de melhor performance em cada cenário.

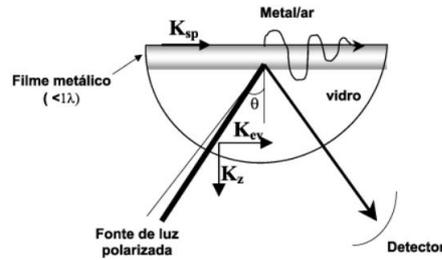
## 2. REFERENCIAL TEÓRICO

As primeiras observações documentadas de SP são de 1902, feitas por Wood R. W. (1902), que iluminou uma grade de difração metálica com luz policromática e notou finas faixas escuras no espectro da luz difratada, que foram descritas como anomalias. Porém, apenas mais tarde e após o trabalho de cientistas como Fano U. (1941), Thurbadar T. (1959), Otto A. (1968) que os SP foram identificados e associados com a excitação de ondas eletromagnéticas na superfície (HOMOLA et al, 2006). Hoje, já se sabe que os plasmons são oscilações coletivas de elétrons excitados por ondas eletromagnéticas em um meio condutor, e que também há uma categoria específica de plasmons chamados de SP, que ocorrem na interface de um material condutor com dielétrico, criando ondas que se propagam nessa superfície, gerando propriedades ópticas que podem ser exploradas, como por exemplo, uma diminuição intensa e repentina da refletividade de um sistema óptico.

Os componentes necessários para montar um biossensor de ressonância de plasmons de superfície (SPR) na configuração de Kretschmann (Figura 1 e Figura 2) são: um emissor de um feixe de luz; um mecanismo de rotação para realizar uma varredura angular; um polarizador de luz; um meio de propagação da luz; um metal; um analito dielétrico e um sensor óptico. Como já citado anteriormente, este tipo de dispositivo tem boa parte do funcionamento

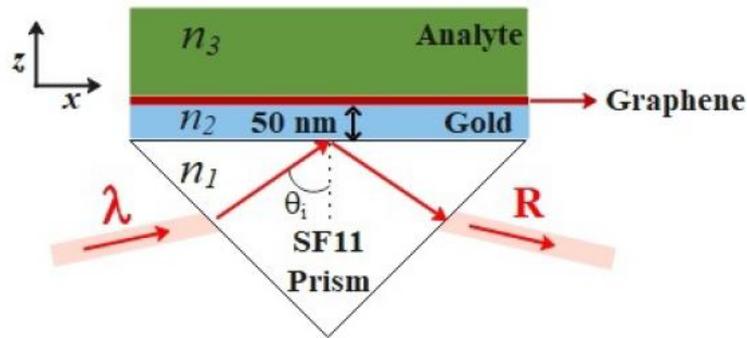
baseado em excitação plasmônica, e esta excitação é causada justamente pelo estímulo óptico aos elétrons livres das estruturas.

Figura 1 – Componentes de sensor nanofotônico na configuração de Kretschmann



Fonte: CARVALHO, R. M. DE; RATH, S.; KUBOTA, L. T. (2003).

Figura 2 – Exemplo de estrutura de sensor nanofotônico na configuração de Kretschmann



Fonte: ALMEIDA, Aline Dos Santos *et al.* (2022)

As condições matemáticas necessárias para que a SPR ocorra são, que a constante de propagação da onda de SP ( $K_{SP}$ ) (Equação 1) e a constante de propagação da onda evanescente proveniente do feixe de luz ( $K_{OE}$ ) (Equação 2) sejam iguais ( $K_{SP} = K_{OE}$ ).

$$K_{SP} = \frac{\omega}{c} \left( \frac{\epsilon_m \epsilon_s}{\epsilon_m + \epsilon_s} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (1)$$

$$K_{OE} = \frac{\omega}{c} \sqrt{\epsilon_c} \sin(\theta) \quad (2)$$

Sendo, para as equações:  $\omega$  a frequência do feixe de luz incidente;  $c$  a velocidade da luz no vácuo;  $\epsilon_m$  a constante dielétrica do metal;  $\epsilon_s$  a constante dielétrica do meio dielétrico;  $\epsilon_c$  a constante dielétrica da primeira camada de vidro e  $\theta$  o ângulo de incidência da luz.

Pelo método de interrogação angular a fonte de luz na entrada incide com um ângulo variável, o ângulo de SPR aparece no sensor como um mínimo na refletividade, uma vez que a energia da luz incidente é transferida para os SP.

No método de interrogação em frequência, o ângulo de incidência da luz é mantido fixo, mas desta vez, a frequência da luz incidida é variada, e novamente a SPR aparece no sensor como um mínimo na refletividade.

O método de interrogação em fase, utiliza a propriedade de que ao interagir com os SP, o argumento complexo da luz refletida sofre uma mudança muito rápida, assim, é possível detectar os plasmons pela mudança a fase da onda eletromagnética.

### 3. METODOLOGIA

O método de estudo consiste basicamente em simular, utilizando o software Octave, o comportamento de sistemas ópticos, se baseando nos coeficientes de refletividade Fresnel, e observar as variações na refletividade com a alteração de parâmetros controlados.

Para trabalhar com sistemas ópticos e principalmente com refletividade, é preciso conhecer os coeficientes de Fresnel, equações desenvolvidas pelos estudos do físico francês Augustin Jean Fresnel, e que são usadas para calcular a razão entre os campos eletromagnéticos de uma onda refletida em relação aos campos eletromagnéticos da onda incidida, e a razão entre os campos eletromagnéticos de uma onda transmitida em relação aos campos eletromagnéticos da onda incidida, ambos considerando um sistema óptico de dois meios e a polarização da onda, que pode apresentar polarização S ou polarização P.

A polarização S, ocorre quando o campo magnético de uma onda eletromagnética está no mesmo plano que plano de incidência da luz. Por sua vez, a polarização P, ocorre quando o campo elétrico de uma onda eletromagnética está no mesmo plano que o plano incidente. Sendo as equações para cálculo da refletividade em polarização S (Equação 3) e polarização P (Equação 4) mostradas respectivamente a seguir:

$$R_s = \left| \frac{n_1 \cos(\theta_1) - n_2 \cos(\theta_2)}{n_1 \cos(\theta_1) + n_2 \cos(\theta_2)} \right|^2 \quad (3)$$

$$R_p = \left| \frac{n_2 \cos(\theta_1) - n_1 \cos(\theta_2)}{n_2 \cos(\theta_1) + n_1 \cos(\theta_2)} \right|^2 \quad (4)$$

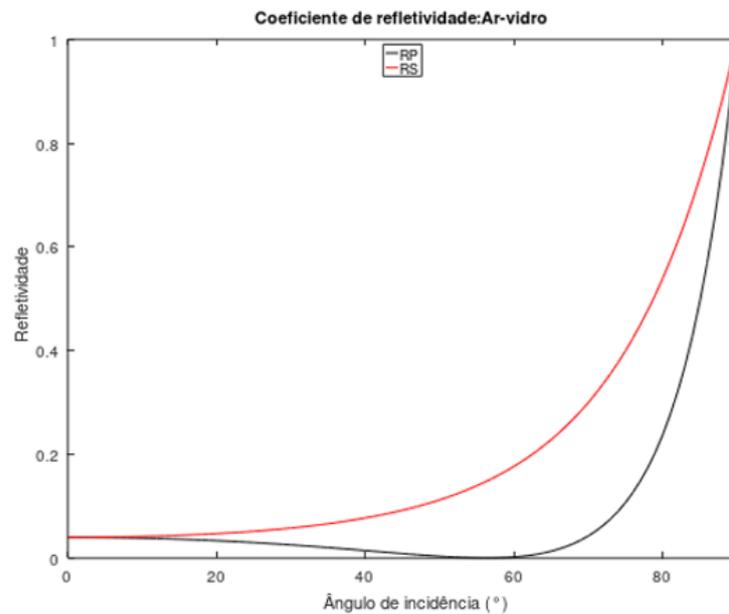
Sendo:  $R_s$  o coeficiente de refletividade para polarização S,  $R_p$  o coeficiente de refletividade para polarização P,  $n_1$  o índice de refração do meio 1,  $n_2$  o índice de refração do meio 2,  $\theta_1$  o ângulo de incidência da luz e  $\theta_2$  o ângulo de refração da luz. Destacando que o ângulo de refração " $\theta_2$ " é calculado através a lei de Snell (Equação 5).

$$n_1 * \text{sen}(\theta_1) = n_2 * \text{sen}(\theta_2) \quad (5)$$

#### Refletividade para 2 meios:

Para dar início as simulações, foram trabalhados sistemas mais simples, com apenas dois meios e características já bem conhecidas, a fim de verificar a eficácia do método adotado. Para tal, foi simulado o sistema ar-vidro, com o ar apresentando índice de refração  $n_1=1$  e vidro índice de refração  $n_2=1,5$ . Para a simulação, foram calculados os coeficientes de refletividade de Fresnel para as polarizações S e P, utilizando as equações já apresentadas e variando o ângulo de incidência da luz de  $0^\circ$  à  $90^\circ$  a passos de  $1^\circ$ . O que resultou no gráfico (Gráfico 1) a seguir:

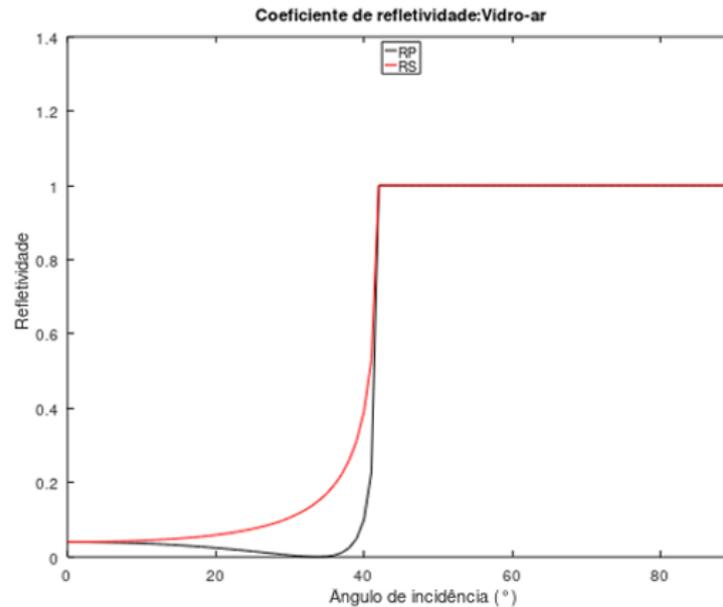
Gráfico 1 - Coeficiente de refletividade Ar-vidro



Fonte: Elaborado pelo autor (2023)

Em seguida, foi alterada a ordem dos dois meios, e foi repetido o processo, gerando assim o seguinte gráfico (Gráfico 2):

Gráfico 2 - Coeficiente de refletividade Vidro-ar



Fonte: Elaborado pelo autor (2023)

Gráfico no qual já é possível observar fenômenos importantes, como o ângulo crítico, que é o ângulo onde ocorre refletividade total e pode ser calculado com a lei de Snell. Sendo o ângulo crítico, o ângulo de incidência em que o ângulo de refração passa a ser  $90^\circ$ . Que no caso do sistema vidro-ar, com índices de refração  $n_1=1,5$  e  $n_2=1$ , ao calcular utilizando a lei de Snell, e considerando as condições estabelecidas, tem-se que o ângulo crítico é de aproximadamente  $41,81^\circ$ , o que está de acordo com o gráfico gerado.

É importante destacar que, para cálculos com ângulo de incidência acima do ângulo crítico, a Lei de Snell terá como resposta um número cujo seno é maior que 1, portanto, terá uma resposta no conjunto dos números complexos. Deste modo, nos cálculos de refletividade das polarizações S e P, ao invés de calcular o módulo do termo principal e elevá-lo ao quadrado, é preciso multiplicar este termo pelo seu complexo conjugado.

Como as observações feitas para sistema de dois meios condizem com a teoria e estudos do caso, foi dado prosseguimento ao trabalho, adicionando mais um meio ao sistema.

### Refletividade para 3 meios:

Os sensores já começam a funcionar a partir de três camadas, e para a modelagem da simulação, foram assumidas as características do sensor usado no artigo "A Critical Analysis on the Sensitivity Enhancement of Surface Plasmon Resonance Sensors with Graphene" (Almeida et al, 2022), no qual foi incidida uma luz com comprimento de onda  $\lambda=633$  nm em uma configuração de Kretschmann, onde uma primeira camada é um prisma de vidro com índice de refração  $n_1=1,7786$ ; a segunda camada é uma película fina de ouro de 50 nm

e índice de refração  $n_2=0,1834+3,4332i$  e por fim, um analito aquoso considerado semi-infinito, com índice de refração  $n_3=1,332$ . A espessura ótima da camada de ouro pode ser calculada, de acordo com os estudos do artigo “*Electromagnetic Theory of Surface Plasmons*”, que para comprimentos de onda entre 600 e 1000 nm, a espessura ótima para o filme de ouro varia entre 44 e 50 nm (Homola, 2006).

Para o sistema de três meios, a refletividade total do sistema, pode ser calculada através da equação (Equação 6):

$$R_{123} = \frac{R_{12} + R_{23} * e^{i2\varphi_2}}{1 + R_{12} * R_{23} * e^{i2\varphi_2}} \quad (6)$$

Onde  $R_{123}$  é a refletividade para o sistema de três meios,  $R_{ij}$  corresponde ao coeficiente de reflexão de Fresnel entre os meios  $i$  e  $j$ ,  $i$  é a unidade imaginária, e  $\varphi_i$  é uma variável que depende das características do meio, que pode ser calculada com equações (Equações 7; 8 e 9):

$$\varphi_i = k_{zi} * d_i \quad (7)$$

$$k_{zi} = \sqrt{n_i^2 * \frac{\omega^2}{c^2} - k_{xi}^2} \quad (8)$$

$$k_x = k_{xi} = n_1 \frac{\omega}{c} \text{sen}(\theta_1) \quad (9)$$

Nas quais  $d_i$  é a espessura do meio,  $c$  é a velocidade da luz no vácuo,  $\omega$  a frequência angular da luz,  $k_{zi}$  é o vetor de onda na direção  $z$  do guia e  $k_{xi}$  é o vetor de onda na direção  $x$  do guia, seguindo a mesma orientação dos eixos da figura 2, que por apresentar simetria translacional ao longo do eixo- $x$ , é igual para todos os meios.

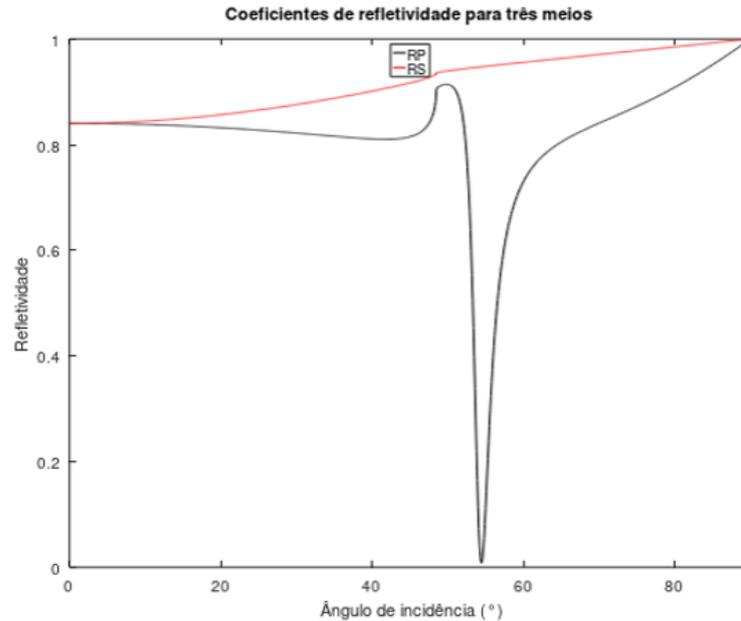
A equação para refletividade para três meios, pode ser usada para ambas as polarizações, sendo necessário apenas escolher a polarização considerada para os cálculos dos coeficientes de reflexão de Fresnel do caso trabalhado.

A partir do modelo e das equações apresentadas, foram feitas verificações simples para garantir a efetividade desta configuração. Caso duas camadas consecutivas apresentem o mesmo índice de refração elas acabam se comportando como um único meio, assim, foram repetidos os cenários anteriores. Para o sistema ar-vidro,  $n_1$  teve o valor de índice de refração igual a 1 e  $n_3$  igual a 1,5, com  $n_2$  assumindo o mesmo índice que a camada 1 ou 3, sendo que em ambos os casos de  $n_2$ , a resposta foi idêntica a simulação anterior (Gráfico 1). Para o sistema vidro-ar, o índice de refração  $n_1$  foi igual a 1,5 e  $n_3$  igual a 1, com  $n_2$  assumindo o mesmo índice que a camada 1 ou 3, sendo que em ambos os casos de  $n_2$ , a resposta foi

idêntica a simulação anterior (Gráfico 2). Obtendo os resultados esperados, deu-se continuidade aos estudos.

Em seguida, foi simulado o comportamento da refletividade para o novo sistema ( $n_1=1,7786$ ;  $n_2=0,1834+3,4332i$ ;  $n_3=1,332$ ), aplicando o mesmo método de varredura executado no sistema de dois meios, o que possibilitou plotar o gráfico a seguir (Gráfico 3):

Gráfico 3 - Refletividade para três meios



Fonte: Elaborado pelo autor (2023)

Ao observar o gráfico, é notável que para a polarização P há uma queda abrupta nos níveis de refletividade por volta da região de  $54,5^\circ$  de ângulo de incidência, o que corresponde a formação dos SP e está de acordo com as observações feitas no artigo anteriormente citado. Em contraponto, a polarização S não consegue excitar plasmons em nenhum ponto de toda a varredura, portanto, não pode ser usada na construção dos sensores nanofotônicos.

Outro parâmetro que influencia na excitação plasmônica, é a frequência da luz incidida, considerando este fato, o próximo objetivo para as simulações foi deixar de trabalhar com uma frequência de luz fixa e admitir uma banda de frequências em seu lugar, mais especificamente na região entre  $3,846 \cdot 10^{14}$  Hz e  $7,895 \cdot 10^{14}$  Hz, que correspondem ao espectro eletromagnético visível e regiões próximas do infravermelho e ultravioleta. Criando assim, um gráfico de refletividade em função do ângulo de incidência e da frequência da luz incidida.

Neste novo cenário, algumas mudanças em relação ao modelo anterior são necessárias, uma vez que, por ter um metal presente no sistema, sendo este metal o ouro, o seu índice de refração não pode ser considerado constante para a banda de frequências

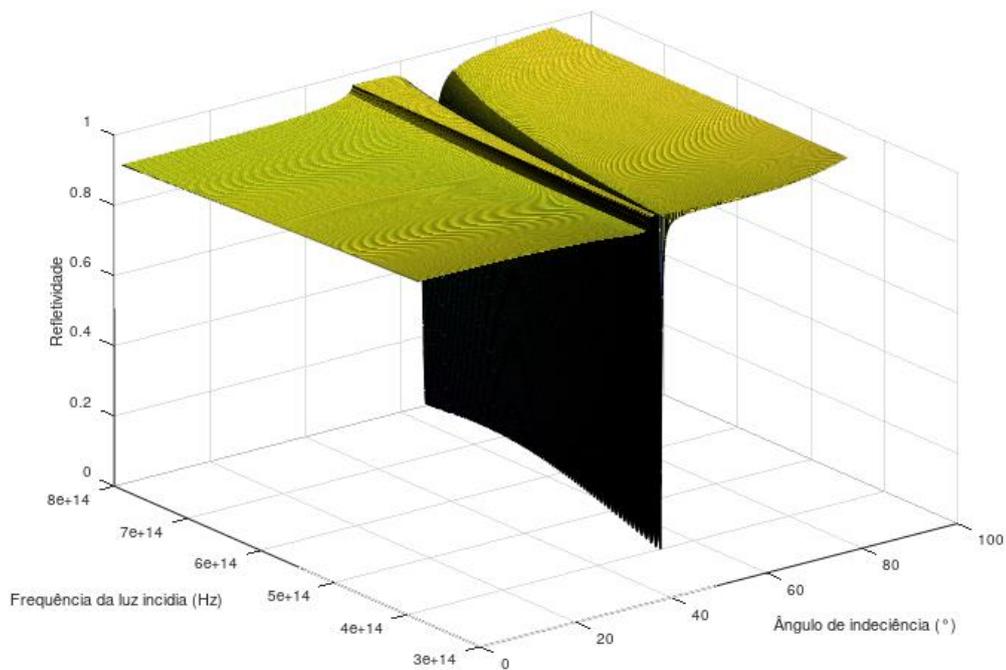
adotada. Deste modo, o novo índice de refração variável do ouro pode ser calculado por uma equação baseada no modelo de Drude (Equação 10):

$$n_{Au} = \sqrt{1 - \frac{\omega_p^2}{\lambda^2 + i \cdot \lambda \cdot \gamma}} \quad (10)$$

Na qual  $n_{Au}$  é o índice de refração do ouro,  $\omega_p$  é a frequência de plasma, considerada  $68557 \text{ cm}^{-1}$ ,  $\lambda$  é o comprimento de onda em cm para este caso,  $i$  é a unidade imaginária e  $\gamma$  é a largura de linha, considerada  $364 \text{ cm}^{-1}$ .

Tomando esta consideração ao ensaio anterior, pode-se plotar o gráfico 3D de refletividade em função da frequência da luz incidida e ângulo de incidência. Resultando no gráfico (Gráfico 4):

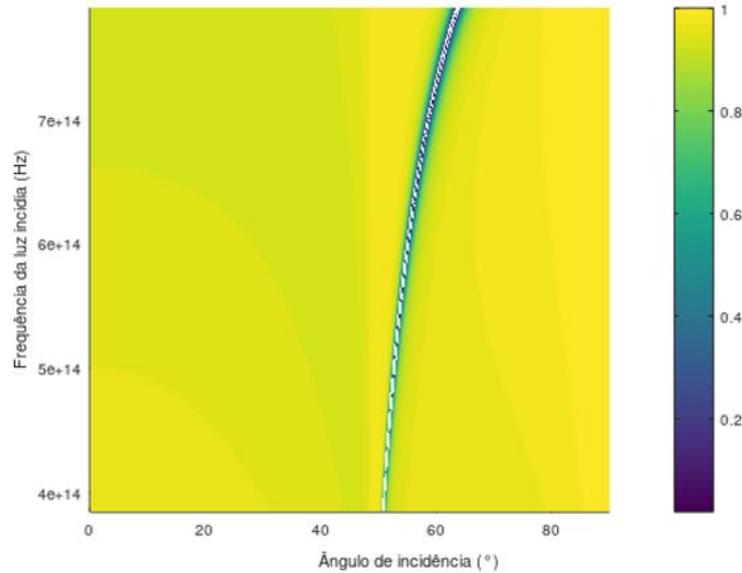
Gráfico 4 - Refletividade em função da frequência da luz incidida e ângulo de incidência para três meios



Fonte: Elaborado pelo autor (2023)

Para uma melhor visualização, há a visão do topo do gráfico (Gráfico 5:)

Gráfico 5 - Visão do topo do gráfico de refletividade em função da frequência da luz incidida e ângulo de incidência para três meios



Fonte: Elaborado pelo autor (2023)

Nos gráficos anteriores a frequência está em Hz e o ângulo em graus, ao lado da visão do topo do gráfico de refletividade há uma barra colorida que indica os valores de refletividade de acordo com a cor. É possível observar uma região onde os níveis de refletividade são muito mais baixos (região azul e sem cor no meio do gráfico), que corresponde aos valores de frequência e ângulo nos quais há a formação de SP.

Uma característica que os analitos aquosos apresentam é a diferença de níveis de concentração de material ao decorrer de seu volume, pois a maior parte das moléculas tende a decantar, formando uma camada mais densa na região inferior da substância. Então, para aumentar a fidelidade da simulação, outra camada foi adicionada ao modelo do sensor.

**Refletividade para 4 meios:**

Para realizar os cálculos de refletividade total do sistema de quatro camadas, a equação aplicada foi (Equação 11):

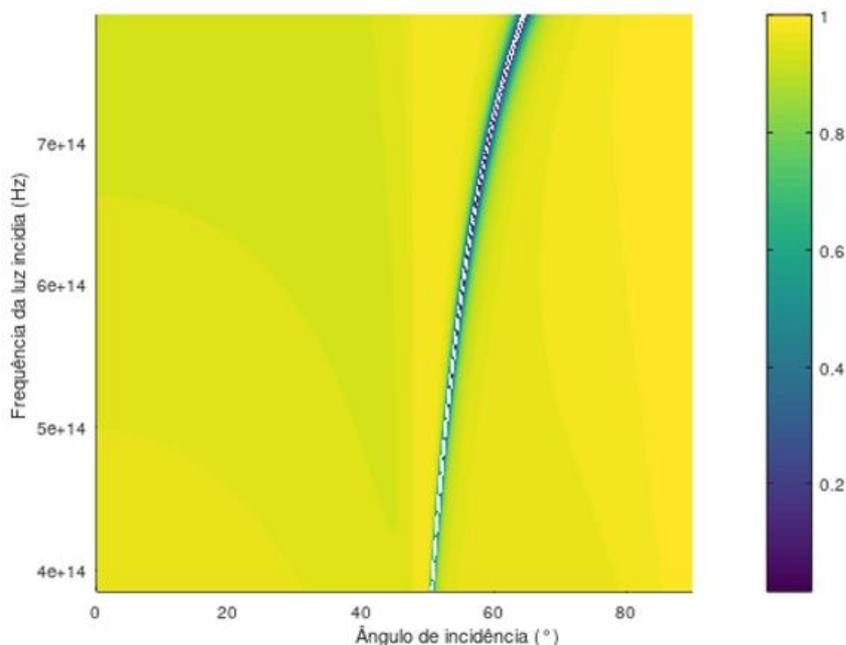
$$R_{1234} = \frac{(R_{12} + R_{23} * e^{i*2*\varphi_2}) + (R_{12} * R_{23} + e^{i*2*\varphi_2}) + R_{34} * e^{i*2*\varphi_3}}{(1 + R_{12} * R_{23} * e^{i*2*\varphi_2}) + (R_{23} + R_{12} * e^{i*2*\varphi_2}) * R_{34} * e^{i*2*\varphi_3}} \tag{11}$$

Onde  $R_{1234}$  é a refletividade para o sistema de quatro meios,  $R_{ij}$  corresponde ao coeficiente de reflexão de Fresnel entre os meios  $i$  e  $j$ ,  $i$  é a unidade imaginária e  $\varphi_i$  é uma variável que depende das características do meio, que pode ser calculada com as equações 7; 8 e 9.

Repetindo o cenário anterior, assumindo os índices de refração  $n_3$  e  $n_4$  iguais a 1,332, obteve-se o mesmo resultado que a simulação para o sistema de três meios, assim como esperado.

Para dar prosseguimento, alterou-se levemente os valores dos índices de refração das últimas duas camadas do sensor, com  $n_3=1,34$  e  $n_4=1,32$ , mantendo os valores dos índices de refração das camadas anteriores e a espessura da película de ouro, estimando que a nova camada do analito  $n_3$  estaria na ordem de 100nm. O que já provocou pequenas mudanças nos resultados observados, como pode ser visto no gráfico (gráfico 6):

Gráfico 6 - Visão do topo do gráfico de refletividade em função da frequência da luz incidida e ângulo de incidência para quatro meios e  $n_3=1,34$



Fonte: Elaborado pelo autor (2023)

### Parâmetros de performance do sensor:

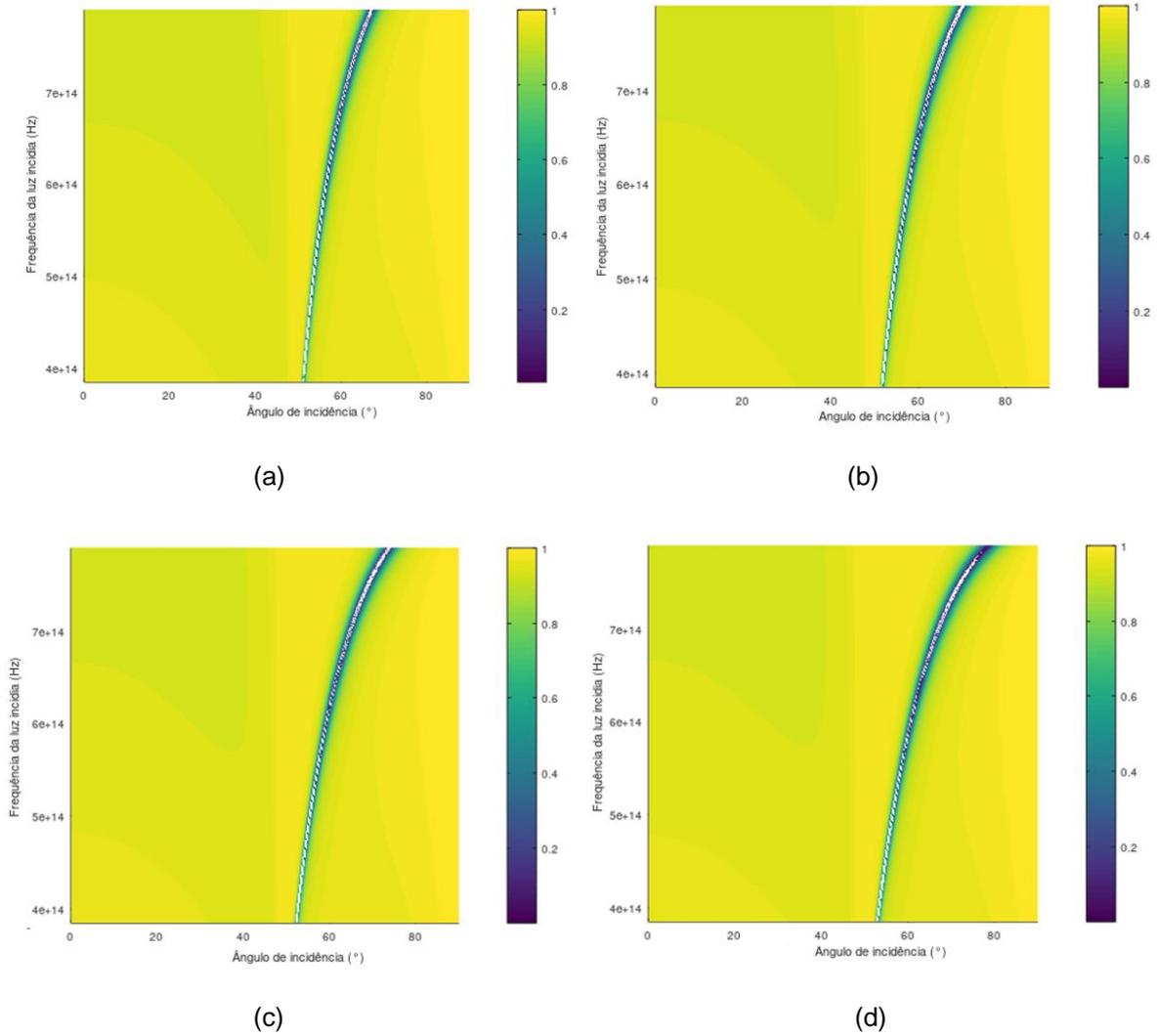
Um dos aspectos mais importantes, que descreve a performance de um sensor SPR, é a sensibilidade que o sistema apresenta. A sensibilidade de um sensor é a razão da mudança do sinal de saída, lida por este sensor, em relação a uma mudança mensurada dentro do sistema.

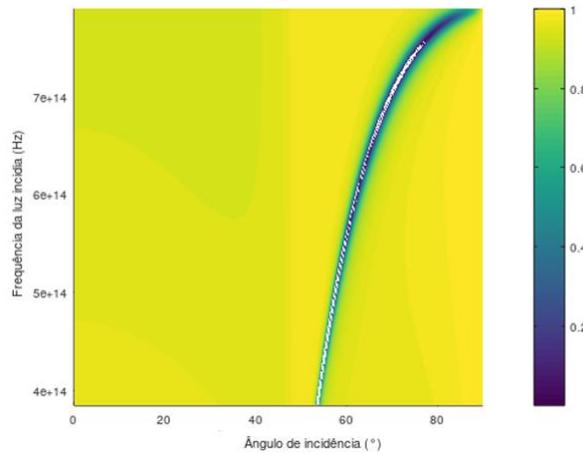
Existem diversas maneiras de se definir a sensibilidade de um sistema, dado que as respostas do sistema podem ser oriundas de diferentes fontes, como por exemplo da mudança de ângulo de incidência, frequência da luz incidida e mudança na fase complexa da luz refletida, que serão os casos abordados.

Devido a reação da formação de plasmons em respeito a mudança dos índices de refração do agrupamento óptico, esta será a referência de mudança mensurada no sistema. Assim, serão simuladas mudanças nos índices de refração da camada 3 do sensor, com a finalidade de representar diferentes concentrações de substâncias na região de decantação do analito aquoso, variando o índice de refração deste meio de  $n_3=1,34$  até  $n_3=1,44$ . A seguir,

é possível ver como essas mudanças influenciaram na formação dos SP a cada incremento de 0,02 no índice de refração  $n_3$  (Gráficos 7).

Gráficos 7 - Visão do topo do gráfico de refletividade em função da frequência da luz incidida e ângulo de incidência para quatro meios com (a)  $n_3=1,36$  (b)  $n_3=1,38$  (c)  $n_3=1,40$  (d)  $n_3=1,42$  (e)  $n_3=1,44$





(e)

Fonte: Elaborado pelo autor (2023)

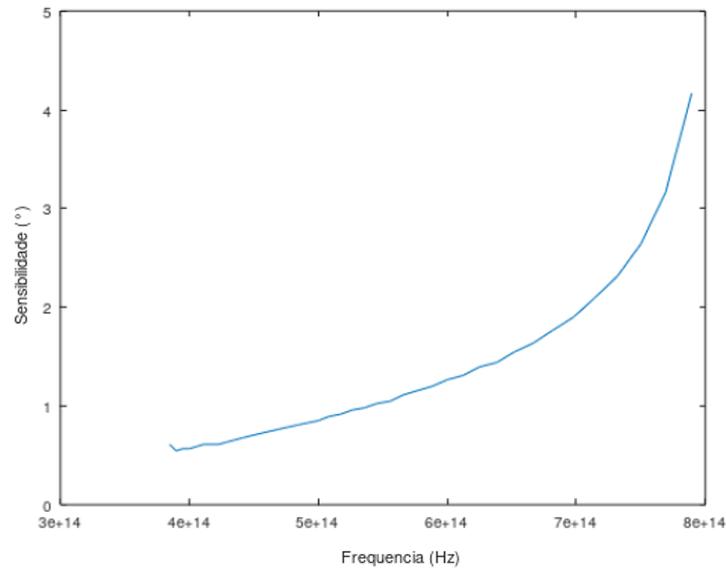
Primeiramente, foi realizada a análise para determinar a sensibilidade do sensor em relação ao ângulo em que a refletividade é mínima para uma frequência de luz constante, a interrogação angular. Que é feita selecionando uma frequência constante e observando o ângulo no qual há a formação de SP para casos de índice de refração diferentes, podendo ser calculado pela diferença entre os ângulos de refletividade mínima em casos com diferentes índices de refração  $n_3$  na frequência selecionada, dividido pela diferença dos índices de refração que sofreram alteração ( $n_3$ ), de acordo com a equação (Equação 12):

$$S_{RI} = \frac{\Delta\theta}{\Delta n} \quad (12)$$

Em que  $S_{RI}$  é a sensibilidade refratométrica,  $\Delta\theta$  é a variação do ângulo de formação dos plasmons para a frequência considerada e  $\Delta n$  é a variação sofrida pelo índice de refração  $n_3$ .

A Sensibilidade refratométrica para ângulo, foi calculada nas frequências da banda selecionada a cada  $1,012 \cdot 10^{13}$  Hz e com a variação de índice de refração de 0,02 dos casos vistos nos gráficos 7. Em cada uma das frequências da banda, o cálculo foi realizado, e tirou-se a média aritmética das sensibilidades calculadas nos diferentes casos de variação. Possibilitando plotar o gráfico (Gráfico 8):

Gráfico 8 - Gráfico de sensibilidade refratométrica para ângulo de refletividade mínima



Fonte: Elaborado pelo autor (2023)

No Gráfico de sensibilidade refratométrica para ângulo mínimo, é possível notar que o ângulo de formação de SP se desloca mais nas frequências mais altas para uma mesma variação de índice de refração  $n_3$ . O que pode ser deduzido e observado claramente na progressão dos gráficos 7.

Porém, além do aumento de sensibilidade, é possível observar nos gráficos de refletividade para quatro meios (Gráficos 7), um aumento nos níveis de refletividade mínimos e na largura dos vales ao redor do ponto de refletividade mínima, o que nem sempre é desejado, já que geralmente se procuram maiores sensibilidades e maiores figuras de mérito, o que implica em ter menores larguras dos vales ao redor do ponto de refletividade mínima, e ter a refletividade mínima o mais próximo possível de 0 (Xu et al, 2019).

As figuras de mérito, também chamadas de FoM (*Figures of Merit*) podem ser calculadas de acordo com a equação (Equação 13):

$$FoM = \frac{S_{RI}}{FWHM} \quad (13)$$

Onde FoM é a figura de mérito,  $S_{RI}$  a sensibilidade refratométrica, e FWHM (Full Width at Half Maximum) a largura no ponto de “meio máximo” na região de refletividade mínima. Por sua vez, o FWHM foi calculado pela equação (Equação 14):

$$FWHM = \Delta D_{Hh} \quad (14)$$

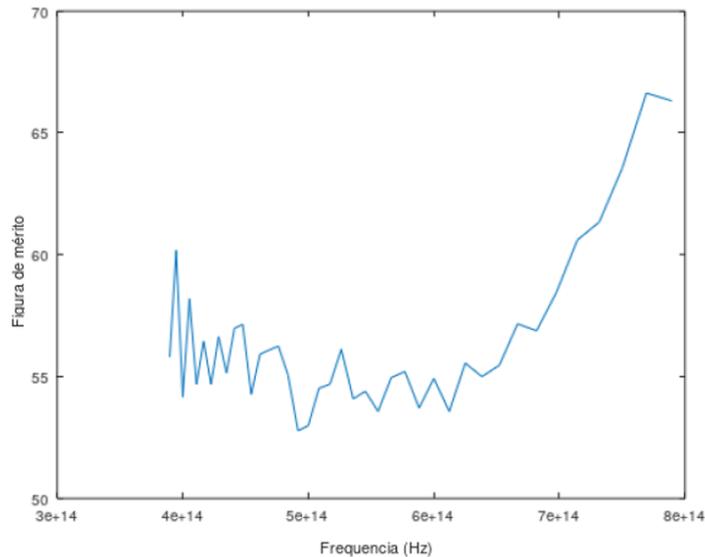
Na equação 14,  $\Delta D_{Hh}$  é a distância entre os pontos que tem o valor de refletividade, iguais a refletividade da “meia altura” do vale. O ponto de refletividade com a meia altura do vale, pode ser calculado pela equação (Equação 15):

$$Hh = R_{min} + \frac{1-R_{min}}{2} \quad (15)$$

Onde  $H_h$  é o valor da refletividade em “meia altura”, e  $R_{\min}$  é o valor mínimo de refletividade.

Após calcular as figuras de mérito para o caso anterior, foi também feita a média aritmética destes valores, e plotado no gráfico a seguir (Gráfico 9):

Gráfico 9 - Figura de mérito ângulos de refletividade mínima



Fonte: Elaborado pelo autor (2023)

Outra possível referência a ser considerada, é a interrogação em frequência, que é olhar para cada ângulo da varredura, e comparar as frequências onde são formados os SP para os diferentes índices de refração  $n_3$ , que é basicamente o inverso do processo anterior, ou seja, um ângulo fixo é selecionado, enquanto a frequência da luz incidida é variada dentro da banda trabalhada, então, são observados para o mesmo ângulo as frequências nas quais há a formação de SP para os diferentes índices de refração  $n_3$ . O que é calculado pela diferença das frequências de refletividade mínima observados em cada caso com índice de refração diferente para o ângulo selecionado, dividido pela variação do índice de refração que sofreu alteração ( $n_3$ ). Deste modo, a equação para cálculo da sensibilidade do sensor, será a equação (Equação 16):

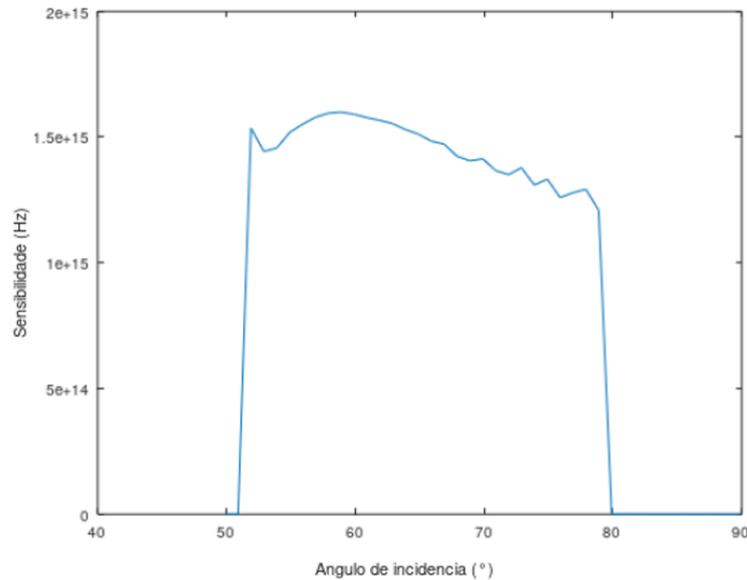
$$S_{RI} = \frac{\Delta f}{\Delta n} \quad (16)$$

Em que  $S_{RI}$  é a sensibilidade refratométrica,  $\Delta f$  é a variação da frequência de formação dos plasmons para o ângulo considerado, e  $\Delta n$  é a variação sofrida pelo índice de refração  $n_3$ .

O mesmo método, foi aplicado para criar o gráfico de sensibilidade refratométrica para frequência de refletividade mínima, para cada ângulo da varredura, porém, considerando

apenas as regiões em que se formam os SP, que só começam a aparecer após o ângulo de 50° (Gráfico 10):

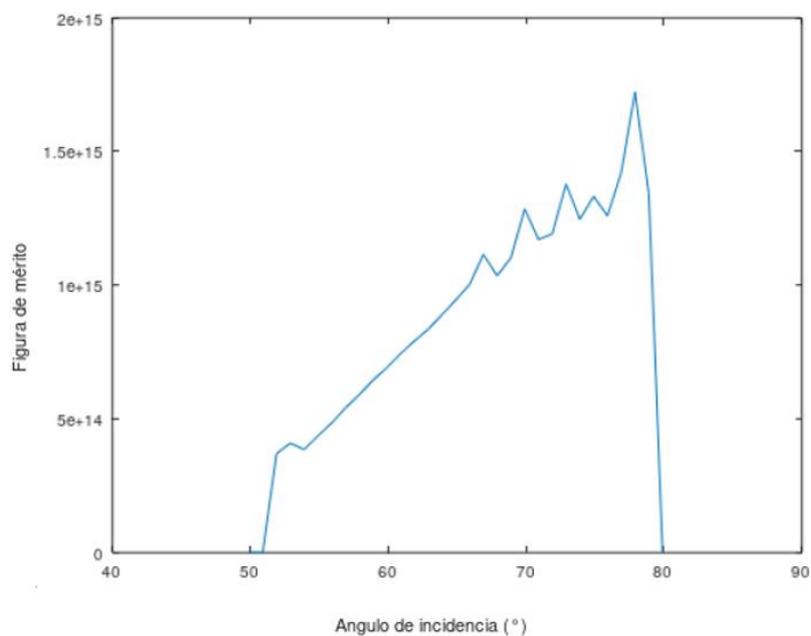
Gráfico 10 - Gráfico de sensibilidade refratométrica para frequência de refletividade mínima



Fonte: Elaborado pelo autor (2023)

Então, foram calculadas as figuras de mérito para esse caso, com as equações 13, 14, 15 e 16. Plotando o gráfico (Gráfico 11):

Gráfico 11 - Figura de mérito frequências de refletividade mínima



Fonte: Elaborado pelo autor (2023)

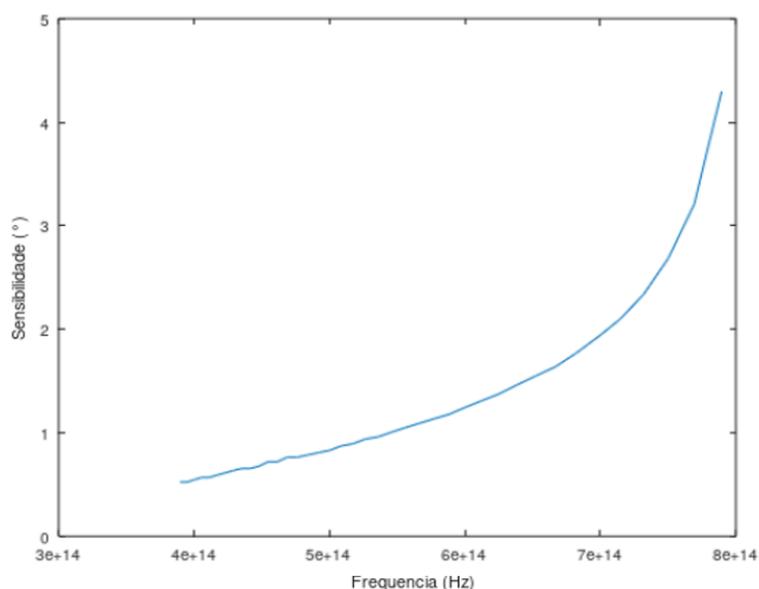
Por fim, o último método de detecção a ser analisado, é a mudança de fase. Como a interação entre a luz incidente, e os SP também afetam a fase da luz refletida, que exibe um

salto abrupto em sua fase ou argumento complexo (Homola, 2006), este fenômeno também pode ser utilizado para fazer detecções.

Como a mudança da fase ocorre muito rapidamente, uma maneira eficiente de se identificar quando ocorre esta mudança é derivar a função da luz refletida, e o ponto de mudança de fase se mostrará como o ponto onde a derivada é mais alta. Analisando a mudança de fase para cada frequência, este ponto pode ser encontrado derivando a luz refletida em relação ao ângulo, sabendo assim qual o ângulo do salto de fase em cada frequência.

Fazendo a análise citada, é possível montar outro gráfico calculando a sensibilidade com a equação 12, novamente tirando as médias para os diferentes índices de refração (Gráfico 12):

Gráfico 12 - Gráfico de sensibilidade refratométrica para fase



Fonte: Elaborado pelo autor (2023)

#### 4. RESULTADO E DISCUSSÃO

Como já descrito anteriormente, os resultados de performance desejados para os sensores de varredura angular, são aqueles nos quais se tem uma alta sensibilidade e uma alta figura de mérito, que de acordo com as simulações de varredura angular, são os pontos de maior frequência. Uma vez, que nessas frequências a sensibilidade está mais alta, como visto no gráfico 8, e há maiores figuras de mérito, como visto no gráfico 9, que se mantém altas mesmo com o aumento do FWHM, que tende a diminuir a figura de mérito. Porém, como esta também é a região onde os mínimos de refletividade tendem a subir, é preciso se atentar

se realmente há a formação de plasmons no sensor. O que também vale para a mudança de fase com variação de ângulo de incidência, como é possível ver no gráfico 11.

Quando se faz a análise mudando as frequências para um ângulo fixo, existe um limite para os ângulos possíveis a serem fixados, que nos cenários apresentados, ficaram aproximadamente entre os 50° e 80°, pois nos casos estudados não foram formados plasmons para ângulos diferentes ou havia plasmons somente para uma situação, o que não possibilita o cálculo da sensibilidade. Também sendo necessário ser cauteloso, pois para casos como o de  $n_3=1,36$  os ângulos de incidência que formam plasmons são ainda mais restritos. A sensibilidade dessa configuração no geral se demonstra quase uniforme, então, ao considerar a figura de mérito os ângulos mais altos, no caso entre 70° e 80° demonstram ter melhor performance, no caso de haver formação de plasmons na região.

## 5. CONSIDERAÇÕES FINAIS

Ao decorrer deste artigo, foram abordados o princípio e o que são os plasmons, conceitos importantes para se estudar os sistemas ópticos, o que é a configuração de Kretschmann, maneiras diferentes de se realizar a detecção com esses sensores, e o passo a passo da construção dos modelos simulados. Ao final, foi possível fazer a análise de performance de um sensor de 4 camadas, e estipular as melhores condições de operação para as diferentes aproximações, contudo, essas condições são mais eficientes para este sensor em questão, e algumas mudanças na configuração da estrutura, como por exemplo, no elemento e espessura do material condutor e analito, tenham outras circunstâncias nas quais apresentem melhor aproveitamento, mas caso esse tipo de modificação queira ser analisada, o mesmo modelo de simulação utilizado pode ser aplicado.

## 6. REFERÊNCIAS

ALMEIDA, Aline Dos Santos *et al.* A Critical Analysis on the Sensitivity Enhancement of Surface Plasmon Resonance Sensors with Graphene. **MDPI**, 2022. Disponível em: <https://doi.org/10.3390/nano12152562>. Acesso em: 30 ago. 2023.

CARVALHO, R. M. DE; RATH, S.; KUBOTA, L. T. SPR: Uma nova ferramenta para biossensores. **Química Nova**, v. 26, n. 1, p. 97–104, jan. 2003. Disponível em: <https://doi.org/10.1590/S0100-40422003000100017>. Acesso em: 4 abr. 2022.

Fano, U. The Theory of Anomalous Diffraction Gratings and of Quasi-Stationary Waves on Metallic Surfaces (Sommerfeld's Waves). **Journal of the Optical Society of America**, 1941.

Disponível em: <https://opg.optica.org/josa/viewmedia.cfm?uri=josa-31-3-213&seq=0>. Acesso em: 30 ago. 2023.

HOMOLA, Jiri. Surface Plasmon Resonance Based Sensors. **Springer**, Berlim, v. 4, p. 3-44 2006. ISBN 10.1007/5346\_013. Disponível em: [https://link.springer.com/chapter/10.1007/5346\\_013](https://link.springer.com/chapter/10.1007/5346_013). Acesso em: 30 ago. 2023.

HOMOLA, Jiri; PILIARIK, Marek. Surface Plasmon Resonance Based Sensors. **Springer**, Berlim, v. 4, p. 45-67, 2006. ISBN 10.1007/5346\_014. Disponível em: [https://link.springer.com/chapter/10.1007/5346\\_014](https://link.springer.com/chapter/10.1007/5346_014). Acesso em: 30 ago. 2023.

OTTO, Andreas. Excitation of nonradiative surface plasma waves in silver by the method of frustrated total reflection. **Spring Link**, 1968. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/BF01391532>. Acesso em: 30 ago. 2023.

TURBADAR, T. Complete Absorption of Light by Thin Metal Films. **IOP Science**, 1959. Disponível em: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/0370-1328/73/1/307>. Acesso em: 30 ago. 2023.

XU, Yi *et al.* Optical Refractive Index Sensors with Plasmonic and Photonic Structures: Promising and Inconvenient Truth. **Wiley**, 2019. Disponível em: <https://doi.org/10.1002/adom.201801433>. Acesso em: 30 ago. 2023.

**Contatos:** digxgu@gmail.com e dario.bahamon@mackenzie.br