

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE PERNAMBUCO
CENTRO DE TECNOLOGIA E GEOCIÊNCIAS
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA ELÉTRICA**



DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

**Aplicativo Web para Projeto de Sensores Ópticos Baseados em
Ressonância de Plasmons de Superfície em Interfaces Planares**

Leonardo Machado Cavalcanti

Leonardo Machado Cavalcanti

Aplicativo Web para Projeto de Sensores Ópticos Baseados em Ressonância de Plasmons de Superfície em Interfaces Planares

Dissertação submetida ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Elétrica da Universidade Federal de Pernambuco como parte dos requisitos para obtenção do grau de Mestre em Engenharia Elétrica. Área de Concentração: Fotônica.

Orientador: Eduardo Fontana, PhD

Recife, Brasil

Agosto de 2016

Catálogo na fonte
Bibliotecária: Rosineide Mesquita Gonçalves Luz / CRB4-1361 (BCTG)

C376a Cavalcanti, Leonardo Machado.
Aplicativo Web para Projeto de Sensores Ópticos baseados em Ressonância de Plasmons de Superfície em Interfaces Planares. / Leonardo Machado Cavalcanti. - Recife, 2016.
77 folhas, il., gráfs., tabs.

Orientador: Prof. Eduardo Fontana, Ph.D
Dissertação (Mestrado) – Universidade Federal de Pernambuco.
CTG. Programa de Pós-Graduação em Engenharia Elétrica, 2016.
Inclui Referências e Anexos.

1. Engenharia Elétrica. 2. RPS. 3. Ressonância de Plasmons de Superfície. 4. Método Monte Carlo. 5. Exame de partículas. 6. PSO.
I. Fontana, Eduardo (Orientador). II. Título.

621.3 CDD (22. Ed.)

UFPE/BCTG/2016 - 260



Universidade Federal de Pernambuco
Pós-Graduação em Engenharia Elétrica

PARECER DA COMISSÃO EXAMINADORA DE DEFESA DE
DISSERTAÇÃO DO MESTRADO ACADÊMICO DE

LEONARDO MACHADO CAVALCANTI

TÍTULO

**“APLICATIVO WEB PARA PROJETO DE SENSORES ÓPTICOS BASEADOS
EM RESSONÂNCIA DE PLASMONS DE SUPERÍFICE
EM INTERFACES PLANARES”**

A comissão examinadora composta pelos professores: EDUARDO FONTANA, DES/UFPE; SERGIO CAMPELLO OLIVEIRA, POLI/UPE e GUSTAVO OLIVEIRA CAVALCANTI, POLI/UPE, sob a presidência do primeiro, consideram o candidato **LEONARDO MACHADO CAVALCANTI APROVADO.**

Recife, 16 de agosto de 2016.

MARCELO CABRAL CAVALCANTI
Coordenador do PPGEE

EDUARDO FONTANA
Orientador e Membro Titular Interno

GUSTAVO OLIVEIRA CAVALCANTI
Membro Titular Externo

SERGIO CAMPELLO OLIVEIRA
Membro Titular Externo

*Dedico a José Roberto de Souza Cavalcanti
e a Fábria Dantas Machado Cavalcanti,
meus pais.*

Agradecimentos

Agradeço primeiramente a Deus, o grande criador e misterioso amante, que a nós permitiu, por meio da ciência, contemplar a beleza de Sua criação.

À minha família sem a qual não seria metade do que sou hoje.

Ao meu orientador, Prof. Eduardo Fontana, que acompanhou e norteou os passos do seu pequeno aprendiz, e cujo ofício inspira-o a percorrer os rumos da vida acadêmica.

A todos docentes e funcionários do programa de pós-graduação que contribuíram para minha formação intelectual e pessoal.

Às amigas que fiz durante esses dois anos nas salas de aulas e nos laboratórios, duplicando as alegrias da vida.

Ao Ágape, grupo de jovens que na simplicidade ensinou-me a ter fé em Deus e nas pessoas.

E ao CNPq pelo apoio financeiro.

“They don’t call it Internet anymore; they call it cloud computing. I’m no longer resisting the name. Call it what you want.”

Larry Ellison

co-fundador e diretor executivo da Oracle Corporation

Resumo

Um dos principais desafios no projeto de sensores baseados em Ressonância de Plasmons de Superfície — RPS — é maximizar sua sensibilidade. Neste trabalho é proposto o uso de dois algoritmos heurísticos, Monte Carlo e Enxame de Partículas, para otimização de sensores baseados em RPS em interfaces planares, i.e, nas configurações de Kretschmann e de Otto, sem o auxílio da aproximação lorentziana para a curva de ressonância. Devido à natureza probabilística dos algoritmos, consegue-se obter um método simples e robusto para atingir essa otimização. É feita uma comparação quanto à eficiência computacional dos algoritmos em relação ao método tradicional de otimização, ficando demonstrado que o método de Enxame de Partículas é o mais eficiente em relação às outras técnicas. Com o emprego desse método, a dependência espectral dos parâmetros ótimos é obtida para sensores utilizando vários metais nas configurações de Kretschmann e de Otto, tanto para aplicações em meios gasosos quanto em meios aquosos. Um aplicativo foi desenvolvido e sua funcionalidade demonstrada, que pode ser executado diretamente via web, com base na metodologia proposta, para otimização de sensores RPS em interfaces planares.

Palavras-chave: RPS. Ressonância de plasmons de superfície. Otimização. Método Monte Carlo. Enxame de partículas. PSO.

Abstract

One of the main challenges in the design of surface plasmon resonance – SPR – sensor systems is to maximize their sensitivity. In this work one proposes the use of two heuristic algorithms, Monte Carlo and Particle Swarm, for optimization of SPR sensors in planar interfaces, i.e, in the Kretschmann and Otto configurations, without use of the Lorentzian approximation to the resonance curve. Because of the probabilistic nature of the algorithms, one manages to obtain a simple and robust method to achieve optimization. A comparison is made on the computational efficiency of the algorithm relative to the traditional method of optimization, showing that the particle swarm optimization method is more efficient compared to other techniques. By employing this method, the spectral dependence of optimum parameters is obtained for sensors using a wide range of metal films in the Kretschmann and Otto configurations, both for applications in gaseous and in aqueous media. An app was developed and its functionality can be demonstrated, by direct execution via web, based on the proposed methodology for optimization of SPR sensors on planar interfaces.

Keywords: SPR. Surface plasmon resonance. Optimization. Monte Carlo method. Particle Swarm Optimization. PSO.

Sumário

1	INTRODUÇÃO	10
2	SENSORES BASEADOS EM RESSONÂNCIA DE PLASMONS DE SUPERFÍCIE ..	12
2.1	Fundamentos sobre Ressonância de Plasmons de Superfície	12
2.2	Técnicas de Excitação de Plasmons de Superfície	19
2.2.1	Acoplamento por prisma	19
2.2.2	Acoplamento via grade de difração	23
2.3	Sensibilidade e Otimização de Sensores RPS.....	25
2.3.1	Operação e desempenho	25
2.3.2	Aproximação lorentziana da curva de ressonância	28
2.3.3	Fator de qualidade e sensibilidade	31
2.3.4	Métodos de otimização de sensores RPS: estado da arte	34
3	OTIMIZAÇÃO DE SENSORES POR MÉTODOS HEURÍSTICOS	37
3.1	Método de Monte Carlo	37
3.2	Método do Enxame de Partículas	40
4	APLICATIVO <i>WEB</i> PARA PROJETO DE SENSORES OTIMIZADOS	44
4.1	Arquitetura do Aplicativo <i>Web</i>	44
4.2	Otimização de Sensores RPS com Filmes de Ouro	50
4.3	Otimização de Sensores RPS para Detecção de Hidrogênio com Filmes de Paládio e Ouro/Paládio	59
4.4	Outra Aplicação: Projeto de Sensores de Ondas de Superfície de Bloch	65
5	CONCLUSÕES	69
	PUBLICAÇÕES	71
	REFERÊNCIAS	72
	ANEXO A – INSTRUÇÕES DE USO DO APLICATIVO SWSO	77

1 Introdução

Sensores ópticos baseados em Ressonância de Plasmons de Superfície — RPS — doravante denominados sensores RPS, são amplamente utilizados na caracterização de filmes finos [1], em sistemas de sensoriamento de gases [2] e na detecção em tempo real de interações biomoleculares sem o uso de marcadores fluorescentes ou radioisotópicos [3]. Nesse tipo de sensor, uma interface metal-dielétrico sob iluminação de radiação polarizada sustenta Plasmons de Superfície — PS — que são oscilações eletromagnéticas confinadas à interface [4,5]. Sendo um fenômeno ressonante, o efeito é bastante sensível às variações das constantes ópticas dos dois meios em contato, configurando-se como uma solução adequada para sensoriamento óptico. Apesar de não ser possível a excitação de PS por iluminação direta de uma superfície metálica planar, eles podem ser excitados por um prisma de acoplamento [6,7] ou modificando a superfície metálica, e. g., na forma de uma grade de difração [8]. As técnicas de acoplamento por prisma têm sido consideradas como bastante apropriadas para sensoriamento, especialmente a configuração de Kretschmann [3]. No entanto, vale notar que novas opções de uso da configuração de Otto no desenvolvimento de sensores foram propostas recentemente na literatura [9].

Os projetos de sensores RPS geralmente têm como objetivo determinar os parâmetros do dispositivo que otimizem sua sensibilidade, o que corresponde em última análise a maximizar o fator de qualidade da curva de ressonância. Métodos de otimização descritos na literatura [10,11] demonstram que o desempenho ótimo de um sensor RPS operando a comprimento de onda e ângulo de incidência fixos é obtido quando o ângulo de incidência é fixado no ponto de declividade absoluta máxima da curva de ressonância e a espessura do filme metálico — ou espessura do *gap*, para configuração de Otto — é tal que o coeficiente de acoplamento é igual a 2. O coeficiente de acoplamento é a razão entre o amortecimento intrínseco dos PS dentro do metal e o amortecimento de radiação devido à espessura finita do filme metálico. Esses métodos assumem uma aproximação lorentziana como uma primeira aproximação da curva de ressonância que, apesar de fornecer informações relevantes a respeito do fenômeno físico e dos limites de sensibilidade, não representa precisamente o formato da curva de ressonância derivada das equações de Fresnel [12]. Além disso, todos esses métodos lidam apenas com a configuração de Kretschmann, a despeito do fato de que a condição do coeficiente de acoplamento ótimo também seja, em princípio, válida para configuração de Otto.

O principal objetivo desta dissertação é implementar um método eficiente que maximize a sensibilidade de sensores RPS válido para ambas configurações de Kretschmann e de Otto e que dispense o uso da tradicional aproximação lorentziana [1]. Isso pode ser alcançado por meio da utilização dos algoritmos heurísticos de otimização [13], que são caracterizados pela realização de repetidas avaliações da função objetivo — a sensibilidade do sensor — sobre toda a região de busca a fim de aumentar a probabilidade de encontrar o ponto ótimo global. Esses algoritmos não necessitam de uma estimativa inicial precisa, ao contrário dos algoritmos de busca direta [10], adequam-se a qualquer função objetiva não-linear e complexa e, portanto, representam uma excelente ferramenta para resolver o problema proposto. Dentre os algoritmos heurísticos, escolheu-se dois de simples implementação: os algoritmos de Monte Carlo [14] e do Enxame de Partícula [15], do inglês *Particle Swarm Optimization* — PSO.

Além de aplicar os algoritmos propostos para obter sensores RPS otimizados, apresenta-se nesta dissertação o desenvolvimento e a implementação de um aplicativo *web* que permite a qualquer usuário projetar sensores RPS (Kretschmann e Otto). Este aplicativo acompanha a tendência tecnológica da Computação nas Nuvens [16,17], um novo estilo de computação que centraliza toda capacidade de processamento e armazenamento em grandes servidores via internet ao invés de localmente, como nos computadores pessoais.

O desenvolvimento da dissertação inicia-se no Capítulo 2 com a apresentação dos fundamentos teóricos sobre o efeito RPS e das técnicas de excitação de PS, discutindo em seguida aspectos sobre operação, sensibilidade e otimização do sensor. No Capítulo 3 descrevem-se os métodos heurísticos de otimização — Monte Carlo e PSO — e como aplicá-los ao projeto de sensores RPS.

O Capítulo 4 apresenta o desenvolvimento e a implementação de um aplicativo *web* para projeto de sensores RPS otimizados e outras aplicações, sendo dividido nas seguintes seções:

- Otimização de Sensores RPS com Filmes de Ouro.
- Otimização de Sensores RPS para Detecção de Hidrogênio com Filmes de Paládio e Ouro-Paládio.
- Outras aplicações: Projeto de Sensores de Ondas de Superfície de Bloch

No Capítulo 5 são discutidas as implicações das contribuições desta dissertação e propostas para trabalhos futuros.

2 Sensores baseados em Ressonância de Plasmons de Superfície

Neste capítulo são apresentados os fundamentos teóricos sobre o fenômeno da Ressonância de Plasmons de Superfície e suas diferentes técnicas de excitação, enfatizando as técnicas de excitação por prisma de acoplamento, principal objeto de estudo desta dissertação. Em seguida, são descritos os princípios de operação e de desempenho de sensores RPS, verificando a relação entre sensibilidade do sensor e fator de qualidade da curva de ressonância. Por fim, analisam-se diferentes metodologias de otimização do efeito RPS encontradas na literatura e propõem-se novas contribuições no que concerne ao projeto de sensores RPS otimizados — objetivo principal desta dissertação.

2.1 Fundamentos sobre Ressonância de Plasmons de Superfície

PS são oscilações eletromagnéticas que se propagam na interface entre um dielétrico e um condutor confinadas exponencialmente na direção perpendicular à interface [4,5]. Essas ondas eletromagnéticas de superfície dão-se por meio do acoplamento dos campos eletromagnéticos com a oscilação dos elétrons livres da superfície do condutor. A Figura 2.1 mostra uma representação qualitativa da propagação de PS assim como de sua distribuição transversal de densidade de potência ao longo da interface.

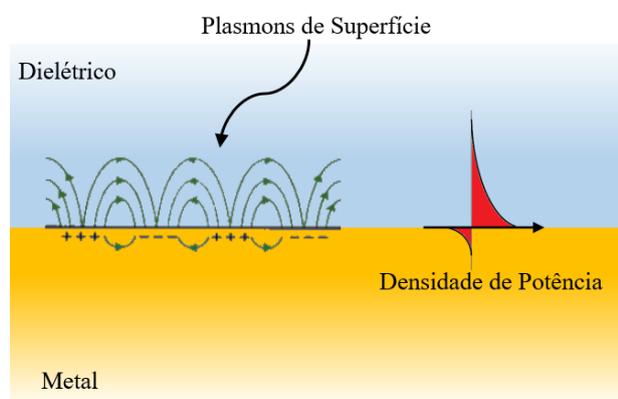


Figura 2.1 – Representação qualitativa das linhas de campo de PS (à esquerda) e de sua distribuição transversal de densidade de potência ao longo da interface (à direita).

Pode-se excitar PS refletindo fótons ou elétrons em filmes metálicos através de técnicas específicas [4,5]. Visto que o objetivo deste trabalho é projetar sensores ópticos otimizados, restringir-se-á o estudo às técnicas de excitação por fótons. A condição de ressonância — RPS — dá-se quando o feixe de radiação incidente sobre o metal possui a mesma frequência e o mesmo vetor de onda dos PS, fazendo com que grande parte dos fótons incidentes sejam “transformados” em PS. Como resultado deste forte acoplamento entre a radiação e as flutuações de carga na superfície do metal, a intensidade do feixe de luz refletido é extremamente baixa correspondendo a um ponto de mínimo na dependência angular — ou espectral — da curva de reflectância conforme indicado na Figura 2.2. Sendo um fenômeno ressonante, a localização do mínimo é bastante sensível às variações das propriedades ópticas dos dois meios em contato. Dessa forma, podem-se conceber sensores ópticos de alta sensibilidade baseados em RPS — sensores RPS.

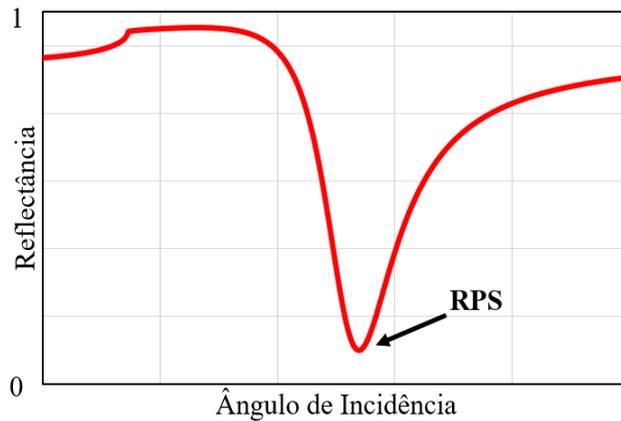


Figura 2.2 – Condição de RPS indicada na curva de reflectância.

A geometria mais simples que pode sustentar PS e fornecer uma primeira aproximação para situações de RPS mais complexas é a interface planar simples entre dois meios semi-infinitos cujas permissividades relativas são ϵ_1 e ϵ_2 como mostrado na Figura 2.3.

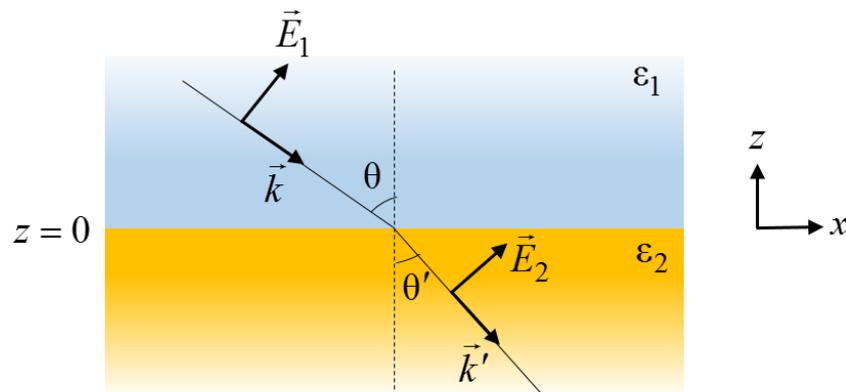


Figura 2.3 – Interface Planar Simples.

Deseja-se determinar a possibilidade de existência de apenas uma onda de entrada no meio 1 e uma onda de saída no meio 2. As ondas possuem polarização paralela ao plano de incidência — ondas TM (Transversa Magnética) — e os módulos de seus vetores de onda \vec{k} e \vec{k}' são dados por:

$$|\vec{k}|^2 = \epsilon_1 k_0^2 = k_1^2 + k_x^2. \quad (2.1)$$

$$|\vec{k}'|^2 = \epsilon_2 k_0^2 = k_2^2 + k_x^2, \quad (2.2)$$

onde $k_0 = 2\pi/\lambda$ é o número de onda no vácuo, λ é o comprimento de onda, $k_x = \sqrt{\epsilon_1} k_0 \sin \theta$ é a componente dos vetores de onda paralela à interface igual em ambos os meios, θ é o ângulo de incidência e, k_1 e k_2 são as componentes ortogonais à interface dos vetores de onda nos meios 1 e 2, respectivamente. Aplicando as condições de contorno para os campos tangenciais à interface tem-se a seguinte relação [18]

$$\epsilon_1 k_2 - \epsilon_2 k_1 = 0. \quad (2.3)$$

Utilizando as Equações (2.1), (2.2) e (2.3), pode-se obter as expressões das componentes dos vetores de onda em ambos os meios

$$k_x = k_0 \sqrt{\frac{\epsilon_1 \epsilon_2}{\epsilon_1 + \epsilon_2}}, \quad (2.4)$$

$$k_1 = k_0 \sqrt{\frac{\epsilon_1^2}{\epsilon_1 + \epsilon_2}}, \quad (2.5)$$

$$k_2 = k_0 \sqrt{\frac{\epsilon_2^2}{\epsilon_1 + \epsilon_2}}. \quad (2.6)$$

Considerando ϵ_1 e ϵ_2 reais, as Equações (2.4) a (2.6) fornecem duas soluções possíveis para existência de campos nos dois lados da interface. A primeira ocorre quando ambos os meios são transparentes, $\epsilon_{1,2} > 0$, caracterizando a condição de transmissão total no ângulo de

Brewster. Nesse caso ambas componentes ortogonais k_1 e k_2 são reais, configurando ondas viajantes em ambos os meios. A segunda solução ocorre quando as componentes k_1 e k_2 são puramente imaginárias — ondas decaindo em ambos os meios na direção z — correspondendo a uma onda confinada na interface. Para que essa onda confinada permaneça propagando, é necessário que a componente k_x seja real. Em suma, a condição para existência de PS é dada por

$$\varepsilon_1 + \varepsilon_2 < 0, \quad (2.7)$$

$$\varepsilon_1 \varepsilon_2 < 0. \quad (2.8)$$

Desse modo, caso um dos meios seja transparente, $\varepsilon_1 > 0$ (e.g. dielétrico), o outro meio obrigatoriamente deve exibir permissividade negativa, ou melhor,

$$\varepsilon_2 < -\varepsilon_1. \quad (2.9)$$

Condutores como ouro e prata satisfazem (2.9) tipicamente até a faixa do ultravioleta. De fato, utilizando o modelo de Drude para metais, na ausência de eventos de colisão (plasma), pode-se chegar numa expressão para função permissividade de um metal em altas frequências [19]

$$\varepsilon_2(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}, \quad (2.10)$$

onde ω é a frequência da radiação incidente e ω_p é a frequência de plasma do metal. Observe-se que para frequências $\omega < \omega_p$ metais exibem permissividade negativa, como ilustrado na Figura 2.4, e satisfazem os requisitos para existência de PS em interfaces planares simples.

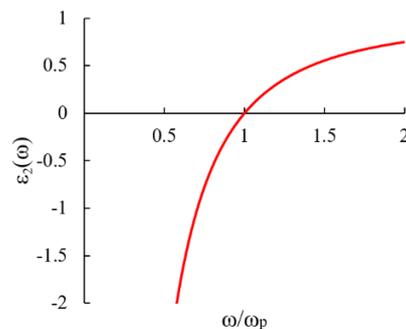


Figura 2.4 – Função permissividade de um metal sem perdas.

Para uma interface formada por um dielétrico ϵ_1 e um metal descrito pela função permissividade (2.10), a condição de existência de PS em função da frequência da radiação incidente é

$$\epsilon_2(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} < -\epsilon_1, \quad (2.11)$$

$$\omega < \frac{\omega_p}{\sqrt{1 + \epsilon_1}}. \quad (2.12)$$

A relação de dispersão de PS $\omega(k_x)$ está implicitamente expressa na Equação (2.4) e também graficamente representada na Figura 2.5.

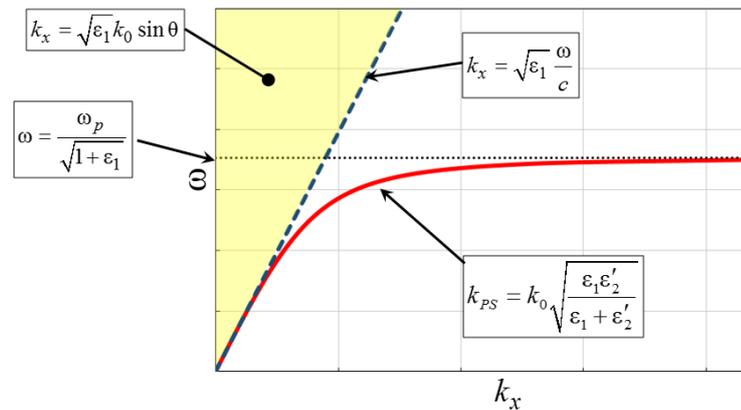


Figura 2.5 – Relação de dispersão de PS.

Para valores elevados de k_x a curva de dispersão de PS converge para a linha horizontal $\omega = \omega_p / \sqrt{1 + \epsilon_1}$, já para pequenos valores de k_x ela se assemelha à relação de dispersão da luz no dielétrico — ondas de Sommerfeld-Zenneck [20]. Visto que a curva de dispersão dos PS sempre se situa à direita do triângulo (em amarelo) das possíveis componentes $k_x = \sqrt{\epsilon_1} k_0 \sin \theta$ do feixe de luz incidente, não é possível excitar PS por meio de iluminação direta da superfície planar metálica. Para uma dada frequência, o vetor de onda dos PS sempre é maior que o vetor de onda da radiação no dielétrico $k_{PS} > \sqrt{\epsilon_1} k_0$ e, portanto, também maior que a respectiva projeção ao longo da interface $k_{PS} > k_x = \sqrt{\epsilon_1} k_0 \sin \theta$. Entretanto, como será abordado nas seções subsequentes, PS podem ser excitados com o auxílio de um prisma de acoplamento que aumenta o valor de k_x para além do seu valor no dielétrico, podendo assim satisfazer à condição de RPS.

Em razão das ondas eletromagnéticas serem atenuadas ao se propagarem em metais devido a eventos de colisões de elétrons, pode-se assumir que o metal — meio 2 — apresenta uma permissividade complexa expressa por

$$\varepsilon_2 = \varepsilon_2' - j\varepsilon_2'' , \quad (2.13)$$

onde ε_2' e ε_2'' são as partes real e imaginária da função permissividade do metal. Considera-se o regime de pequenas perdas $|\varepsilon_2''| \ll |\varepsilon_2'|$, sendo a condição de ressonância dada por $\varepsilon_1 + \varepsilon_2' < 0$. Dessa forma, substituindo (2.13) em (2.4), o vetor de onda dos PS adquire uma parte imaginária correspondendo a atenuações nas oscilações ao longo da interface [21]

$$k_{PS} = k_0 \sqrt{\frac{\varepsilon_1 \varepsilon_2}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}} = k_{PS}' - jk_{PS}'' = \left[k_0 \sqrt{\frac{\varepsilon_1 \varepsilon_2'}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2'}} \right] - j \left[k_0 \left(\frac{\varepsilon_1 \varepsilon_2'}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2'} \right)^{3/2} \frac{\varepsilon_2''}{2(\varepsilon_2')^2} \right]. \quad (2.14)$$

A atenuação dos PS ao longo da interface está representada na Figura 2.6.

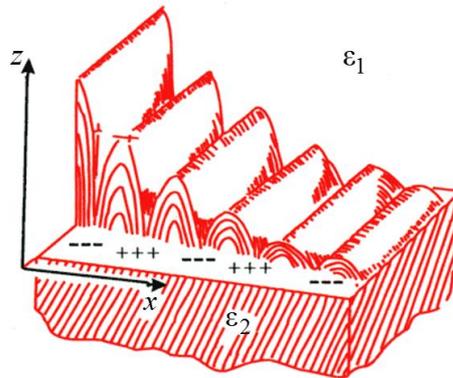


Figura 2.6 – Atenuação de PS ao longo da interface entre um dielétrico ε_1 e um metal

$$\varepsilon_2 = \varepsilon_2' - j\varepsilon_2'' \quad [22].$$

PS com características bem definidas são aqueles capazes de sustentar um grande número de oscilações espaciais ao longo da direção de propagação antes de serem completamente atenuados pelas perdas dentro do metal. Esse requerimento pode ser expresso pela seguinte desigualdade [10]

$$\frac{k_{PS}''}{k_{PS}'} \ll 1 \Rightarrow \frac{|\varepsilon_2''| \varepsilon_1}{2\varepsilon_2'(\varepsilon_2' + \varepsilon_1)} \ll 1. \quad (2.15)$$

A intensidade dos PS propagando ao longo de uma superfície planar diminui com o quadrado do campo elétrico, isto é, decai por um fator de $\exp(-2k''_{ps}x)$. O comprimento de propagação L é definido como aquele em que a intensidade diminui por um fator de $1/e$ [21]

$$L = \frac{1}{2k''_{ps}}. \quad (2.16)$$

Na faixa da radiação visível, o valor de L é da ordem de algumas dezenas de micrômetros para alguns metais, por exemplo, no caso da prata (Ag) o comprimento de propagação L vale $22 \mu\text{m}$ em $\lambda = 514,5 \text{ nm}$ [21].

Do mesmo modo, o campo elétrico decai exponencialmente ao se afastar perpendicularmente da interface por um fator de $\exp(-|k_{1,2}|z)$. O valor do comprimento de penetração — aquele para o qual o campo decai por um fator de $1/e$ — é dado por [21]

$$\hat{z}_{1,2} = \frac{1}{|k_{1,2}|}, \quad (2.17)$$

onde $k_{1,2}$ é o número de onda no meio 1 ou no meio 2. Substituindo (2.13) em (2.5), (2.6), pode-se obter a seguinte expressão para o comprimento de penetração em ambos os meios [21]

$$\hat{z}_i = \frac{\lambda}{2\pi} \sqrt{\frac{|\epsilon_1 + \epsilon'_2|}{\epsilon_i^2}}, \quad (2.18)$$

com $i = 1, 2$. Na faixa de frequências ópticas $\hat{z}_1 \gg \hat{z}_2$ [21], o que implica uma maior concentração de campo no dielétrico — meio 1 — fazendo com que a onda confinada seja bastante sensível a variações das propriedades ópticas desse meio — conforme representado na Figura 2.1.

2.2 Técnicas de Excitação de Plasmons de Superfície

Conforme visto na seção anterior, não é possível excitar PS por meio de iluminação direta de superfícies metálicas planares. Nesta seção são apresentadas as principais técnicas de acoplamento de PS na interface metal-dielétrico com ondas TM — não ocorre ressonância com ondas TE (Transversa Elétrica). Primeiramente, descrevem-se as técnicas de acoplamento por prisma as quais representam o principal objeto de estudo desta dissertação, RPS em interfaces planares. Em seguida, explicam-se brevemente as técnicas de acoplamento via grade de difração.

2.2.1 Acoplamento por Prisma

A técnica de acoplamento por prisma baseia-se na Reflexão Total Atenuada — RTA — também denominada de Reflexão Interna Total Frustrada — RITF — [20] que consiste no fato de que campos evanescentes decorrentes de Reflexão Interna Total — RIT — podem ser “transformados” em ondas viajantes quando um terceiro meio é dirigido para perto da interface onde a RIT ocorreu. O campo evanescente “tunela” para o terceiro meio emergindo como uma versão atenuada da onda incidente. O coeficiente de transmissão depende da distância do terceiro meio à interface inicial.

Em razão de não ser possível excitar PS em uma interface planar metal-dielétrico por meio de iluminação direta, pode-se conceber sistemas de 3 meios — 2 interfaces planares — que apresentem RTA, de modo que o campo evanescente resultante da RIT em uma das interfaces seja capaz de excitar PS na outra interface. Isso é possível quando a componente paralela à interface do vetor de onda desse campo evanescente k_x — a qual é preservada ao longo das interfaces — é suficientemente grande para se igualar com o vetor de onda dos PS, isto é,

$$k_x = k'_{PS} . \quad (2.19)$$

Duas configurações bem conhecidas na literatura constituídas por 3 meios, sendo um deles na forma de prisma, são bastante utilizadas no projeto de sensores RPS: a configuração de Kretschmann [6] e a configuração de Otto [7], mostradas na Figura 2.7.

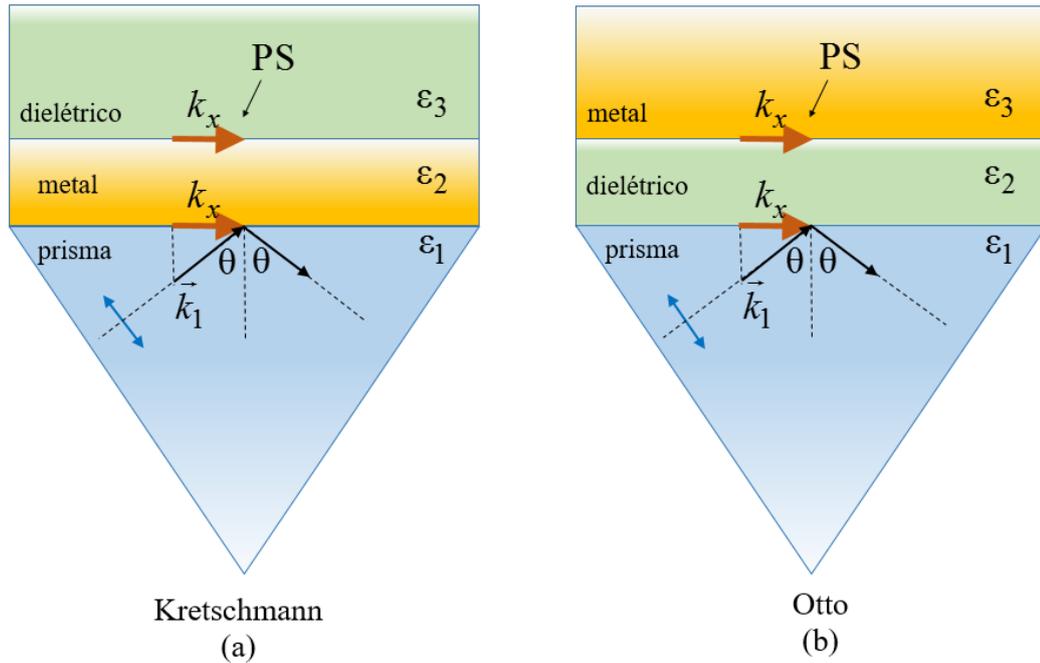


Figura 2.7 – Configurações de Kretschmann (a) e de Otto (b) para acoplamento de PS.

As configurações mostradas na Figura 2.7 diferem-se basicamente pela permutação da posição do metal e do dielétrico — meios 2 e 3. O feixe de radiação no prisma sofre RIT e o campo evanescente resultante no meio vizinho — meio 2 — é “tunelado” para a interface metal-dielétrico — meio 2/meio 3 — onde ocorre a excitação de PS.

A projeção do vetor de onda da radiação no prisma ao longo da interface é dada por

$$k_x = \sqrt{\varepsilon_1} k_0 \sin \theta, \quad (2.20)$$

que será “tunelada” para a interface metal-dielétrico. Aplicando a condição de RPS expressa em (2.19) para configuração de Kretschmann, obtém-se

$$\sqrt{\varepsilon_1} k_0 \sin \theta = k_0 \sqrt{\frac{\varepsilon_3 \varepsilon_2'}{\varepsilon_3 + \varepsilon_2'}}. \quad (2.21)$$

O ângulo para o qual a Equação (2.21) é satisfeita é denominado ângulo de ressonância e é expresso por

$$\theta_{PS} = \sin^{-1} \left(\frac{1}{\sqrt{\varepsilon_1}} \sqrt{\frac{\varepsilon_3 \varepsilon_2'}{\varepsilon_3 + \varepsilon_2'}} \right). \quad (2.22)$$

Para configuração de Otto, o ângulo de ressonância é

$$\theta_{PS} = \sin^{-1} \left(\frac{1}{\sqrt{\varepsilon_1}} \sqrt{\frac{\varepsilon_2 \varepsilon'_3}{\varepsilon_2 + \varepsilon'_3}} \right). \quad (2.23)$$

É possível ter uma melhor compreensão de como as configurações de acoplamento por prisma propiciam a RPS observando a relação de dispersão dos PS mostrada na Figura 2.8. Por simplificação, mostra-se apenas as curvas para a configuração de Kretschmann onde $\varepsilon_1 > \varepsilon_3$. Observa-se que para toda região limitada pelas linhas dos vetores de onda da radiação no prisma e no dielétrico — linhas tracejadas — existe um k_x para o qual a condição de RPS é satisfeita, isto é, existe uma linha associada a k_x que cruza a curva de dispersão de PS na interface metal-dielétrico — em vermelho — caracterizando uma condição de ressonância.

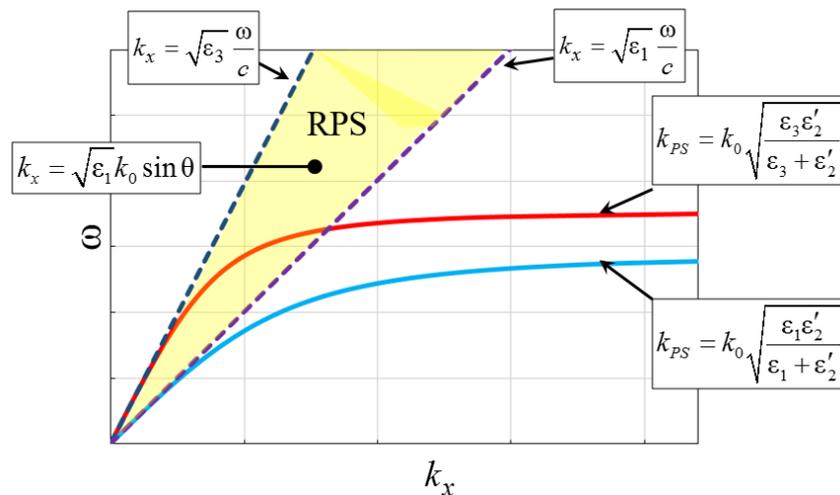


Figura 2.8 – Relação de dispersão de PS para configuração de Kretschmann.

A configuração mais comum utilizada em sensores RPS é a de Kretschmann [3,6], na qual um filme fino metálico de espessura de algumas dezenas de nanômetros é depositado na parte superior do prisma como representado na Figura 2.7. Por outro lado, na configuração de Otto o prisma é separado do filme metálico espesso por uma fina lacuna — *gap* — de ar ou de material dielétrico de espessura da ordem do comprimento de onda do feixe incidente [7,21]. Essa configuração é preferível quando se deseja evitar o contato direto com a superfície metálica, e.g., no estudo da qualidade de filmes finos. Novas opções de uso da configuração de Otto no desenvolvimento de sensores foram propostas recentemente na literatura [9].

A RPS manifesta-se por um ponto de mínimo na dependência angular — ou espectral — da curva de reflectância como mostrado na Figura 2.9 para ambas configurações, visto que grande parte da energia do feixe incidente é absorvida pelos PS na ressonância.

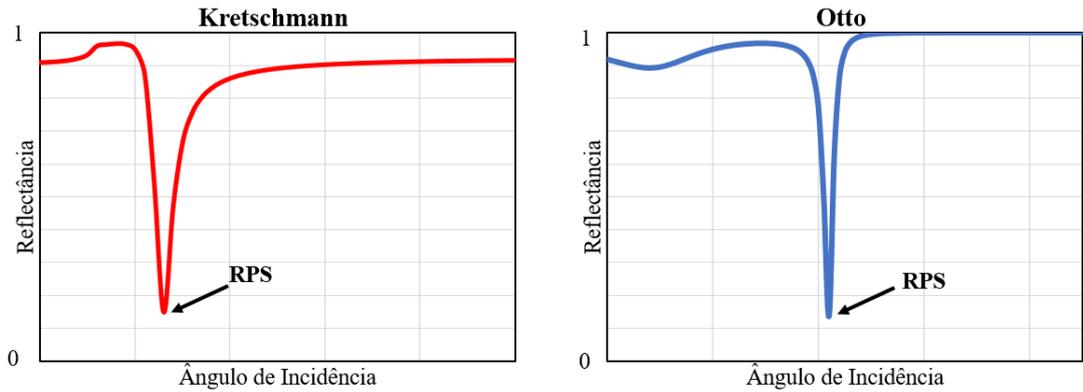


Figura 2.9 – Curvas de reflectância para as configurações de Kretschmann e de Otto.

A descrição quantitativa do mínimo da reflectância assim como de sua dependência com os parâmetros do sensor — espessura, comprimento de onda, ângulo de incidência, materiais — pode ser obtida aplicando a formulação de Fresnel a qualquer das duas estruturas de três meios da Figura 2.7. A reflectância R , razão entre as intensidades do feixe refletido e do feixe incidente, é dada por [12]

$$R = \left| \frac{r_{12} + r_{23} \exp(-2jk_2d)}{1 + r_{12}r_{23} \exp(-2jk_2d)} \right|^2, \quad (2.24)$$

em que d é a espessura do meio 2 e $r_{i,i+1}$ é dado por [12,18]

$$r_{i,i+1} = \frac{\varepsilon_{i+1}k_i - \varepsilon_i k_{i+1}}{\varepsilon_{i+1}k_i + \varepsilon_i k_{i+1}}, \quad (2.25)$$

com $i=1,2$, e com k_i dado por [12]

$$k_i = k_0 \sqrt{\varepsilon_i - \varepsilon_1 (\sin \theta)^2}, \quad (2.26)$$

com θ representando o ângulo de incidência, ε_i , a permissividade do meio i , com $i = 1, 2, 3$.

Na faixa do visível e do infravermelho próximo do espectro eletromagnético, os metais ouro (Au), cobre (Cu), prata (Ag) e alumínio (Al) exibem ressonâncias bastante estreitas em relação a outros metais, e são os mais adequados para utilizar em sensores RPS, sendo o Au a escolha preferida entre os pesquisadores uma vez que apresenta grande estabilidade química quando exposto à atmosfera. Além disso, sensores RPS com filmes de ouro são altamente sensíveis na região próxima a $\lambda = 1 \mu\text{m}$ quando comparado com outros metais [10].

O projeto de sensores RPS envolve determinar apropriadamente a espessura do filme fino — ou do *gap*, para configuração de Otto — o comprimento de onda e o material do filme metálico. Aspectos de projeto e otimização de sensores RPS são discutidos na seção subsequente.

2.2.2 Acoplamento via grade de difração

Apesar de não ser o objeto de estudo desta dissertação, vale mencionar a técnica de acoplamento via grade de difração que consiste em iluminar uma superfície metálica modificada na forma de grade de difração de maneira que um dos vetores de onda do conjunto discreto de ordens de difração possua componente paralela à interface k_x satisfazendo a condição de RPS expressa em (2.19) [4,21,23]. A Figura 2.10 apresenta uma grade de difração numa superfície metálica com periodicidade a para observação de PS.

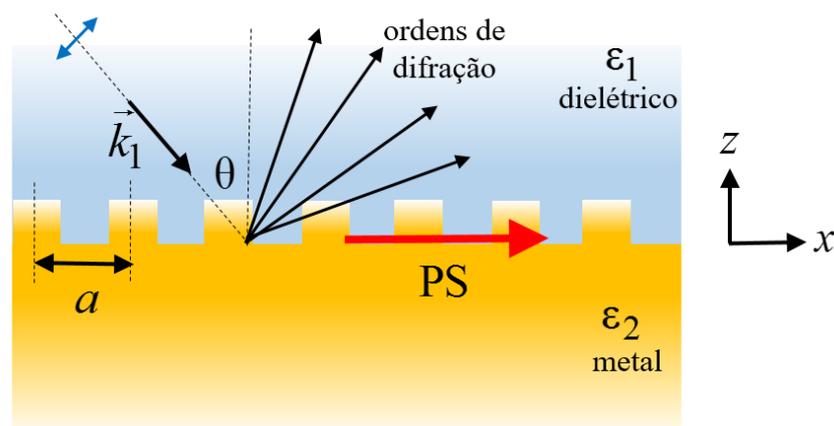


Figura 2.10 – Grade de difração numa superfície metálica para observação de PS.

A interação do feixe de radiação incidente com a superfície da grade gera um conjunto discreto de ordem de difração cujas componentes do vetor de onda ao longo da interface são expressas pela simples relação

$$k_{x,m} = k_x + m \frac{2\pi}{a}, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots \quad (2.27)$$

Pode-se generalizar (2.27) para um perfil de difração,

$$k_{x,m} = k_x + \Delta k_x, \quad (2.28)$$

$$k_{x,m} = \sqrt{\varepsilon_1} k_0 \sin \theta + \Delta k_x, \quad (2.29)$$

onde Δk_x está relacionado com um perfil genérico de grade — ou mesmo com rugosidades aleatórias na superfície metálica [21]. A condição de RPS é, portanto,

$$k_{x,m} = \pm k'_{PS} \quad (2.30)$$

$$\sqrt{\varepsilon_1} k_0 \sin \theta + \Delta k_x = \pm k_0 \sqrt{\frac{\varepsilon_1 \varepsilon'_2}{\varepsilon_1 + \varepsilon'_2}} \quad (2.31)$$

O ângulo de ressonância θ_{PS} satisfaz (2.31) e é dado por

$$\theta_{PS} = \sin^{-1} \left(\pm \sqrt{\frac{\varepsilon'_2}{\varepsilon_1 + \varepsilon'_2}} - \frac{\Delta k_x}{\sqrt{\varepsilon_1} k_0} \right) \quad (2.32)$$

O sinal de menos na Equação (2.30) representa PS que se propagam ao longo da direção $-x$ da Figura 2.10.

O fenômeno inverso pode acontecer, isto é, PS propagando em superfícies com grade de difração ou mesmo rugosidades aleatórias podem ter seu vetor de onda reduzido, $\Delta k_x < 0$ e, então, serem acoplados em radiação [4,21]. Portanto, a Equação (2.28) implica que grade de difração ou rugosidades aleatórias na superfície constituem um canal de perda adicional para PS propagando na superfície. À vista disso, vale salientar que filmes fabricados para sensores com prisma de acoplamento devem ser os mais planos possíveis.

2.3 Sensibilidade e Otimização de Sensores RPS

Nesta seção são descritos os princípios de operação de sensores RPS assim como de suas principais características de desempenho, como a sensibilidade. Em seguida, é apresentada a aproximação lorentziana da curva de ressonância da qual se pode extrair informações relevantes a respeito do fenômeno físico e dos limites de sensibilidade. Uma relação entre sensibilidade e fator de qualidade da curva de ressonância é realizada a fim de prover uma melhor compreensão quanto à definição do problema de otimização de sensores. Por fim, analisam-se diferentes metodologias de otimização do efeito RPS encontradas na literatura, e novas contribuições são propostas no que concerne ao projeto de sensores RPS otimizados — objetivo principal desta dissertação.

2.3.1 Operação e desempenho

A Figura 2.11 mostra um esquema de um sistema óptico de medição utilizando sensores RPS. Esse sistema consiste em uma fonte de radiação polarizada no plano de incidência, um acoplador óptico — prisma ou grade de difração — e um módulo de detecção. O feixe de radiação originário da fonte excita PS no acoplador de RPS. Em seguida, o feixe de luz refletido — ou difratado — é detectado e analisado pelo módulo de detecção.

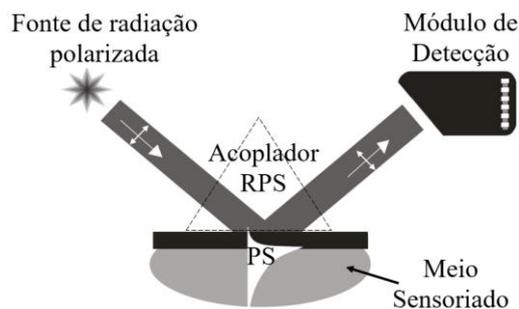


Figura 2.11 – Sistema óptico de medição utilizando sensores RPS [24].

Conforme o método de interrogação utilizado, o detector poderá registrar a intensidade da radiação refletida/difratada ou a dependência angular/espectral da curva de ressonância. Uma variação do índice de refração do meio sensoriado altera o valor de k_{PS} , o que corresponde a um deslocamento da curva de ressonância como mostrado na Figura 2.12. Dessa forma, pode-se monitorar variações do índice de refração do meio sensoriado observando as mudanças na intensidade ou na posição do ângulo ou comprimento de onda de ressonância.

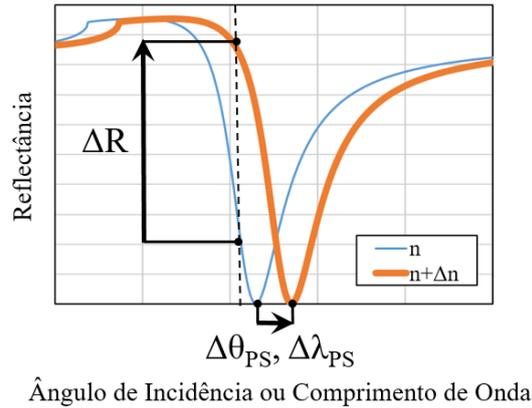


Figura 2.12 – Curva de RPS para dois valores de índice de refração. Um incremento Δn desloca a RPS para região de ângulos crescentes, resultando em incrementos ΔR , $\Delta\theta_{SP}$ e $\Delta\lambda_{SP}$.

Um exemplo ilustrativo da medição do índice de refração do meio sensoriado empregando um sensor RPS está ilustrado na Figura 2.13 [25,26]. Utilizando o método de interrogação por intensidade — ângulo de incidência e comprimento de onda fixos — monitora-se a variação do índice de refração através da correspondente variação da reflectância.

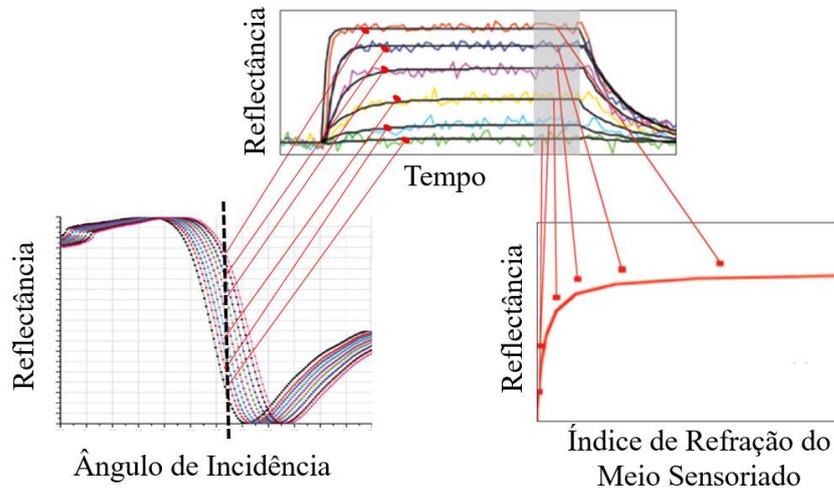


Figura 2.13 – Exemplo ilustrativo da utilização de um sensor RPS na medição do índice de refração do meio sensoriado pelo método de interrogação por intensidade [25,26].

O desempenho de sensores RPS pode ser descrito pelas seguintes características: sensibilidade, resolução, linearidade, acurácia, repetibilidade e faixa dinâmica [24,27].

A sensibilidade de um sensor RPS é a taxa de variação do sinal de saída do sensor em relação ao índice de refração do meio sensoriado. Conforme o método de interrogação — por

intensidade, angular ou espectral — pode-se escrever a sensibilidade S das seguintes maneiras [24]

$$S = \frac{dY}{dn}, \quad (2.33)$$

com $Y = R, \theta_{PS}, \lambda_{PS}$ e n o índice de refração do meio sensoriado.

A resolução σ_{RI} de um sensor RPS é definida como a menor variação no índice de refração do meio sensoriado que causa uma mudança perceptível — detectável — na saída do sensor, sendo definida por [24]

$$\sigma_{RI} = \frac{\sigma_{os}}{S}, \quad (2.34)$$

onde σ_{os} é o desvio padrão do ruído na saída e S a sensibilidade do sensor.

A linearidade é o máximo desvio absoluto dos pontos experimentais em relação à curva de calibração do sensor quando esta é linear [27]. Entende-se por curva de calibração a função matemática resultante do ajuste ao conjunto de pontos experimentais associado com a resposta do sensor.

A acurácia, também conhecida por exatidão, é um conceito qualitativo para expressar a proximidade da concordância entre o valor verdadeiro do mensurando e o resultado da medição [27].

A repetibilidade é a precisão do sensor sob condições de medição que adotam os mesmos procedimento, operadores, sistema de medição, condições de operação e localização assim como medições replicadas sobre os mesmos ou similares objetos durante um pequeno intervalo de tempo [27].

Por fim, a faixa dinâmica corresponde a faixa de valores que podem ser medidos pelo sensor. É definida como a razão entre o maior sinal possível — saturação do sensor — e o menor sinal detectável — patamar do ruído [28].

O desempenho de um sensor RPS depende do aprimoramento das características descritas acima. Em particular, a sensibilidade do sensor está diretamente relacionada com fator de qualidade da curva de ressonância como descrito na subseção subsequente. Quanto mais estreita é a curva de ressonância, mais precisa é a medição da posição da ressonância e maior é o valor da sensibilidade.

2.3.2 Aproximação lorentziana da curva de ressonância

A metodologia proposta nesta dissertação não faz uso da aproximação lorentziana para curva de ressonância de sensores RPS, entretanto, seu uso nos permite extrair informações relevantes a respeito do fenômeno físico e dos limites de sensibilidade [21]. Dessa forma, uma breve explanação sobre a aproximação lorentziana se faz necessária, sem se ater aos detalhes do desenvolvimento matemático. No regime de pequenas perdas a curva de ressonância pode ser aproximada por uma função lorentziana que em princípio independe da forma de acoplamento — prisma ou grade de difração — e do tipo de configuração no caso de acoplamento por prisma — Kretschmann ou Otto. Sem perdas de generalidade, escolheu-se a configuração de Kretschmann mostrada na Figura 2.7(a) para analisar essa aproximação. Nesse caso, o meio sensoriado é o dielétrico com permissividade ε_3 . O regime de pequenas perdas na configuração de Kretschmann equivale a $|\varepsilon_2''| \ll |\varepsilon_2'|$, ou mais precisamente à Equação (2.15). Na região de ressonância a curva pode ser aproximada por [6,21]

$$R \approx 1 - \frac{4\Gamma_i \Gamma_{rad}}{\left[k_x - (k'_{PS} + \delta k_x) \right]^2 + (\Gamma_i + \Gamma_{rad})^2}, \quad (2.35)$$

onde $\Gamma_i = k''_{PS}$ representa o amortecimento intrínseco devido à absorção inerente dentro do metal, Γ_{rad} é a constante de amortecimento de radiação devido à componente oscilatória do perfil transversal que existe no prisma e cujo valor depende da espessura do filme metálico, k_x é dado pela Equação (2.20), k'_{PS} é a parte real do vetor de onda dos PS dado por (2.14) e δk_x é uma modificação no valor de k'_{PS} em virtude do metal se apresentar na forma de filme metálico de espessura finita no topo do prisma — e não como um meio semi-infinito como em (2.14). Vale citar que a expressão da constante de amortecimento de radiação é expressa por [10]

$$\Gamma_{rad} = 2 \operatorname{Im} \left[k_0 \frac{(\varepsilon_2 \varepsilon_3)^2}{(\varepsilon_2 + \varepsilon_3)^3} \right] \exp \left(-2k_0 \frac{\varepsilon_2'}{\sqrt{|\varepsilon_2'|} - \varepsilon_3} d \right), \quad (2.36)$$

onde percebe-se a dependência da constante de amortecimento de radiação com a espessura do filme metálico d . Se a espessura do filme aumenta, as ondas de fuga diminuem $\Gamma_{rad} \rightarrow 0$ e

$R \rightarrow 1$. Caso a espessura diminua, o valor de R na ressonância é reduzido [21]. Existe um valor de espessura para o qual a interferência destrutiva pode ser perfeita fornecendo um valor de R nulo na ressonância. Essa situação, definida como acoplamento crítico, ocorre quando $\Gamma_{rad} = \Gamma_i$ [4,21]. Define-se o fator de acoplamento η como

$$\eta = \frac{\Gamma_i}{\Gamma_{rad}}, \quad (2.37)$$

cujo valor no acoplamento crítico é $\eta = 1$.

O vetor de onda dos PS pode ser expresso por

$$K_{PS} = K'_{PS} - jK''_{PS} = (k'_x + \delta k_x) - j(\Gamma_i + \Gamma_{rad}). \quad (2.38)$$

Substituindo (2.38) em (2.35), obtém-se

$$R \approx 1 - \frac{4\Gamma_i\Gamma_{rad}}{(k_x - K'_{PS})^2 + K''_{PS}{}^2}. \quad (2.39)$$

O valor da reflectância na ressonância, $k_x = K'_{PS}$, vale

$$R_{\min} = 1 - \frac{4\Gamma_i\Gamma_{rad}}{K''_{PS}{}^2}. \quad (2.40)$$

E, substituindo (2.40) em (2.39), tem-se [10]

$$R \approx 1 - \frac{(1 - R_{\min})K''_{PS}{}^2}{(k_x - K'_{PS})^2 + K''_{PS}{}^2}. \quad (2.41)$$

A Figura 2.14 apresenta o gráfico da curva lorentziana expressa em (2.41), onde a reflectância média é dada por

$$\bar{R} = \frac{1}{2}(1 + R_{\min}). \quad (2.42)$$

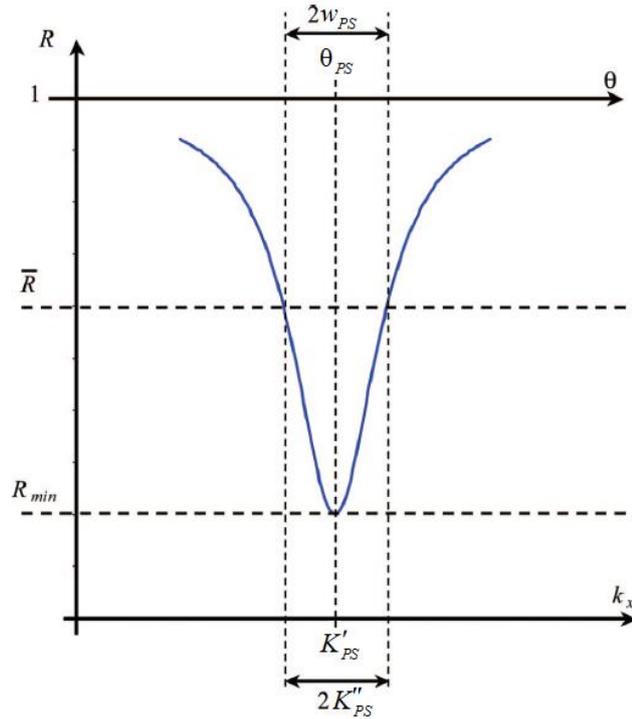


Figura 2.14 – Curva lorentziana como aproximação da curva de reflectância e representação dos parâmetros no domínio de k_x e θ [10].

O valor médio \bar{R} ocorre para $k_x = K'_{PS} \pm K''_{PS}$ e, portanto, $2K''_{PS}$ é definido como a largura à meia altura da curva de ressonância. Desse modo a largura da curva de ressonância depende das perdas do sistema; quanto menor as perdas, mais estreita é a ressonância.

A dependência angular da curva de reflectância indicada na Figura 2.14 pode ser obtida explicitando essa dependência na Equação (2.41)

$$R \approx 1 - \frac{(1 - R_{\min}) K_{PS}''^2}{(k_x - K'_{PS})^2 + K_{PS}''^2} \approx 1 - \frac{(1 - R_{\min}) K_{PS}''^2}{(\sqrt{\epsilon_1} k_0)^2 (\sin \theta - \sin \theta_{PS})^2 + K_{PS}''^2}, \quad (2.43)$$

onde foi considerado que $\delta k_x \approx 0$.

Utilizando a aproximação $\sin \theta \approx \sin \theta_{PS} + \cos \theta_{PS} (\theta - \theta_{PS})$ em (4.43), tem-se

$$R \approx 1 - \frac{(1 - R_{\min}) K_{PS}''^2}{(\sqrt{\epsilon_1} k_0 \cos \theta_{PS})^2 (\theta - \theta_{PS})^2 + K_{PS}''^2}. \quad (2.44)$$

Define-se a meia largura à meia altura no domínio angular como

$$w_{PS} = \frac{K''_{PS}}{\sqrt{\varepsilon_1} k_0 \cos \theta_{PS}}. \quad (2.45)$$

E finalmente, substituindo (2.45) em (2.44), chega-se a

$$R(\theta) \approx 1 - \frac{(1 - R_{\min}) w_{PS}^2}{(\theta - \theta_{PS})^2 + w_{PS}^2}, \quad (2.46)$$

que é válida para $w_{PS} \ll \theta_{PS}$.

Na prática, a curva de reflectância não possui a mesma simetria de uma função lorentziana. No caso da configuração de Kretschmann, ela tende a crescer mais devagar que a função lorentziana na região angular acima do ângulo de ressonância. Já na configuração de Otto a falta de simetria ocorre na região angular inferior ao ângulo de ressonância [29]. Vale salientar que a aproximação lorentziana também pode ser empregada no caso de acoplamento via grade de difração.

2.3.3 Fator de qualidade e sensibilidade

Para um sensor baseado num fenômeno ressonante é fundamental garantir que o fator de qualidade da curva de ressonância seja o maior possível, em outras palavras, que a curva de ressonância seja a mais estreita e a mais profunda possível garantindo uma medição mais precisa [24,30]. O fator de qualidade está diretamente associado com a Relação Profundidade-Largura (*RPL*) da curva de ressonância expressa por

$$RPL_{\theta} = \frac{1 - R_{\min}}{2w_{PS}}, \quad (2.47)$$

ou

$$RPL_{k_x} = \frac{1 - R_{\min}}{2K''_{PS}}, \quad (2.48)$$

dependendo do domínio considerado, $1 - R_{\min}$ representa a profundidade da ressonância e $2w_{PS}$ ou $2K''_{PS}$ a largura da curva de ressonância.

Pode-se notar através da Equação (2.40) que a profundidade da ressonância é máxima na condição de acoplamento crítico $\Gamma_{rad} = \Gamma_i$ ($\eta = 1$) situação para a qual $R_{min} = 0$. Entretanto, essa situação não corresponde à *RPL* máxima, pois também é necessário considerar a menor largura da curva simultaneamente. Substituindo (2.40) em (2.48), reescreve-se a *RPL* em termos dos coeficientes de amortecimento intrínseco e de radiação

$$RPL_{k_x} = \frac{2\Gamma_i\Gamma_{rad}}{(\Gamma_i + \Gamma_{rad})^3}, \quad (2.49)$$

onde Γ_i e Γ_{rad} dependem dos valores das permissividades do metal e do dielétrico sensoriado. Ademais, Γ_{rad} depende também da espessura do filme metálico como apresentado em (2.36). Verifica-se que derivando (2.49) e igualando-a a zero obtém-se o valor de Γ_{rad} para o qual a *RPL* é máxima [10,30]

$$\Gamma_{rad} = \frac{\Gamma_i}{2}, \quad (2.50)$$

que corresponde a $\eta = 2$. Portanto, o primeiro passo para maximizar a *RPL* é determinar a espessura do filme — ou do *gap*, no caso da configuração de Otto — tal que a Equação (2.50) seja satisfeita, i.e., o coeficiente de acoplamento seja igual a 2 resultando numa *RPL* máxima dada por

$$RPL_{k_x, \max} = \frac{8}{27\Gamma_i}. \quad (2.51)$$

É útil escrever Γ_i em função das constantes ópticas dos meios utilizados no sensor [30],

$$\Gamma_i = \text{Im} \left[k_0 \sqrt{\frac{\epsilon_2 \epsilon_3}{\epsilon_2 + \epsilon_3}} \right] \approx \frac{k_0 n^3 \epsilon_2''}{2\epsilon_2'^2}, \quad (2.52)$$

onde n é o índice de refração do meio sensoriado — meio 3 — e, portanto,

$$RPL_{k_x, \max} = \frac{16}{27} \frac{\epsilon_2'^2}{k_0 n^3 \epsilon_2''}. \quad (2.53)$$

Observando a Equação (2.53), tem-se que o segundo passo para maximizar a RPL é escolher apropriadamente os materiais envolvidos no sensor a fim de maximizar sua RPL . É digno de nota que a maximização de RPL_{k_x} equivale também à maximização de RPL_{θ} .

Pode-se verificar que a curva que apresenta a maior RPL também é aquela para a qual o sensor exibe maior sensibilidade [30]. No método de interrogação por intensidade, onde se medem variações da intensidade do sinal refletido para ângulo de incidência e comprimento de onda fixos, a sensibilidade $S = dR/dn$ é máxima nos pontos onde as inclinações dR/dk_x ou $dR/d\theta$ também são máximas dados por [10,30]

$$k_x - K'_{PS} = \pm \frac{K''_{PS}}{\sqrt{3}} \quad (2.54)$$

e

$$\theta - \theta_{PS} = \frac{w_{PS}}{\sqrt{3}} = w_r, \quad (2.55)$$

onde $w_r = w_{PS}/\sqrt{3}$ é definida como a meia largura à meia altura reduzida da curva [10].

Os valores absolutos das inclinações máximas são obtidos substituindo as equações (2.54) e (2.55) nas respectivas derivadas de (2.41) e (2.46),

$$\left| \frac{dR}{dk_x} \right|_{\max} = \frac{3\sqrt{3} (1 - R_{\min})}{4 \cdot 2K''_{PS}} = \frac{3\sqrt{3}}{4} RPL_{k_x}, \quad (2.56)$$

$$\left| \frac{dR}{d\theta} \right|_{\max} = \frac{3\sqrt{3} (1 - R_{\min})}{4 \cdot 2w_{PS}} = \frac{3\sqrt{3}}{4} RPL_{\theta}. \quad (2.57)$$

As Equações (2.56) e (2.57) comprovam que a sensibilidade máxima depende proporcionalmente da RPL da curva de ressonância. Portanto, a otimização da sensibilidade de um sensor RPS consiste em última análise em maximizar sua RPL , em outras palavras, em maximizar seu fator de qualidade. Embora a análise feita acima tenha considerado apenas a técnica de acoplamento por prisma, ela também é válida para outros tipos de acoplamentos, e.g., via grade de difração [24].

A partir da Equação (2.56) é possível obter uma fórmula bastante simples para calcular a sensibilidade máxima do sensor. Substituindo (2.53) em (2.56), tem-se

$$\left(\left| \frac{dR}{dk_x} \right|_{\max} \right)_{\max} = \frac{3\sqrt{3}}{4} RPL_{k_x, \max} = \frac{8\sqrt{3}}{9k_0} \frac{\varepsilon_2'^2}{2n^3\varepsilon_2''}. \quad (2.58)$$

Um sensor otimizado exibe uma variação máxima de sinal ΔR_{op} para uma dada variação de índice de refração [30]

$$\Delta n \approx \frac{\Delta K'_{PS}}{k_0} \approx \frac{\Delta k_x}{k_0}, \quad (2.59)$$

dada por

$$\frac{\Delta R_{op}}{\Delta n} = \frac{8\sqrt{3}}{9} \frac{\varepsilon_2'^2}{2n^3\varepsilon_2''}, \quad (2.60)$$

$$\Delta R_{op} = 1,54 \left(\frac{\varepsilon_2'^2}{2n^2\varepsilon_2''} \right) \frac{\Delta n}{n}. \quad (2.61)$$

A Equação (2.61) permite calcular de forma bastante simples a sensibilidade máxima para um sensor RPS otimizado para qualquer configuração ou forma de acoplamento. Percebe-se então que o valor da sensibilidade máxima — para uma espessura tal que $\eta = 2$ — depende apenas das constantes ópticas do metal e do dielétrico sensoriado, por isso é importante fabricar filmes de alta qualidade com baixas perdas para construção de um sensor RPS.

2.3.4 Métodos de otimização de sensores RPS: estado da arte

O projeto de sensores RPS nas configurações de acoplamento por prisma — Kretschmann e Otto — consiste em otimizar os parâmetros do sensor que maximizem a sensibilidade, que em última análise corresponde a maximizar o fator de qualidade da curva de ressonância. A Figura 2.15 ilustra esquematicamente a definição do problema de otimização.

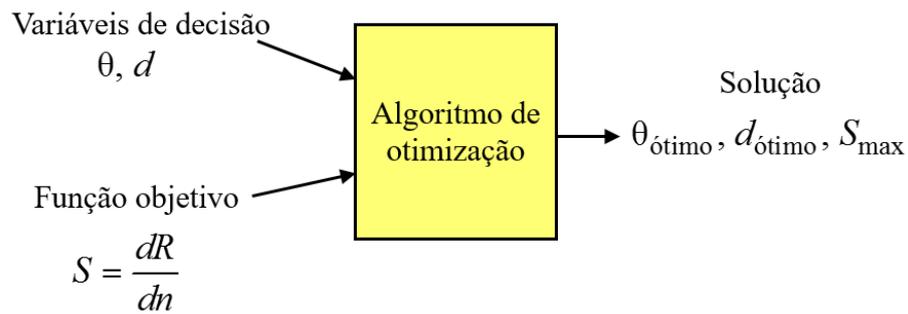


Figura 2.15 – Definição do problema de otimização de sensores RPS.

A função objetivo do problema — função que se quer otimizar — é definida como a sensibilidade do sensor. As variáveis de decisão são os parâmetros do sensor que devem ser ajustados até que a função objetivo seja otimizada. Nesse caso, definiu-as como o ângulo incidência θ — que pode ser ajustado experimentalmente — e a espessura do filme/gap d . O papel do algoritmo de otimização é encontrar os pontos ótimos do problema, isto é, os valores das variáveis de decisão que otimizem a função objetivo. Dependendo da complexidade do problema — forte não-linearidade da função objetivo, otimização multivariável — pode-se escolher diversos algoritmos propostos na literatura cada qual com suas peculiaridades. Deve-se selecionar aquele que é o mais adequado e eficiente ao problema em questão. O algoritmo de otimização mais simples consiste em encontrar o ponto no qual o gradiente da função objetivo em relação às variáveis de decisão é nulo. Entretanto, essa abordagem é extremamente árdua para a otimização da sensibilidade $S = dR/dn$ — derivada da Equação (2.24) — devido à grande complexidade de sua expressão matemática e do cálculo de seu respectivo gradiente.

Métodos de otimização da sensibilidade de sensores RPS descritos na literatura [10,31] demonstram que o desempenho ótimo de sensores RPS operando com ângulo de incidência e comprimento de onda fixo é obtido justamente com o ângulo de incidência fixado no ponto de declividade máxima da curva de RPS, para uma espessura de filme tal que o coeficiente de acoplamento é igual a 2 como visto na subseção anterior.

Em particular, a referência [10] apresenta uma análise sistemática da otimização da sensibilidade de um sensor RPS na configuração de Kretschman para filmes de Au, Ag, Al e Cu. A otimização é realizada por um algoritmo de busca direta — observação da função objetivo por meio de incremento e decrementos das variáveis de decisão — cuja convergência depende fortemente da estimativa inicial que nesse caso foi escolhida como a espessura do acoplamento crítico. Resultados numéricos foram apresentados para a dependência espectral da espessura ótima assim como de outros parâmetros do sensor. Destes resultados, conclui-se que

praticamente em toda região que vai do visível ao infravermelho próximo, o ouro é o metal mais adequado para o desenvolvimento de dispositivos de alta sensibilidade. A Figura 2.16 ilustra qualitativamente os parâmetros ótimos da curva de ressonância obtidos em [10].

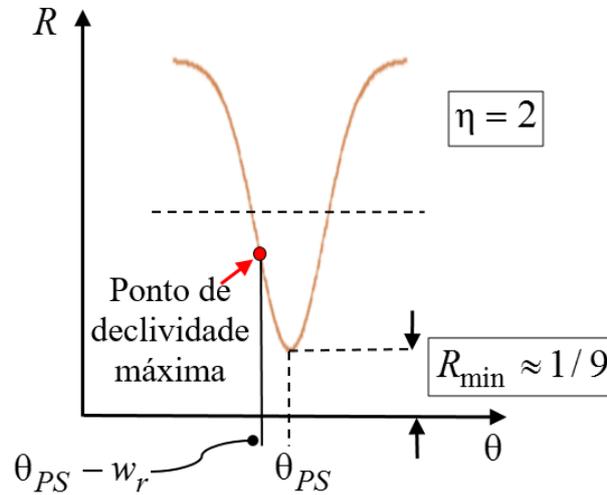


Figura 2.16 – Parâmetros ótimos da curva de ressonância obtidos em [10].

Os métodos empregados nas referências [10,31] assumem a aproximação lorentziana como uma primeira aproximação para curva de ressonância que, muito embora forneça informações relevantes a respeito do fenômeno físico e dos limites de sensibilidade, não representa precisamente o formato das curvas obtidas por meio das equações de Fresnel para reflectância (2.24) e (2.25). Além disso, esses métodos lidam apenas com a configuração de Kretschmann, apesar do fato que a condição $\eta = 2$ é em princípio também válida para configuração de Otto.

No próximo capítulo são apresentados dois métodos de otimização simples e robustos que podem ser aplicados em ambas configurações de Kretschmann e de Otto e que não empregam a aproximação lorentziana, mas apenas as equações de Fresnel.

3 Otimização de Sensores por Métodos Heurísticos

A proposta central desta dissertação é implementar um método eficiente para maximizar a sensibilidade de sensores RPS válido para ambas configurações de Kretschmann e de Otto sem utilizar a tradicional função lorentziana. Isso pode ser obtido através do uso de algoritmos heurísticos de otimização [13], que são caracterizados pela realização de repetidas avaliações da função objetivo — sensibilidade do sensor — sobre toda a região de busca a fim de aumentar a probabilidade de encontrar o ponto ótimo global. Esses algoritmos não necessitam de uma estimativa inicial precisa, ao contrário dos algoritmos de busca direta [10], adequam-se a qualquer função objetiva não-linear e complexa e, portanto, representam uma excelente ferramenta para resolver o problema proposto. Dentre os algoritmos heurísticos, escolheu-se dois de simples implementação: os algoritmos de Monte Carlo [14] e do Enxame de Partículas [15], do inglês *Particle Swarm Optimization* — PSO. O algoritmo PSO, em particular, já foi aplicado na otimização de sensores RPS na configuração de Kretschmann em [32]. Entretanto, essa otimização baseou-se em obter a espessura do filme metálico na condição de acoplamento crítico, isto é, $\eta = 1$, o que não corresponde à situação de sensibilidade máxima do efeito RPS. Nas seções seguintes descrevem-se sucintamente os dois algoritmos heurísticos escolhidos e como aplicá-los ao problema da otimização de sensores RPS nas configurações de Kretschmann e de Otto a fim de obter os valores ótimos das variáveis de decisão: ângulo de incidência e espessura do filme/*gap*.

3.1 Método de Monte Carlo

O algoritmo de Monte Carlo [13,14] é um algoritmo de busca intrinsecamente aleatório que pode ser usado para determinar o ponto ótimo global de qualquer função objetivo. Ele sorteia uma vasta quantidade de pontos aleatórios — estimadores das variáveis de decisão — dentro de uma região de busca, avalia a função objetivo em cada ponto e elege o melhor ponto como candidato a ótimo global. Esse procedimento pode ser repetido diversas vezes, comparando o candidato a ótimo global da atual iteração com o da iteração anterior, até que se satisfaça uma condição de convergência — por exemplo, o número máximo de iterações estabelecido pelo usuário. Vale sublinhar que não há necessidade de uma estimativa inicial precisa e que quanto maior o número de pontos sorteados ou de iterações, maior será a

probabilidade de encontrar o ótimo global. A Figura 3.1 ilustra o sorteio de pontos em uma iteração do algoritmo dos quais um é considerado como candidato a ótimo global. O problema de otimização possui duas variáveis de decisão.

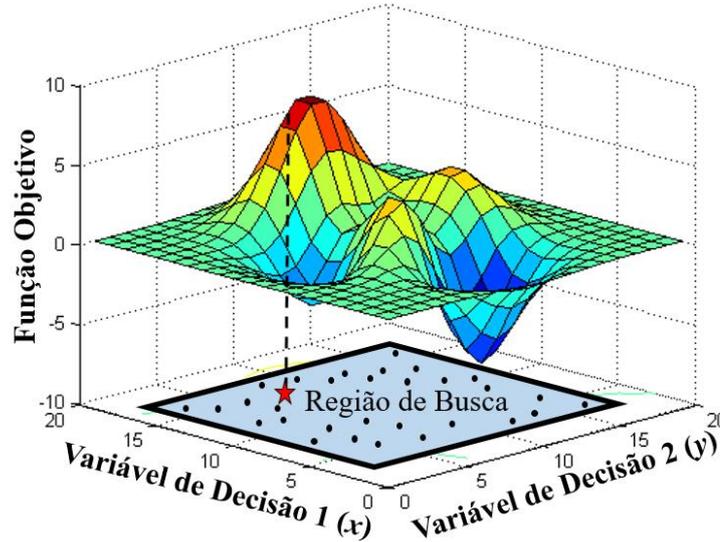


Figura 3.1 – Sorteio de pontos dentro da região de busca em uma iteração do algoritmo de Monte Carlo. O candidato a ótimo global está na forma de uma estrela.

Os pontos são sorteados por meio de uma distribuição uniforme e suas coordenadas são estimativas das variáveis de decisão. A posição $\vec{X}_i = (x_i, y_i)$ do i -ésimo ponto é expressa por [13,14]

$$\vec{X}_i = \vec{X}_l + \vec{r} \circ (\vec{X}_u - \vec{X}_l), \quad (3.1)$$

em que $\vec{X}_l = (x_l, y_l)$ e $\vec{X}_u = (x_u, y_u)$ são os limites inferior e superior do intervalo de busca, respectivamente, e $\vec{r} = (r_x, r_y)$ é um vetor de variáveis aleatórias uniformes entre 0 e 1. O símbolo \circ denota o produto de Hadamard entre dois vetores, i.e., a operação produto elemento por elemento.

Apesar desse algoritmo sempre funcionar, independentemente da complexidade da função objetivo, sua convergência depende de um grande número de pontos sorteados ou de iterações a fim de que se possa ter uma alta probabilidade de se encontrar o ponto ótimo global. Uma estratégia para aumentar a eficiência deste método dá-se pela diminuição da região de busca a qual pode ser obtida através de uma estimativa dos limites físicos do problema. Por exemplo, em vez de definir o intervalo de busca relativo ao ângulo de incidência entre 0° e 90° , sabe-se que o ângulo de incidência ótimo sempre se situa entre o ângulo de reflexão interna

total e o ângulo de ressonância e dessa forma pode-se definir uma região de busca menor relativamente ao ângulo de incidência.

Uma outra forma de diminuir a região de busca consiste em diminuí-la gradualmente em cada iteração do algoritmo. Entretanto, deve-se ter cuidado para não excluir pontos ótimos localizados próximos aos limites da região de busca. Para evitar essa exclusão, preferiu-se não adotar essa estratégia neste trabalho.

A Figura 3.2 apresenta um fluxograma do algoritmo de Monte Carlo aplicado à otimização da sensibilidade de sensores RPS tanto na configuração de Kretschmann quanto na de Otto [29]. A função objetivo $S = |dR/dn|$ é avaliada por meio da derivada numérica da reflectância (2.24) em relação ao índice de refração do meio sensoriado. Considera-se o módulo da sensibilidade, visto que valores negativos apenas indicam uma taxa de variação no sentido oposto; interessa-se pelo seu valor absoluto.

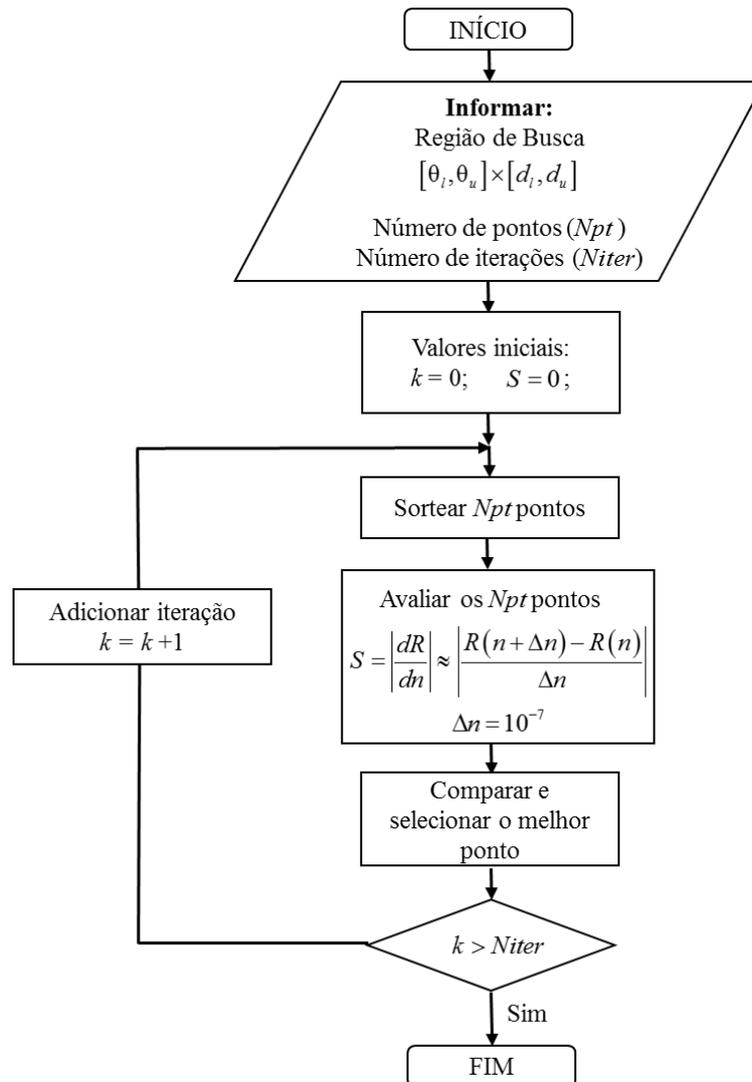


Figura 3.2 – Fluxograma do algoritmo de otimização de sensores RPS via método de Monte Carlo. Adaptada de [13].

O fluxograma inicia-se com a definição da região de busca, delimitando os limites inferiores e superiores das variáveis de decisão $[\theta_l, \theta_u] \times [d_l, d_u]$ onde o subscrito l indica o limite inferior (*lower*) e u indica o limite superior (*upper*). Também na inicialização do algoritmo define-se o número de pontos (N_{pt}) e o número de iterações (N_{iter}). Cria-se uma variável k para indicar a k -ésima iteração do laço *for* e inicializa-se o valor da sensibilidade máxima S como zero. A cada iteração são sorteados N_{pt} pontos nos quais a função objetivo é avaliada. No cálculo da derivada numérica referente à sensibilidade foi escolhido um incremento $\Delta n = 10^{-7}$ para garantir uma boa aproximação em relação ao limite que define a derivada. Em seguida, comparam-se os pontos avaliados e elege-se o melhor deles como candidato a ponto ótimo. Repete-se esse processo até que a condição de convergência seja satisfeita, neste caso escolhida como o número máximo de iterações N_{iter} , comparando o valor do candidato a ponto ótimo de uma iteração com o da iteração anterior.

3.2 Método do Enxame de Partículas

O algoritmo de otimização por enxame de partículas [13,15] — PSO — é um algoritmo de busca aleatória que emula o comportamento de um enxame de partículas (bando de pássaros) com o objetivo de encontrar cooperativamente o ótimo global da função objetivo. A Figura 3.3 ilustra o enxame de partículas para o caso de um problema de otimização com duas variáveis de decisão.

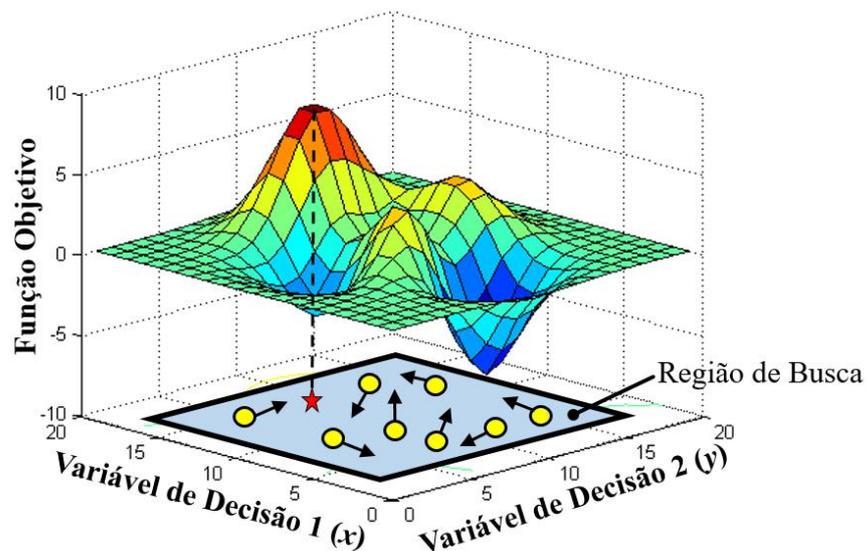


Figura 3.3 – Enxame de partículas buscando cooperativamente o ponto ótimo global.

O ponto ótimo global está na forma de uma estrela.

Inicialmente são sorteadas inúmeras partículas por meio de uma distribuição uniforme dentro de uma região de busca. Cada partícula corresponde a um ponto cujas coordenadas representam estimativas das variáveis de decisão. As partículas movem-se com “velocidade” variável influenciada por suas “inércias”, pela comunicação entre si sobre o melhor ponto do grupo e pelas suas melhores posições individuais até então alcançadas em iterações anteriores. Em cada iteração, as partículas ajustam suas posições $\vec{X}_i = (x_i, y_i)$ e velocidades $\vec{v}_i = (v_{ix}, v_{iy})$ por meio das relações [13,15]

$$\vec{v}_i^{k+1} = w\vec{v}_i^k + c_1\vec{r}_1 \circ (\vec{p}_i^k - \vec{X}_i^k) + c_2\vec{r}_2 \circ (\vec{g}_i^k - \vec{X}_i^k) \quad (3.2)$$

$$\vec{X}_i^{k+1} = \vec{X}_i^k + \vec{v}_i^{k+1} \quad (3.3)$$

em que k é a ordem atual de iteração, w é o peso de inércia, c_1 e c_2 são os coeficientes de aceleração, $\vec{r}_1 = (r_{1x}, r_{1y})$ e $\vec{r}_2 = (r_{2x}, r_{2y})$ são vetores de variáveis aleatórias uniformes entre 0 e 1, \vec{p}_i é o melhor ponto alcançado por uma partícula individual e \vec{g}_i é o melhor ponto alcançado pelo grupo. O peso de inércia w controla a habilidade de exploração global do enxame de partículas. As constantes c_1 e c_2 estão relacionadas, respectivamente, com o comportamento cognitivo e com o comportamento social do enxame, caracterizando a natureza da exploração [13,15]. Valores razoáveis para esses parâmetros, baseados em tentativa e erro são $w = 0,75$, $c_1 = 1,5$ e $c_2 = 1,5$ [13,15].

A Equação (3.3) é idêntica a equação de um movimento uniforme $s = s_0 + vt$ considerando o tempo unitário por conta do processo iterativo. Assim como no algoritmo de Monte Carlo, não há necessidade de uma estimativa inicial precisa. A Figura 3.4 apresenta a distribuição de partículas antes e depois da aplicação do algoritmo PSO. Percebe-se que depois da aplicação do algoritmo as partículas encontram-se bastante próximas do ótimo global caracterizando-se por um algoritmo de busca cooperativa.

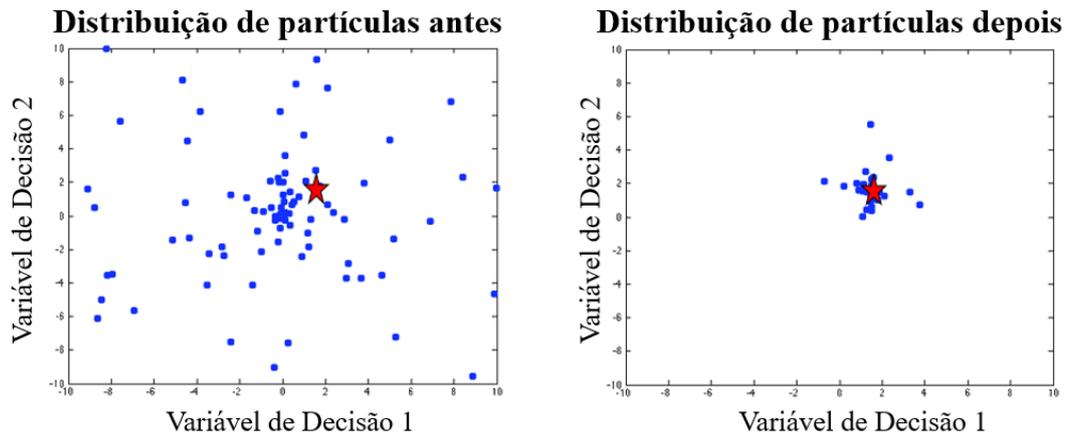


Figura 3.4 – Distribuição de partículas antes e depois da aplicação do algoritmo PSO.
O ponto ótimo global está na forma de uma estrela.

A cada iteração, deve-se garantir que todas as partículas se encontrem dentro da região de busca. Caso isso não ocorra, é necessário excluir essas possibilidades. A grande vantagem do PSO sobre o algoritmo de Monte Carlo é que ele converge com menor tempo e apresenta maior consistência de seus resultados. A Figura 3.5 mostra o fluxograma do algoritmo do Enxame de Partículas aplicado ao problema de otimização de sensores RPS em ambas configurações de acoplamento por prisma.

O fluxograma inicia-se com a definição da região de busca, delimitando os limites inferiores e superiores das variáveis de decisão $[\theta_l, \theta_u] \times [d_l, d_u]$ onde o subscrito l indica o limite inferior (*lower*) e u indica o limite superior (*upper*). Também na inicialização do algoritmo define-se o número de pontos (N_{pt}), o número de iterações (N_{iter}), $w = 0,75$, $c_1 = 1,5$ e $c_2 = 1,5$. Cria-se uma variável k para indicar a k -ésima iteração do laço *for*, inicializa-se o valor da sensibilidade máxima S como zero e sorteiam-se N_{pt} partículas e N_{pt} velocidades nos quais a função objetivo é avaliada. Em seguida, comparam-se o melhor ponto de cada partícula e o melhor ponto de todo enxame e verifica-se se eles estão dentro da região de busca (caso contrário, desprezam-se os resultados dessa iteração). Calculam-se novas posições e velocidades por meio das equações (3.2) e (3.3) e repete-se o processo até que seja satisfeita a condição de convergência, que nesse caso foi escolhida como o número máximo de iterações N_{iter} . Existem outras possibilidades para critérios de parada mais eficientes que não foram utilizados neste trabalho, como por exemplo, a distância relativa entre as partículas visto que elas se aproximam do ponto ótimo conjuntamente ao longo da execução do algoritmo como mostrado na Figura 3.4.

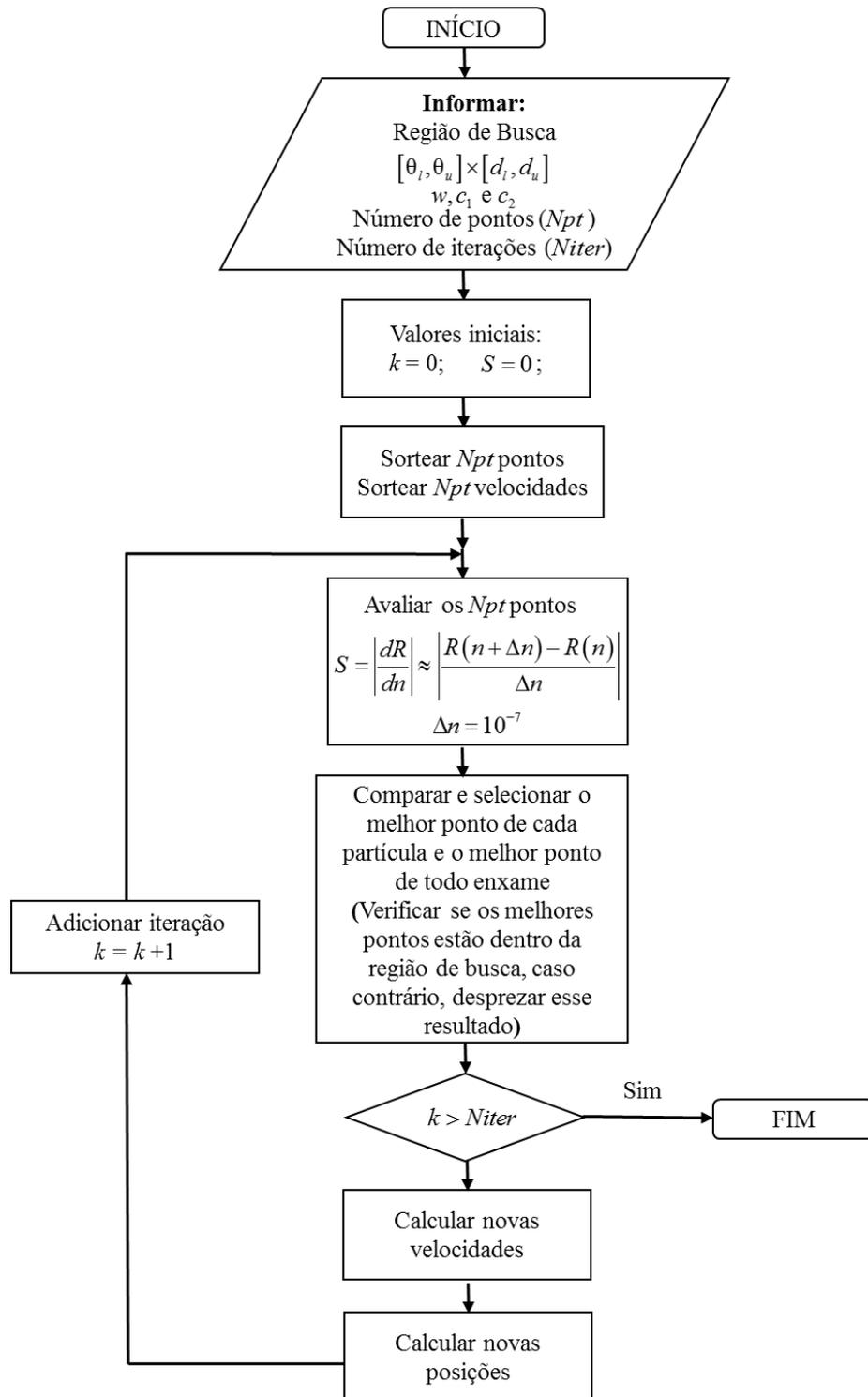


Figura 3.5 – Fluxograma do algoritmo de otimização de sensores RPS via método de Enxame de Partículas — PSO. Adaptada de [13].

4 Aplicativo *Web* para Projeto de Sensores Otimizados

Desenvolveu-se um aplicativo *web* denominado SWSO [33] — *Surface Wave Sensor Optimizer* (Otimizador de Sensores de Ondas de Superfície) — capaz de projetar sensores RPS otimizados utilizando os algoritmos de Monte Carlo e do Enxame de Partículas. Este capítulo descreve a arquitetura utilizada para construção do aplicativo que consiste em uma página *web* renderizada num navegador *web* a qual se comunica com uma rotina de *scripts* no servidor. Em seguida, resultados da otimização de sensores RPS com diversos filmes metálicos são mostrados utilizando o aplicativo. Por fim, utiliza-se o aplicativo para também projetar sensores de Ondas de Superfície de Bloch — sensores OSB — os quais apresentam operação similar aos sensores RPS, entretanto, fazem uso de estruturas multicamadas dielétricas no lugar de filmes metálicos, reduzindo as perdas e possibilitando a concepção de sensores de alta sensibilidade.

4.1 Arquitetura do Aplicativo *Web*

A grande vantagem de desenvolver aplicativos *web* ao invés de aplicativos *desktop* é que eles podem ser executados em qualquer sistema operacional sem a necessidade de instalação prévia do aplicativo, basta que o usuário (cliente) tenha acesso à internet por meio de um navegador *web* — Google Chrome, Internet Explorer, Mozilla Firefox ou Safari. O aplicativo desenvolvido neste trabalho foi testado nesses quatro navegadores.

A *World Wide Web*, ou simplesmente *web*, é a aplicação mais popular da internet e consiste num modelo de acesso à informação baseado no protocolo *HyperText Transfer Protocol* — HTTP — o qual define a estrutura das mensagens trocadas entre o usuário e o servidor, e o modo como elas são trocadas [34]. O protocolo HTTP é implementado em dois programas: programa do usuário e programa do servidor. No contexto de páginas *web*, o programa do usuário refere-se a um navegador *web* e o programa do servidor a um servidor *web* o qual hospeda páginas *web* endereçáveis por um *Uniform Resource Locator* — URL. Os servidores *web* mais populares são o Apache e o Nginx. Neste trabalho foi utilizado o servidor *web* Apache 2.0 num ambiente Linux em um servidor virtual Linode [35]. O servidor virtual Linode é uma máquina com 2 GB de RAM com 1 CPU Core Intel E5 Processor, com custo mensal de \$10,00. A Figura 4.1 apresenta um esquema de como é feita a troca de mensagens entre um usuário e um servidor obedecendo o protocolo HTTP. Quando o usuário solicita uma

página *web*, o navegador *web* envia uma mensagem de solicitação HTTP para o servidor *web*, o qual responde enviando para o usuário uma resposta HTTP contendo a página requisitada que será renderizada no navegador.

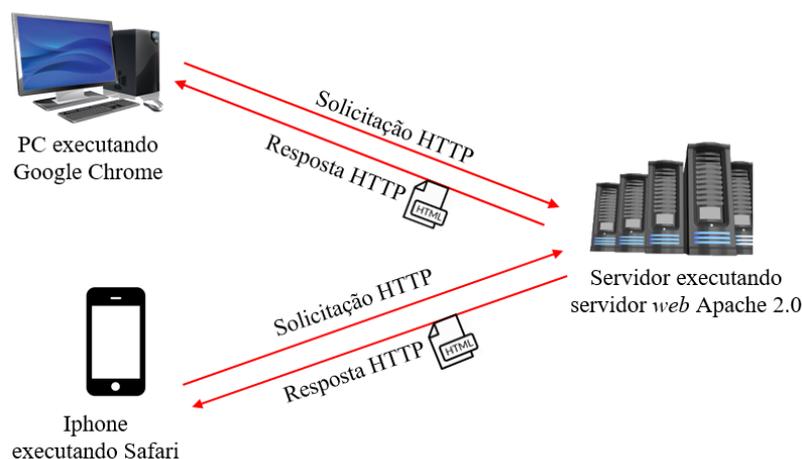


Figura 4.1 – Esquema de troca de mensagens entre usuários e servidor utilizando o protocolo HTTP.

Páginas *web* consistem em documentos de hipertexto, isto é, textos compostos de blocos de texto, imagens, sons e vídeos, que podem ser acessadas por *hyperlinks*, ou simplesmente *links*. As páginas *web* modernas são escritas utilizando as seguintes linguagens: *HyperText Markup Language* (HTML), JavaScript e *Cascading Style Sheets* (CSS) [36]. HTML é uma linguagem de marcação para escrita de hipertextos de páginas *web*. Ela define a estrutura da página a partir do uso de marcadores conhecidos como *tags*. CSS define o estilo da página. Por fim, JavaScript é uma linguagem interpretada que permite inserir interatividade na página como, por exemplo, responder a interações do usuário (clique de botões) com a execução de um cálculo, validação de dados de um formulário ou troca de imagens dinamicamente na página. Os scripts são executados no interpretador do próprio navegador *web* provocando mudanças na página *web* sem a necessidade de recarregá-la, isto é, sem precisar solicitar uma nova página ao servidor.

A primeira tentativa de arquitetura para o aplicativo consistiu em implementar os algoritmos de cálculo de refletância e de otimização de sensores RPS em rotinas de JavaScript dentro de uma página *web*. Esse tipo de arquitetura é conhecido como *client-side*, uma vez que todo processamento ocorre no interpretador do navegador *web*, isto é, na máquina do usuário. Entretanto, essa tentativa não se mostrou eficientemente adequada devido às seguintes questões: complexidade de escrever algoritmos numéricos em JavaScript, todo código fonte é

enviado para o navegador *web* facilitando sua cópia por terceiros e o desempenho do aplicativo depende do quão rápido é o interpretador JavaScript do navegador e da configuração da máquina do usuário.

Em busca de obter uma arquitetura que protegesse o código fonte e que fosse independente da configuração da máquina do cliente, optou-se por uma arquitetura *server-side*. Nesse tipo de arquitetura, todo processamento numérico ocorre no servidor e a página *web* funciona apenas como uma interface de entrada e saída de dados. Para este propósito, foi necessário implementar uma metodologia de técnicas de programação *web* denominada *Asynchronous Javascript and XML* [37] — AJAX — que permite a um navegador passar parâmetros para o servidor *web* sem a necessidade de recarregar a página. Esses parâmetros geralmente estão no formato *JavaScript Object Notation* — JSON. As solicitações via AJAX acionam rotinas de *scripts* alojadas no servidor por meio da *Common Gateway Interface* [38] — CGI — que define uma maneira do servidor *web* interagir com programas externos de geração de conteúdo. Programas CGI geralmente são escritos em C/C++, PHP, Perl ou Python. Escolheu-se para este aplicativo a linguagem Python devido a sua versatilidade em funcionar tanto no desenvolvimento de aplicações *web*, quanto no desenvolvimento de algoritmos numéricos similares aos do MATLAB por meio das bibliotecas *numpy* e *matplotlib* [39]. Para correto funcionamento do aplicativo é necessário configurar o servidor *web* Apache 2.0 de modo a reconhecer programas CGI escritos em Python.

Portanto, o aplicativo foi implementado como segue: a página *web* funciona como uma interface de entrada e saída de dados que, por meio da tecnologia AJAX, é capaz de acionar os algoritmos de cálculo de reflectância e de otimização de sensores RPS alojados no servidor. Os resultados desses algoritmos são enviados para o navegador que atualiza elementos específicos da página. A Figura 4.2 ilustra o funcionamento do aplicativo *web* SWSO.

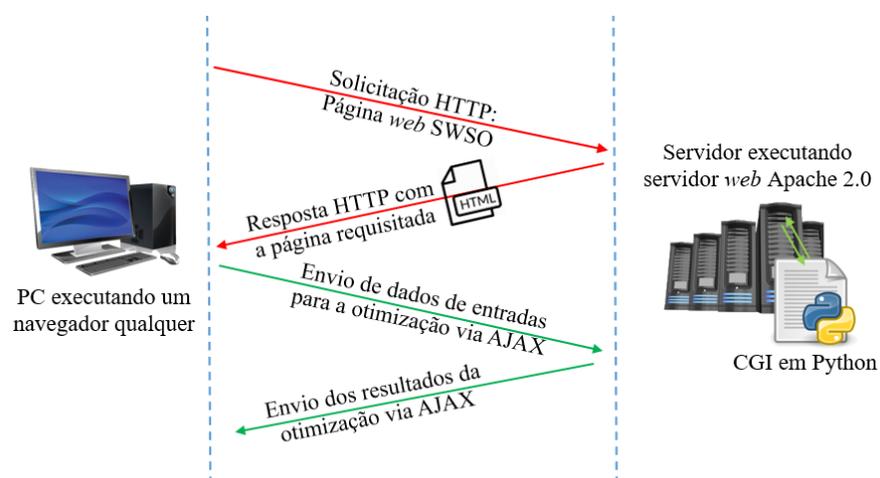


Figura 4.2 – Arquitetura do aplicativo *web* SWSO (<https://www.ufpe.br/fontana/sws/>).

A arquitetura *server-side* para o aplicativo segue a tendência tecnológica da Computação nas Nuvens [16,17] onde todo poder de processamento é centralizado em grandes servidores via internet. O *layout* da página *web* do aplicativo SWSO está apresentado na Figura 4.3. O quadro superior é responsável pelo cálculo da reflectância baseado nas equações de Fresnel e o inferior pelos algoritmos de otimização Monte Carlo e PSO — Figuras 3.2 e 3.5.

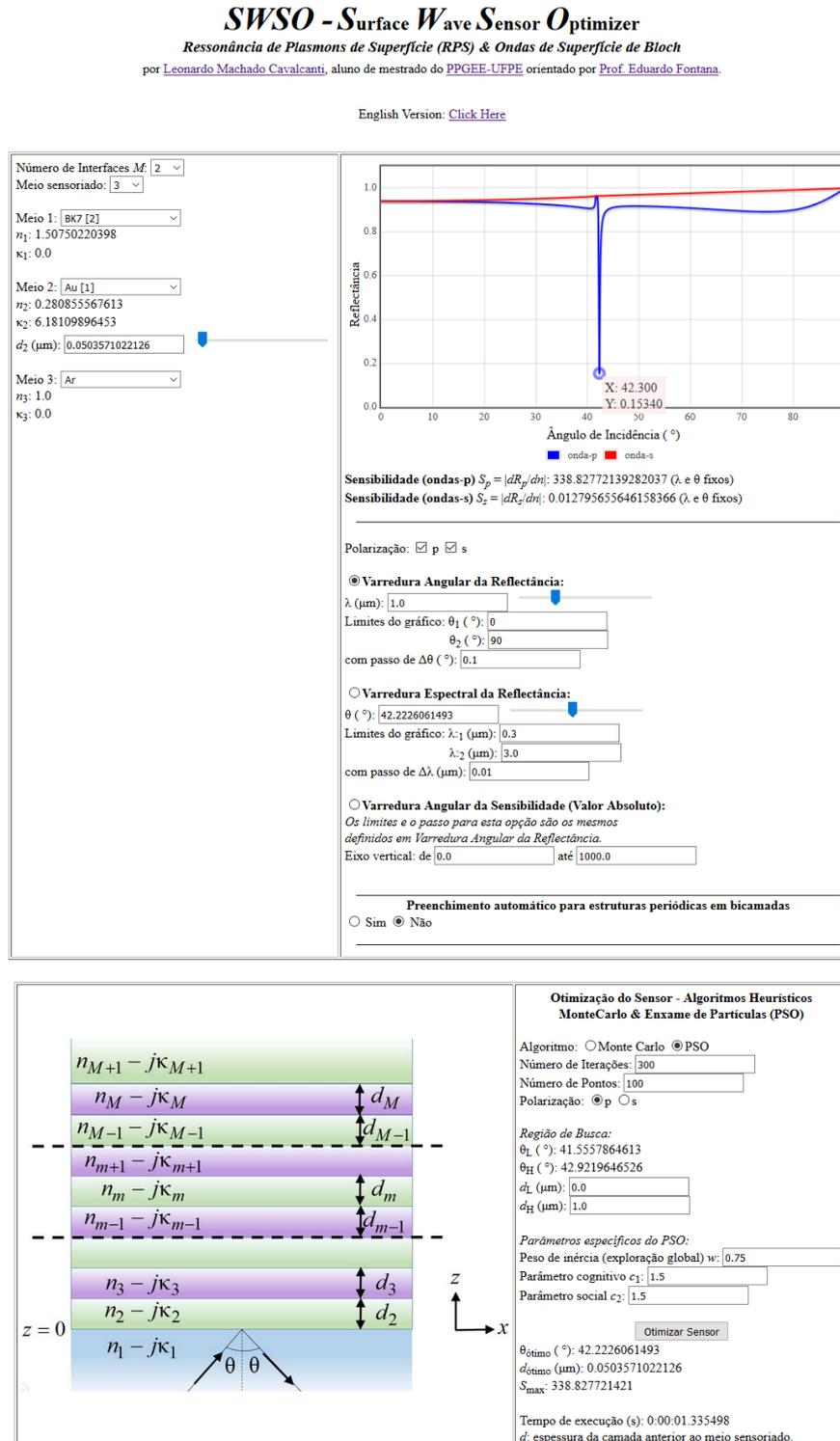


Figura 4.3 – Página *web* do aplicativo SWSO [33].

Os pontos das curvas mostradas no quadro superior do aplicativo ilustrado na Figura 4.3 são calculados na rotina de *scripts* em Python alojada no servidor. As curvas são renderizadas no navegador por meio da utilização da biblioteca Flot [40] baseada em JavaScript, mais especificamente em JQuery [41], uma outra biblioteca que permite escrever comandos em JavaScript de forma mais compacta e simples. Há três opções de geração de curvas: varredura angular da reflectância, varredura espectral da reflectância e varredura angular da sensibilidade.

As constantes ópticas dos materiais podem ser inseridas manualmente, isto é, o usuário pode definir valores numéricos para o índice de refração n e para o coeficiente de extinção κ , ou através da seleção de referências exportadas da página *Refractive index database* [42] — utilizou-se uma interpolação por *spline* cúbica [43] para obter a dependência espectral das constantes ópticas dessas referências. Para obtenção das constantes ópticas de vidros, fez-se uso das Equações de Sellmeier [44]. Vale neste momento lembrar as relações entre índice de refração e permissividade [18], uma vez que na descrição teórica sempre se utilizou a permissividade,

$$n - j\kappa = \sqrt{\epsilon} = \sqrt{\epsilon' - j\epsilon''}, \quad (4.1)$$

$$\epsilon' = n^2 - \kappa^2, \quad (4.2)$$

$$\epsilon'' = 2n\kappa. \quad (4.3)$$

A formulação de Fresnel utilizada no aplicativo abrange estruturas multicamadas com interfaces planares com no máximo 25 camadas (24 interfaces) empregando as equações para interface dupla (2.24) a (2.26) iterativamente [18]. A Figura 4.4 apresenta uma estrutura multicamadas genérica com $M + 1$ camadas (M interfaces).

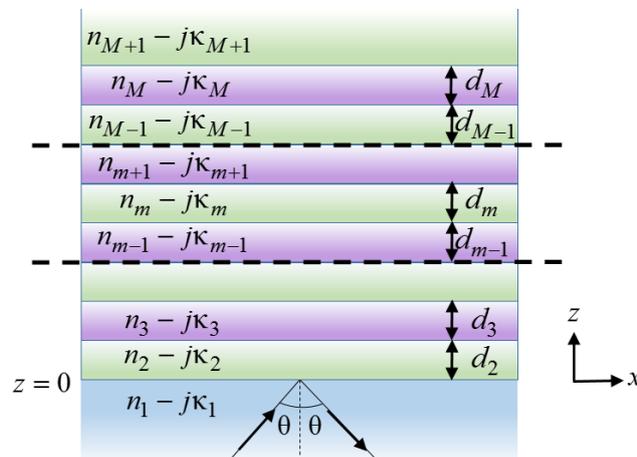


Figura 4.4 – Estrutura multicamadas genérica com interface planares.

O cálculo da reflectância segue a formulação proposta na Ref. [18]. Os parâmetros de entrada podem ser expressos pelos seguintes vetores

$$\tilde{\varepsilon} = (\varepsilon_1 \ \varepsilon_2 \ \cdots \ \varepsilon_M \ \varepsilon_{M+1})^T, \quad (4.4)$$

$$\tilde{D} = (0 \ d_2 \ \cdots \ d_{M-1} \ d_M \ 0)^T. \quad (4.5)$$

Com isso, pode-se calcular a reflectância para a m -ésima interface com o auxílio de (2.24)

$$\rho_m = \frac{r_m + \rho_{m+1} e^{-j2k_m d_m}}{1 + r_m \rho_{m+1} e^{-j2k_m d_m}}, \quad (4.6)$$

onde

$$r_m = \frac{f_{m+1} k_m - f_m k_{m+1}}{f_{m+1} k_m + f_m k_{m+1}}, \quad (4.7)$$

$$f_m \equiv \begin{cases} \varepsilon_m, & \text{para polarização } p \\ 1, & \text{para polarização } s \end{cases} \quad (4.8)$$

$$k_m = k_0 \sqrt{\varepsilon_m - \varepsilon_1 (\sin \theta)^2}. \quad (4.9)$$

Para calcular a reflectância de toda a estrutura, calcula-se primeiramente ρ_m para a última interface (M) e em seguida propagando-se o cálculo de ρ_m utilizando (4.6) até a primeira interface, de modo que

$$\rho_M = r_M, \quad (4.10)$$

$$m = \{M-1, M-2, \dots, 1\}, \quad (4.11)$$

$$R \equiv |\rho_1|^2 = R(\tilde{\varepsilon}, \tilde{D}, \theta). \quad (4.12)$$

A sensibilidade é expressa pela derivada numérica de (4.12) em relação ao índice de refração do meio sensoriado

$$S = \frac{dR}{dn_{M+1}} \approx \frac{R(n_{M+1} + \Delta n_{M+1}) - R(n_{M+1})}{\Delta n_{M+1}}, \quad (4.13)$$

onde $\Delta n_{M+1} = 10^{-7}$.

No quadro superior do aplicativo, qualquer mudança nos valores de entrada acionará *scripts* alojados no servidor que calculam a reflectância e a sensibilidade do sensor. Já no quadro inferior, encontram-se os parâmetros dos algoritmos de otimização Monte Carlo e PSO que só serão acionados no servidor apertando o botão “Otimizar Sensor”. Uma estratégia para aumentar a eficiência dos algoritmos de otimização foi diminuir a região de busca relativa ao ângulo de incidência uma vez que o ângulo de incidência ótimo sempre se situa entre o ângulo de reflexão interna total e um certo ângulo maior que ângulo de ressonância: $\theta_{\text{crítico}} < \theta \leq 2\theta_{\text{PS}} - \theta_{\text{crítico}}$. A região de busca relativa a espessura foi definida como $0 < d < 5 \mu\text{m}$.

4.2 Otimização de Sensores RPS com Filmes de Ouro

Nesta seção, aplicam-se os algoritmos de Monte Carlo e PSO ao projeto de sensores RPS otimizados nas configurações de Kretschmann e de Otto utilizando o aplicativo SWSO. Comparam-se seus desempenhos com o algoritmo de busca direta reportado em [10] apenas para configuração de Kretschmann. Sensores com filmes de Au são estudados uma vez que apresentam grande estabilidade química quando expostos à atmosfera. Além disso, são altamente sensíveis na região do infravermelho próximo quando comparados com outros metais [10]. Os resultados da otimização de sensores com filme de Au, prisma BK7 e ar como meio adjacente ao metal operando em $1 \mu\text{m}$ estão apresentados na Tabela 4.1 [29]. Três tentativas foram efetuadas para cada um dos algoritmos heurísticos para verificar sua consistência. A dependência espectral das constantes ópticas do filme de ouro foram extraídas de [45] por meio de interpolação por *spline* cúbica e o índice de refração do prisma BK7 foi determinado pela equação de Sellmeier [44] — referências consultadas no *Refractive index database* [42].

Da Tabela 4.1 pode-se verificar que o algoritmo que apresentou melhor eficiência computacional, simplicidade e consistência foi o algoritmo PSO. Ele foi 7,5 vezes mais rápido

que o algoritmo de busca direta [10] e 32 vezes mais rápido do que o algoritmo de Monte Carlo. Ademais, o PSO precisou de poucos pontos para convergir e seus resultados foram bem consistentes uma vez que se obteve os mesmos valores nas três tentativas.

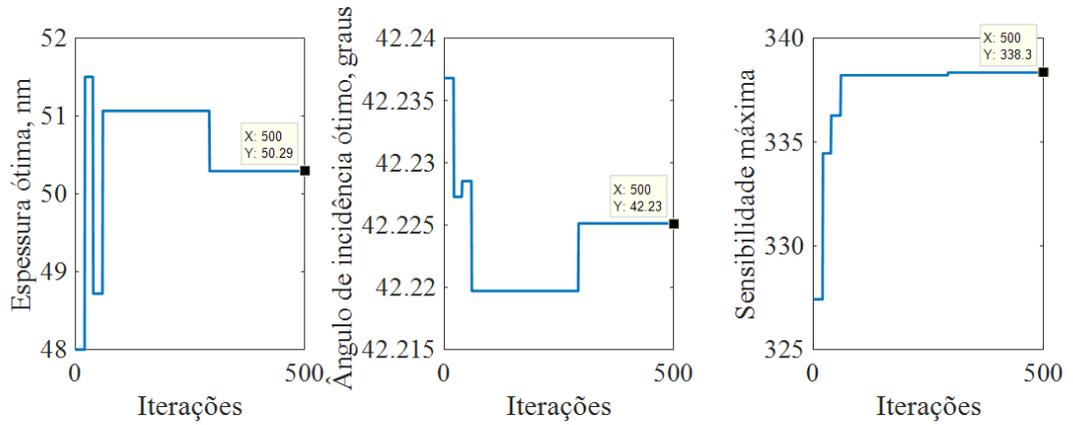
Tabela 4.1 – Resultados da otimização de sensores RPS operando em $\lambda = 1 \mu\text{m}$ [29].

Kretschmann, BK7-Au-Ar				
Método	θ , graus	d , μm	S	Execução*
Ref.[10]	42,22	0,05	337,90	11,255 s
Monte Carlo	42,2231	0,0500	338,7564	40,273 s
	42,2233	0,0505	338,7535	2000 pontos
	42,2255	0,0499	338,2779	500 iterações
PSO	42,2226	0,0504	338,8277	1,501 s
	42,2226	0,0504	338,8277	100 pontos
	42,2226	0,0504	338,8277	300 iterações
Otto, BK7-Ar-Au				
Ref.[10]	–	–	–	–
Monte Carlo	42,2505	1,9929	321,1358	–
	42,2505	2,0001	321,1584	
	42,2509	1,9967	321,1434	
PSO	42,2507	2,0000	321,1613	–
	42,2507	2,0000	321,1613	
	42,2507	2,0000	321,1613	

A Figura 4.5 mostra a evolução dos valores das variáveis de decisão e da função objetivo ao longo das iterações para os algoritmos de Monte Carlo e PSO na configuração de Kretschmann. Alterou-se o valor do número de iterações do PSO de 300 para 40 a fim de melhor ilustrar o processo de convergência deste algoritmo. Os outros parâmetros da otimização são os mesmos dispostos na Tabela 4.1. Percebe-se claramente que o PSO converge mais rapidamente que o algoritmo de Monte Carlo. De fato, 300 iterações para o algoritmo PSO como disposto na Tabela 4.1 é um valor mais que suficiente para garantir a convergência; 30 iterações já seriam o suficiente como indicado na Figura 4.5.

Um gráfico da sensibilidade em função da espessura e do ângulo de incidência é mostrado na Figura 4.6 para configuração de Kretschmann. Foi destacado o valor máximo da sensibilidade (~ 338) que corresponde ao mesmo valor obtido pelos algoritmos de otimização mostrados na Tabela 4.1. Vale salientar que o pico da superfície mostrada na Figura 4.6 perto do ângulo de $41,5^\circ$ deve-se ao fato de que a curva de reflectância na configuração de Kretschmann possui uma descontinuidade antes do ângulo de ressonância como pode ser verificada na Figura 2.9. Esse ponto não é considerado nos algoritmos heurísticos, visto que a redução proposta da região de busca relativa ao ângulo de incidência exclui essa possibilidade.

Monte Carlo (2000 pontos e 500 iterações)



PSO (100 pontos e 40 iterações)

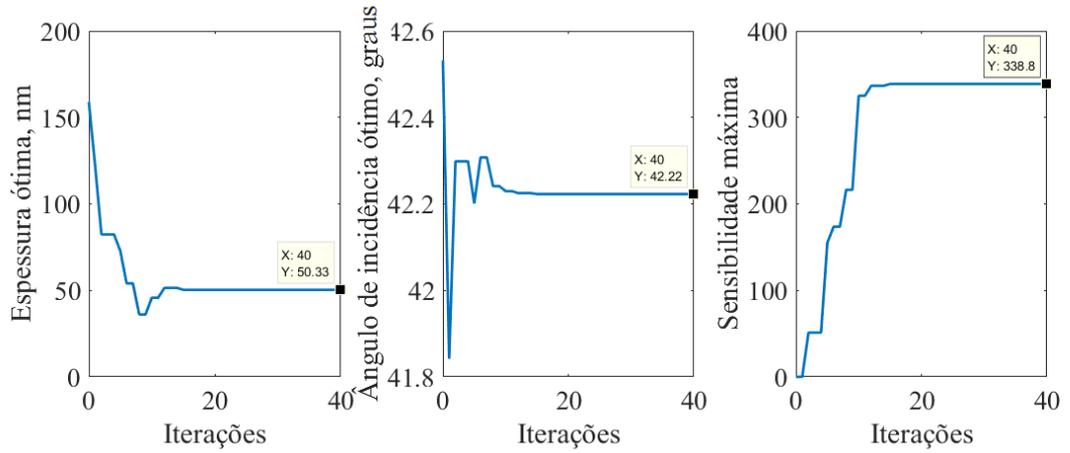


Figura 4.5 – Evolução dos valores das variáveis de decisão e da função objetivo ao longo das iterações para configuração de Kretschmann.

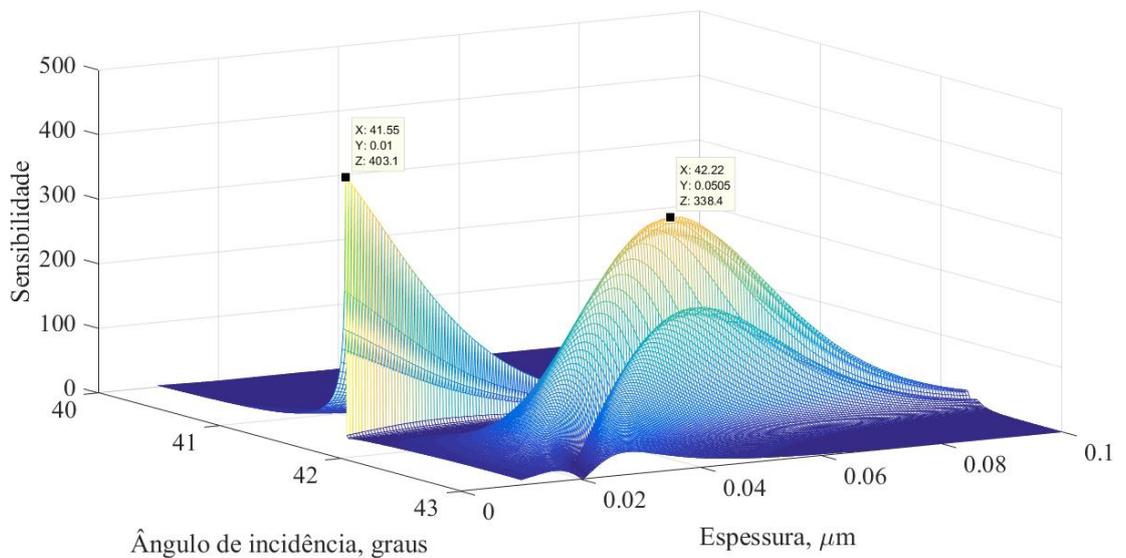


Figura 4.6 – Gráfico da sensibilidade em função das variáveis de decisão para configuração de Kretschmann.

As Figuras 4.5 e 4.6 foram confeccionadas numa rotina MATLAB equivalente àquela do aplicativo SWSO. Percebeu-se que o MATLAB resolve o problema de otimização aproximadamente 5 a 10 vezes mais rápido que o Python.

Vale observar neste momento que a fórmula (2.61) que calcula o limite teórico da sensibilidade máxima fornece-nos um valor próximo dos mostrados na Tabela 4.1:

$$\left(\frac{\Delta R}{\Delta n}\right)_{op} = 1,54 \frac{\varepsilon'^2}{2\varepsilon''n^3} = 1,54 \frac{\varepsilon'^2}{2\varepsilon''n^3} = 1,54 \frac{(38,1271)^2}{2 \times 3,4720 \times 1^3} = 322,3886 \quad (4.14)$$

o que valida o uso dessa expressão para projetos de sensores RPS otimizados.

Eleito o melhor algoritmo de otimização — PSO, pode-se agora realizar uma análise espectral dos parâmetros ótimos do sensor. A dependência espectral da sensibilidade máxima, da espessura ótima e do ângulo de incidência ótimo estão mostradas nas Figuras 4.7, 4.8 e 4.9, respectivamente [29]. Essas curvas foram obtidas utilizando o algoritmo PSO para as configurações de Kretschmann e de Otto com ar ou água [46] como meios adjacentes ao metal na faixa de comprimento de onda de 0,6 μm a 1,6 μm . Vale salientar que essas curvas dependem da base de dados utilizada — no caso, considerou-se a base da Ref. [45].

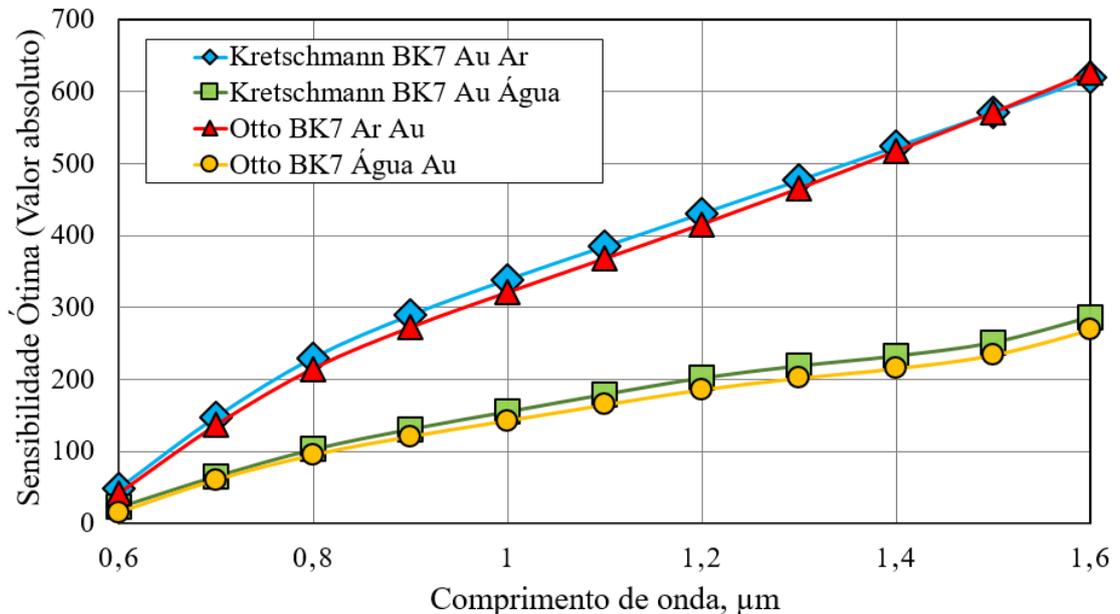


Figura 4.7 – Dependência espectral da sensibilidade máxima para as configurações de Kretschmann e de Otto.

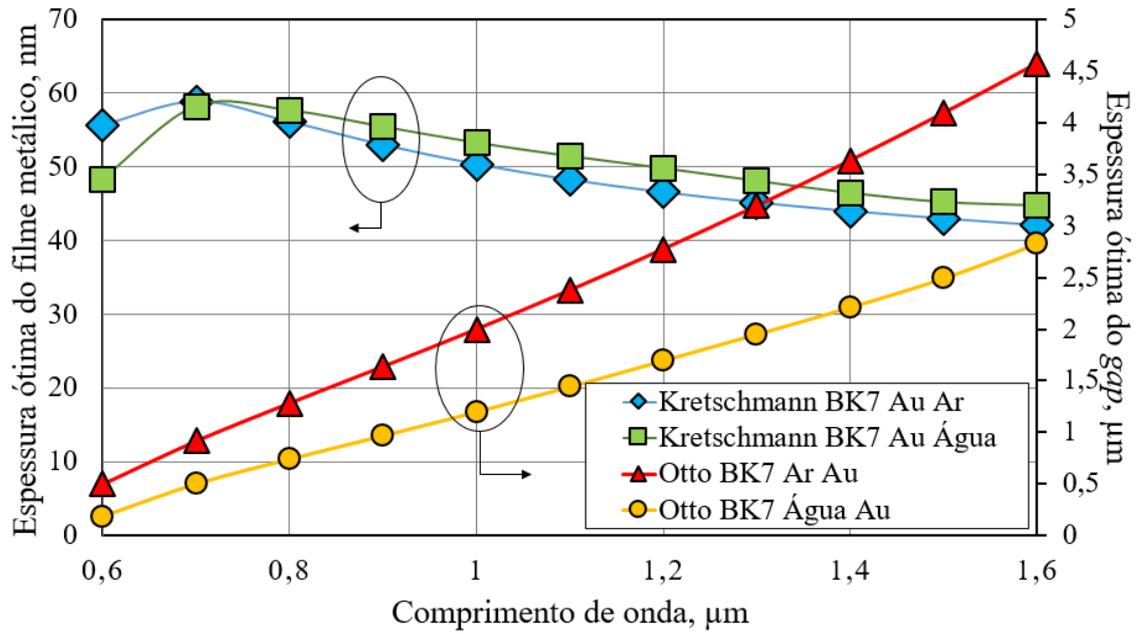


Figura 4.8 – Dependência espectral da espessura ótima do filme/*gap* para as configurações de Kretschmann e de Otto.

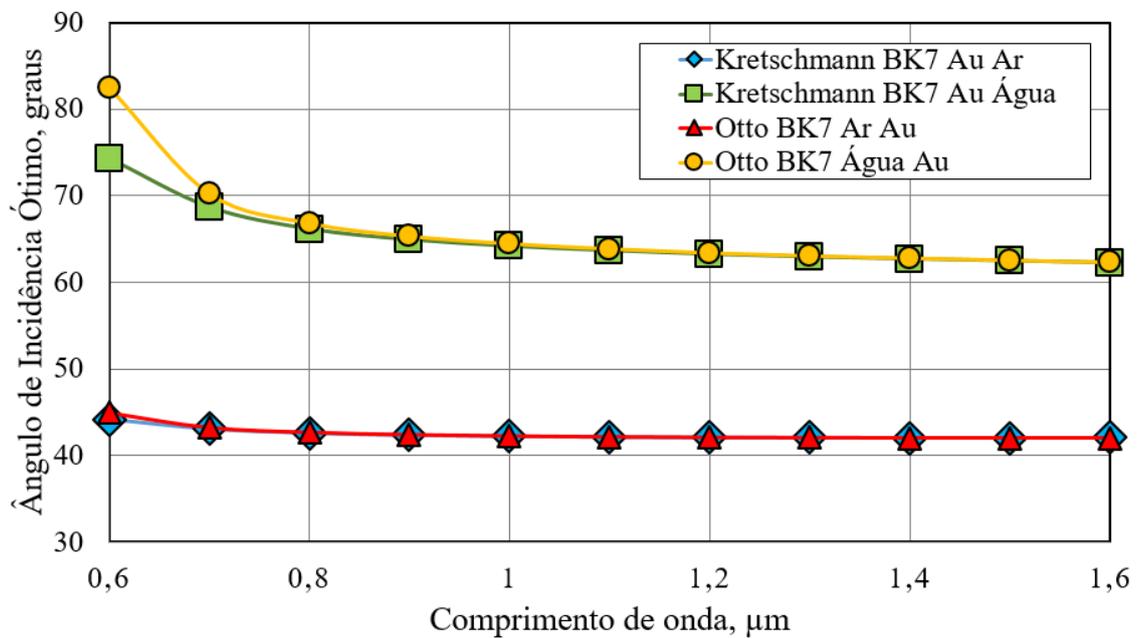


Figura 4.9 – Dependência espectral do ângulo de incidência ótimo para as configurações de Kretschmann e de Otto.

As curvas da Figura 4.7 mostram que as sensibilidades máximas em ambas configurações são bastante próximas. Como esperado, a sensibilidade para aplicações em meios aquosos é menor que para meios gasosos. As curvas crescem monotonicamente até $1,6 \mu\text{m}$, em comprimentos de ondas superiores a $1,6 \mu\text{m}$ as curvas apresentam pequenas oscilações que foram omitidas nesta dissertação. A faixa de comprimento de onda entre $1,5 \mu\text{m}$ e $1,6 \mu\text{m}$ permite projetar sensores RPS de alta sensibilidade sendo uma faixa de bastante interesse porque é nessa porção do espectro que sistemas de comunicações ópticas de baixas perdas são projetados ($\sim 1,55 \mu\text{m}$). Em particular, para o comprimento de onda de $1,6 \mu\text{m}$, a sensibilidade máxima é aumentada aproximadamente de um fator de 2 em relação à sensibilidade máxima em $1 \mu\text{m}$ para todas as configurações simuladas.

Com respeito ao comportamento espectral do ângulo de incidência ótimo, que é um parâmetro diretamente ajustado pelo usuário durante as medições, pode-se observar que seu valor foi alterado quando o meio sensoriado mudou do ar para água como esperado para um sensor RPS. Interessante notar que para um mesmo meio, o ângulo de incidência ótimo não sofreu grandes variações. A Figura 4.10 apresenta as curvas de ressonância e da sensibilidade para sensores RPS otimizados operando em $1,6 \mu\text{m}$ em ambas configurações de acoplamento por prisma para o ar [29]. Nesse caso, o sensor de Otto apresenta desempenho ligeiramente melhor que o sensor de Kretschmann. O ângulo de incidência ótimo para configuração de Kretschmann está localizado na faixa angular inferior ao ângulo de ressonância, enquanto que a configuração de Otto exibe uma maior sensibilidade na faixa superior ao ângulo de ressonância [29].

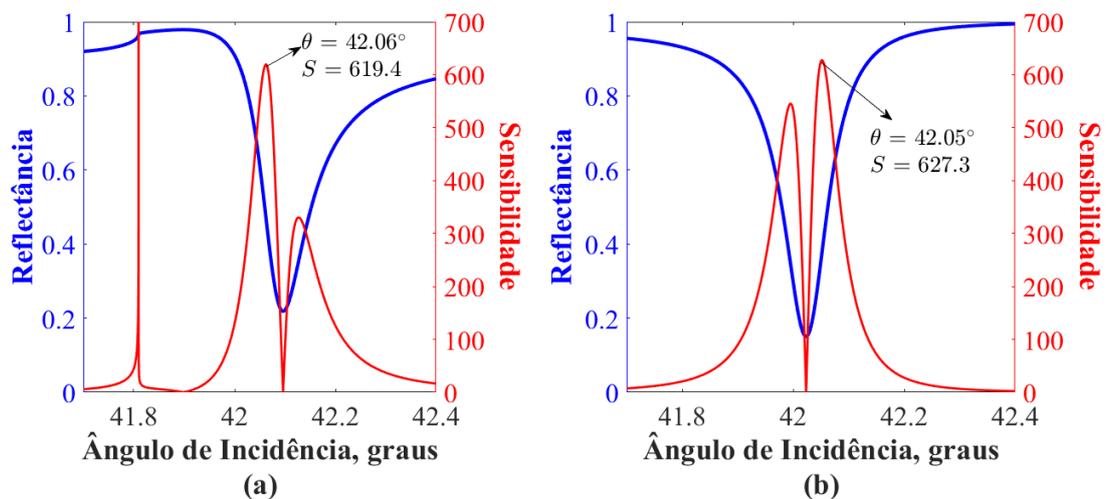


Figura 4.10 – Curvas de ressonância e sensibilidade para sensores RPS otimizados operando em $1,6 \mu\text{m}$ para o ar como meio sensoriado. (a) Configuração de Kretschmann, $d = 42 \text{ nm}$. (b) Configuração de Otto, $d = 4,57 \mu\text{m}$.

As Figuras 4.11 a 4.16 apresentam a dependência espectral dos parâmetros ótimos de sensores RPS com filmes de Au, Cu e Ag [45] em ambas configurações de Kretschmann e Otto para o ar como meio sensoriado. Constata-se pelas curvas que sensores com filme de Ag possuem maior sensibilidade que os de filme de Au e Cu para a base de dados utilizada. Entretanto, Au é escolhido na maioria dos casos devido a sua estabilidade química quando exposto a atmosfera. Todos os sensores apresentam sensibilidade maior na faixa de 1,6 μm , aproximadamente o dobro da sensibilidade em 1 μm .

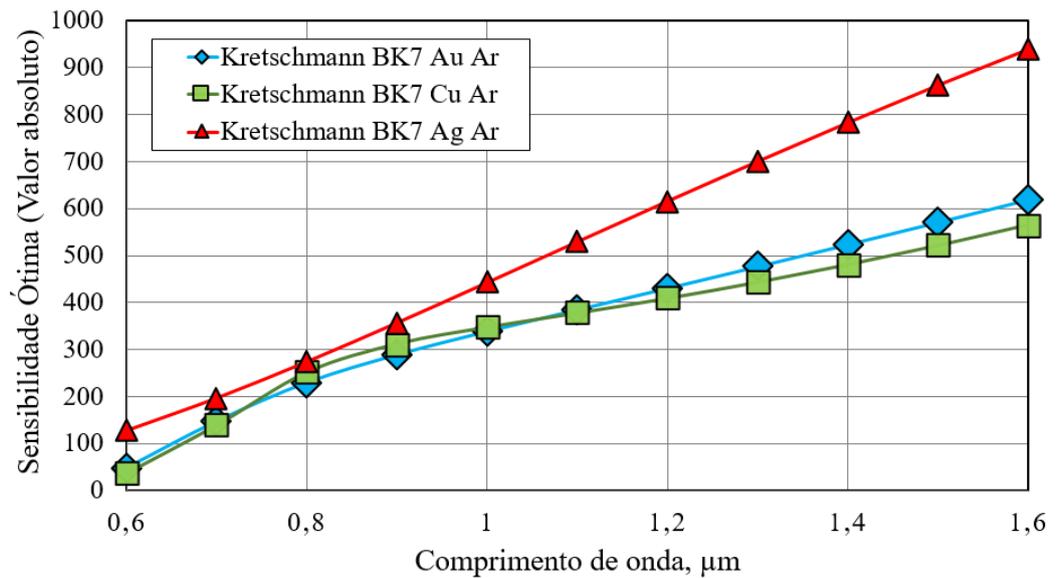


Figura 4.11 – Dependência espectral da sensibilidade máxima para configuração de Kretschmann.

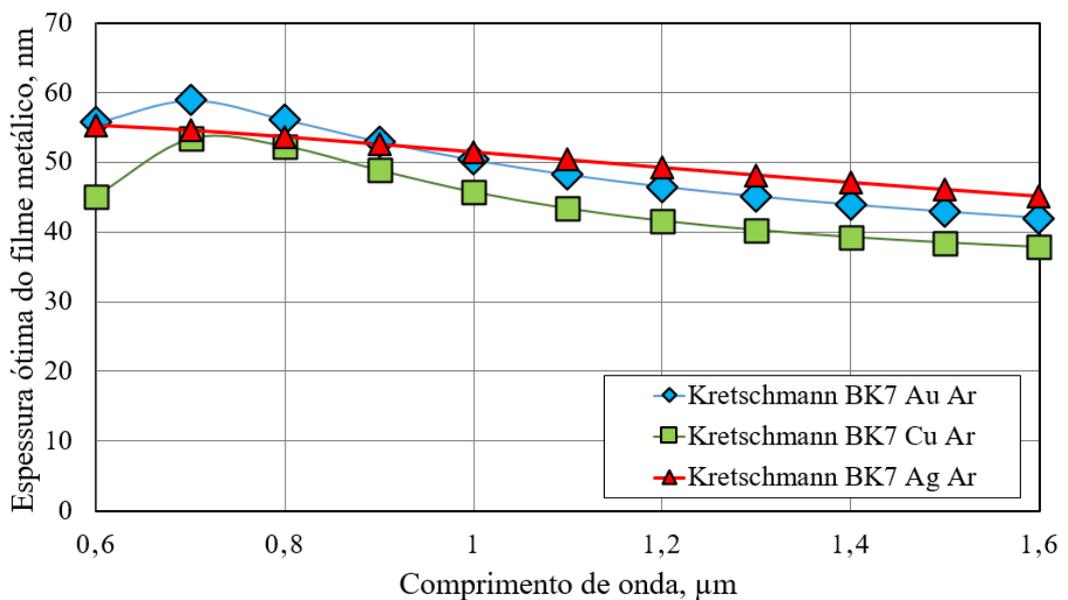


Figura 4.12 – Dependência espectral da espessura ótima do filme metálico para configuração de Kretschmann.

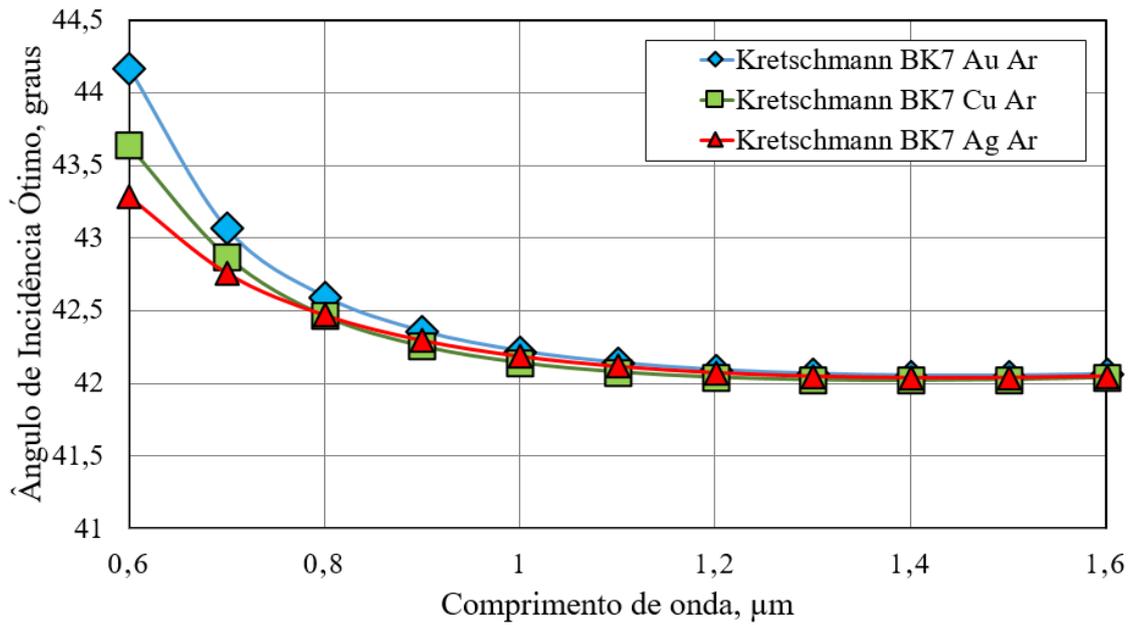


Figura 4.13 – Dependência espectral do ângulo de incidência ótimo para configuração de Kretschmann.

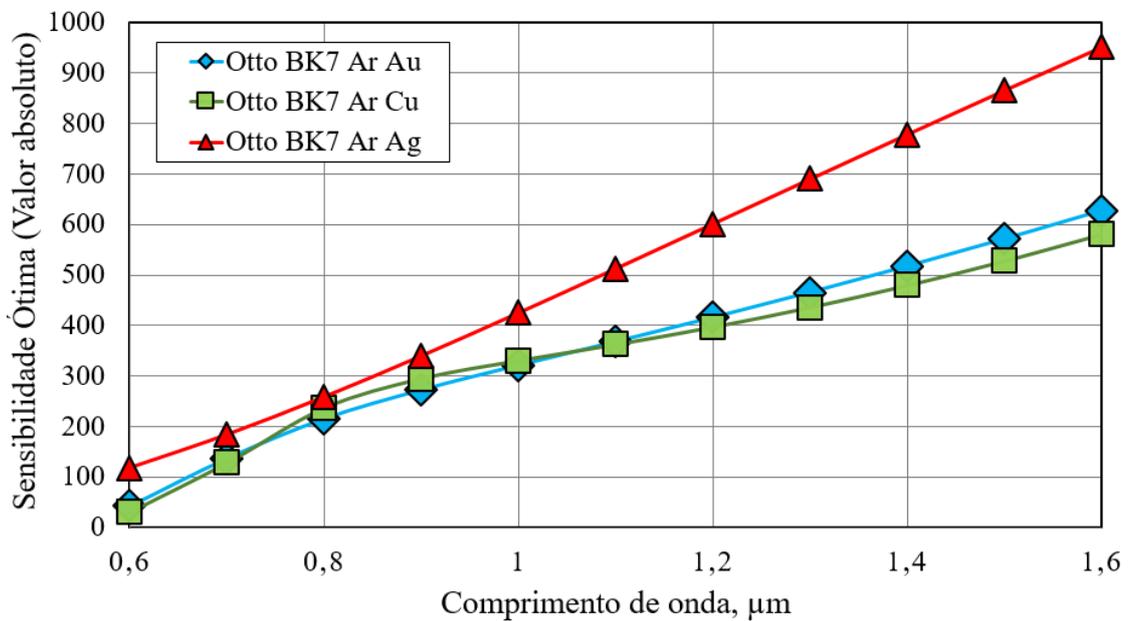


Figura 4.14 – Dependência espectral da sensibilidade máxima para configuração de Otto.

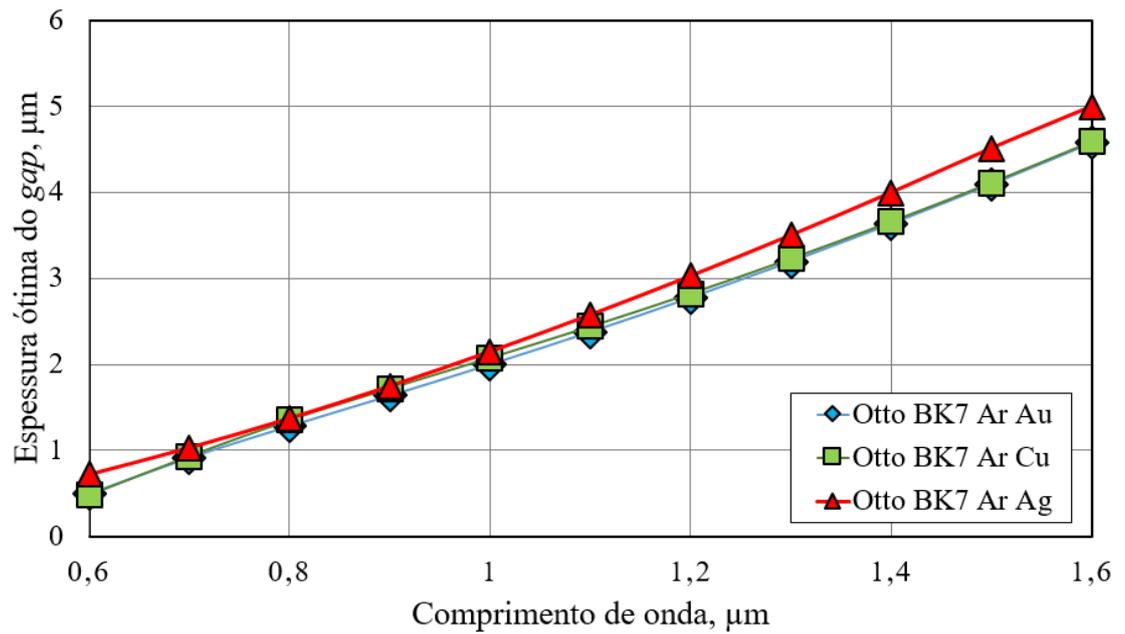


Figura 4.15 – Dependência espectral da espessura ótima do gap para configuração de Otto.

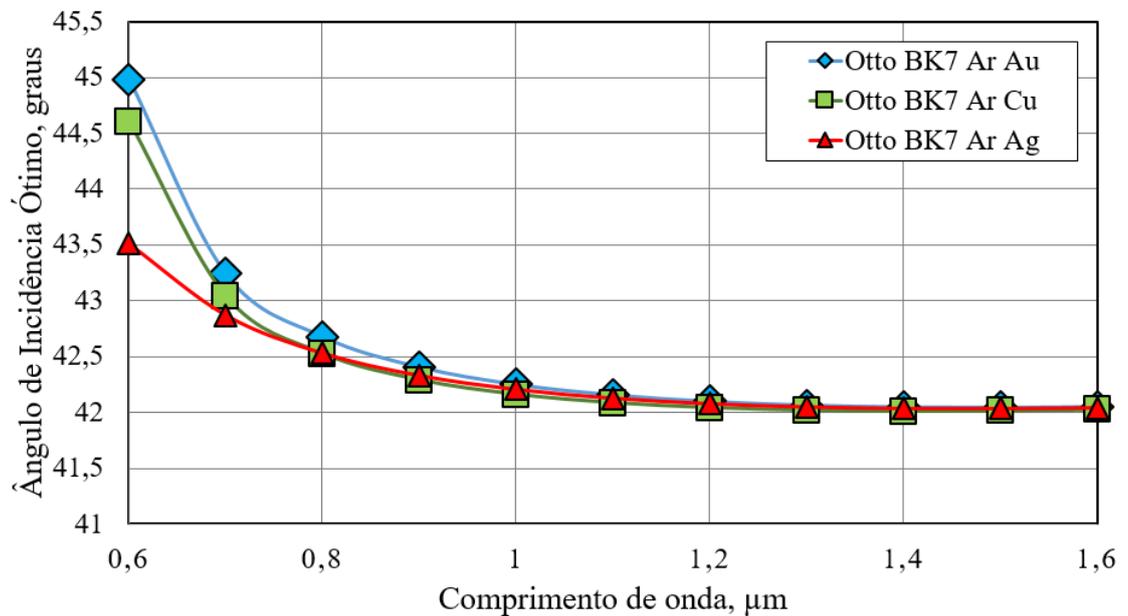


Figura 4.16 – Dependência espectral do ângulo de incidência ótimo para configuração de Otto.

4.3 Otimização de Sensores RPS para Detecção de Hidrogênio com Filmes de Paládio e Ouro/Paládio

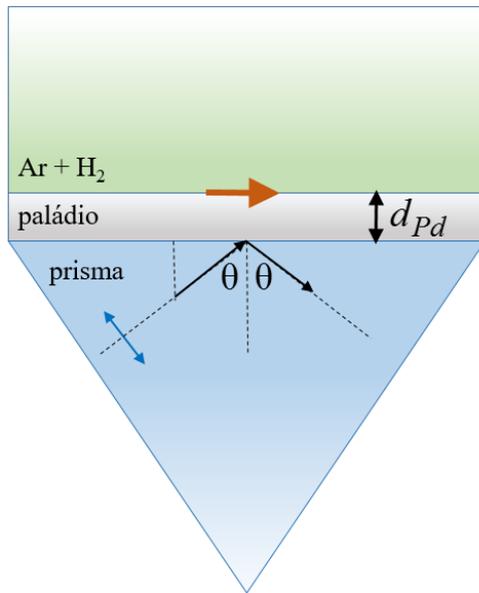
O hidrogênio é o gás mais leve conhecido e sua queima ao ar ou numa atmosfera de oxigênio forma água e liberando uma grande quantidade de calor [47]. Concentrações acima de 4% com pressão atmosférica já tornam o ambiente perigoso para propagação de chamas [48]. Sua detecção é essencial em várias aplicações como, por exemplo, foguetes, transporte de gases e na monitoração do óleo isolante de equipamentos de alta tensão — o hidrogênio é um dos gases liberados durante as descargas parciais no óleo isolador [49]. Técnicas ópticas convencionais de detecção de gases não se aplicam ao hidrogênio visto que esse gás apresenta linhas de absorção no ultravioleta [50], onde é difícil a obtenção de fontes de luz coerentes. Uma solução alternativa para medição da concentração desse gás pode ser realizada medindo-se variações nas propriedades ópticas em metais devido à absorção de hidrogênio — especialmente para o paládio (Pd), solvente específico do hidrogênio [51]. Nesta seção é avaliado o projeto de sensores RPS otimizados com filmes finos de paládio e ouro-paládio para detecção de hidrogênio.

A referência [51] traz uma análise sistemática da otimização desses sensores na configuração de Kretschmann levantando um estudo relacional dos parâmetros do sensor que maximizam a sensibilidade diferencial definida por

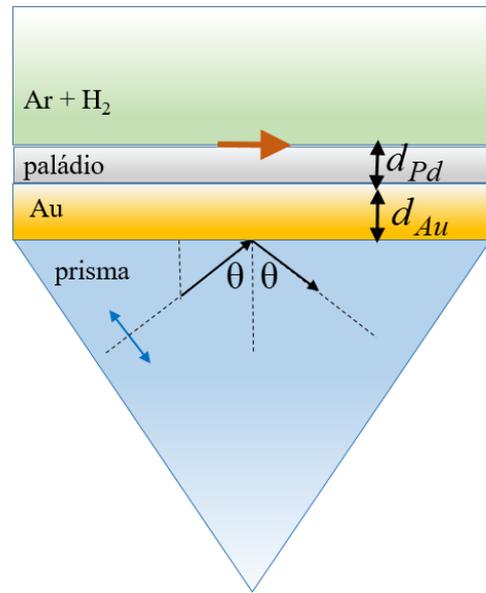
$$S = R(100\%) - R(0\%) = R(4\%) - R(0\%), \quad (4.15)$$

onde $R(100\%) = R(4\%)$ [51] uma vez que a absorção de hidrogênio pelo Pd exibe uma forte não-linearidade devido à saturação da quantidade de hidrogênio que consegue difundir para dentro da estrutura cristalina do Pd.

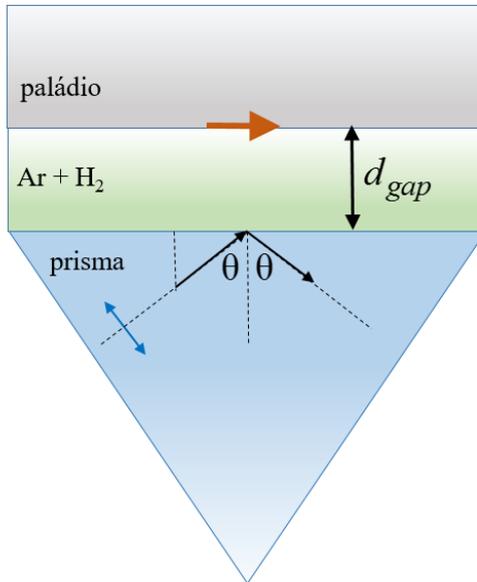
Deseja-se otimizar sensores com filmes de Pd e Au/Pd para detecção de hidrogênio em ambas configurações de Kretschmann e de Otto aplicando o algoritmo PSO. As diferentes configurações para o sensor estão mostradas na Figura 4.17 onde em cada configuração estão dispostas as variáveis de decisão. Nas configurações onde há apenas filme de Pd, considera-se um problema de otimização com 2 variáveis de decisão — espessura do filme de Pd ou do *gap* e ângulo de incidência. Já nas configurações de filmes de Au/Pd, são consideradas 3 variáveis de decisão — espessura do filme de Au ou do *gap*, espessura do filme de Pd e ângulo de incidência.



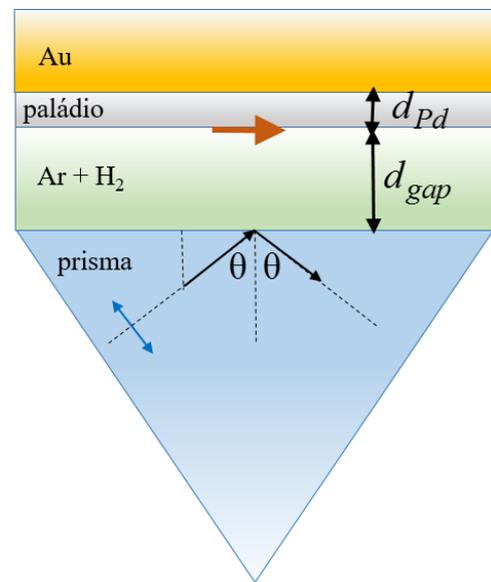
Kretschmann – Filme de Pd
(a)



Kretschmann – Filmes de Au/Pd
(b)



Otto – Filme de Pd
(c)



Otto – Filmes de Au/Pd
(d)

Figura 4.17 – Diferentes configurações de sensores RPS para detecção de hidrogênio.

Primeiramente, dispôs-se das constantes ópticas do paládio puro e hidrogenado obtidas da referência [52] para criar um modelo linear entre o índice de refração complexo do Pd $n - j\kappa$ e a concentração de hidrogênio C ,

$$n(C, \lambda) = \frac{n_{4\%}(\lambda) - n_{0\%}(\lambda)}{4} C + n_{0\%}(\lambda), \quad (4.16)$$

$$\kappa(C, \lambda) = \frac{\kappa_{4\%}(\lambda) - \kappa_{0\%}(\lambda)}{4} C + \kappa_{0\%}(\lambda), \quad (4.17)$$

onde $n_{4\%}$ é o índice de refração do Pd exposto a uma atmosfera de 4% de hidrogênio e $n_{0\%}$ do Pd puro obtidas por interpolação por *spline* cúbica. O mesmo vale para o coeficiente de extinção κ . A sensibilidade do sensor foi definida como

$$S = \left| \frac{dR}{dC} \right| \approx \left| \frac{R(C + \Delta C) - R(C)}{\Delta C} \right|, \quad (4.18)$$

onde $C = 0\%$ e $\Delta C = 10^{-7}\%$.

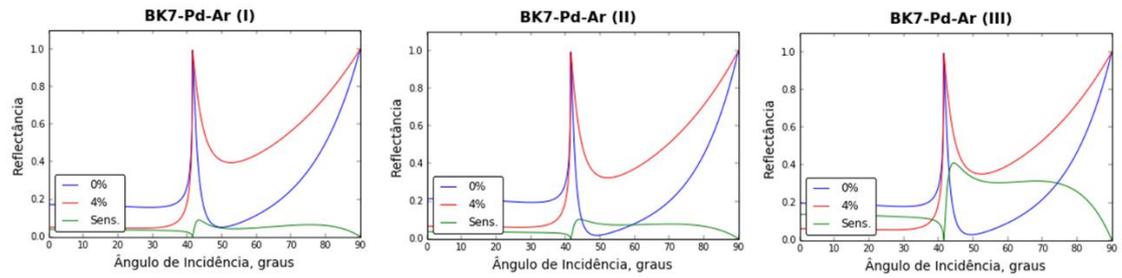
Utilizando um algoritmo similar ao do aplicativo SWSO, que leva em conta as formulações expressas em (4.16) a (4.18), pode-se otimizar os sensores da Figura 4.17. Utilizou-se 100 partículas e 300 iterações no algoritmo PSO e um comprimento de onda de 975,1 nm (comprimento de onda do laser utilizado no laboratório do grupo de pesquisa de Fotônica). Também foram investigados resultados da otimização modificando o denominador de (4.18) para $\Delta C = 4\%$ e considerando uma outra definição da função objetivo dada por (4.15).

Repetiu-se a aplicação do algoritmo PSO 10 vezes para cada caso a fim de ter uma maior probabilidade de encontrar a sensibilidade máxima. A Tabela 4.2 apresenta os parâmetros ótimos para cada configuração da Figura 4.17. As Figuras 4.18 a 4.21 mostram as curvas de ressonância e da sensibilidade para cada caso. Em certos casos o algoritmo PSO apresentou mais de uma solução possível, em outros não apresentou boa convergência. Diminui-se a região de busca em relação ao ângulo de incidência à medida que se rodava os algoritmos, pois conseguia-se ver onde ocorria a ressonância e, portanto, estimava-se um intervalo angular menor na tentativa subsequente. Os resultados na configuração de Kretschmann não apresentam uma curva de ressonância comum, diferentemente da configuração de Otto cuja ressonância está melhor definida. A otimização de sensores de hidrogênio com filmes de paládio ou ouro-paládio ainda não foi implementada no aplicativo SWSO.

Os resultados mostrados na Tabela 4.2 são superiores aos da Ref. [51]. A sensibilidade máxima $S = R(4\%) - R(0\%)$ encontrada no método de busca por varredura em [51] foi de aproximadamente 0,25. Nesta dissertação obteve-se sensibilidades máximas de aproximadamente 0,4.

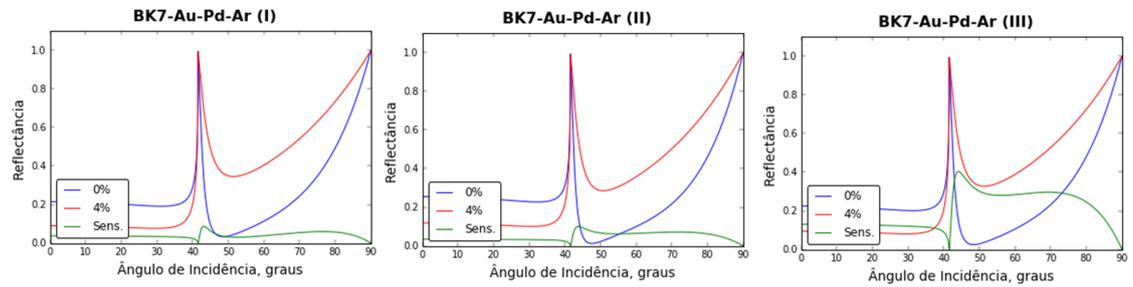
Tabela 4.2 – Parâmetros ótimos dos sensores da Figura 4.17 para $\lambda = 975,1$ nm.

Kretschmann, BK7-Pd-Ar, Figura 4.17(a)					
Sensibilidade	θ , graus	d_{Pd} , μm	d_{gap} , μm	d_{Au} , μm	S
$\Delta C = 10^{-7}\%$ (I)	43,47065	0,005447	–	–	0,0885
	25875	1892786			142676
$\Delta C = 4\%$ (II)	44,24282	0,006369	–	–	0,1026
	32996	0929949			75891
$S = R(4\%) - R(0\%)$ (III)	44,50516	0,006001	–	–	0,4103
	50549	5311517			158229
Kretschmann, BK7-Au-Pd-Ar, Figura 4.17(b)					
Sensibilidade	θ , graus	d_{Pd} , μm	d_{gap} , μm	d_{Au} , μm	S
$\Delta C = 10^{-7}\%$ (I)	43,11304	0,005567	–	0,0010249	0,0872
	61625	2493454		5899946	053302
$\Delta C = 4\%$ (II)	43,77698	0,006194	–	0,0014004	0,1004
	6986	9878554		0493386	931077
$S = R(4\%) - R(0\%)$ (III)	44,39661	0,005812	–	0,0010121	0,4020
	56787	6055813		9198149	638939
Otto, BK7-Ar-Pd, Figura 4.17(c)					
Sensibilidade	θ , graus	d_{Pd} , μm	d_{gap} , μm	d_{Au} , μm	S
$\Delta C = 10^{-7}\%$ (I) 1	41,98152	–	0,94005187	–	0,0816
	83547		2897		993706
$\Delta C = 10^{-7}\%$ (I) 2	41,49368	–	1,57676978		0,0817
	85119		699		026763
$\Delta C = 4\%$ (II)	42,46007	–	0,75101840	–	0,0950
	23649		3807		282157
$S = R(4\%) - R(0\%)$ (III) 1	42,46007	–	0,75101840	–	0,3801
	23695		7902		128627
$S = R(4\%) - R(0\%)$ (III) 2	41,51059	–	1,37090473	–	0,3801
	19188		527		513890
Otto, BK7-Ar-Pd-Au, Figura 4.17(d)					
Sensibilidade	θ , graus	d_{Pd} , μm	d_{gap} , μm	d_{Au} , μm	S
$\Delta C = 10^{-7}\%$ (I)	42,08902	0,020720	0,99613640	–	0,0860
	28068	4153093	8847		937999
$\Delta C = 4\%$ (II) 1	42,46077	0,025523	0,87300150	–	0,0996
	78542	9810238	8608		777185
$\Delta C = 4\%$ (II) 2	41,51633	0,035012	1,39465532	–	0,0989
	8975	4724195	012		390549
$S = R(4\%) - R(0\%)$ (III) 1	42,46046	0,024663	0,89236436	–	0,3983
	93765	2354247	712		255432
$S = R(4\%) - R(0\%)$ (III) 2	41,48406	0,036994	1,34146880	–	0,3976
	94579	8795833	533		210445



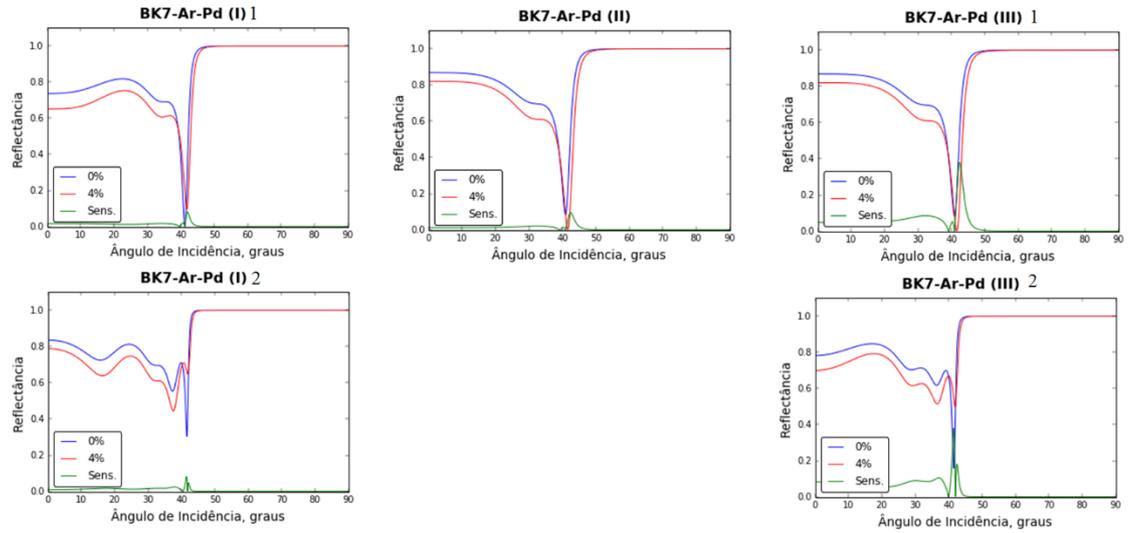
Kretschmann, BK7-Pd-Ar, Figura 4.17(a)					
Sensibilidade	θ , graus	d_{Pd} , μm	d_{gap} , μm	d_{Au} , μm	S
$\Delta C = 10^{-7}\%$ (I)	43,47065	0,005447	–	–	0,0885
	25875	1892786	–	–	142676
$\Delta C = 4\%$ (II)	44,24282	0,006369	–	–	0,1026
	32996	0929949	–	–	75891
$S = R(4\%) - R(0\%)$ (III)	44,50516	0,006001	–	–	0,4103
	50549	5311517	–	–	158229

Figura 4.18 – Resultados da otimização para BK7-Pd-Ar.



Kretschmann, BK7-Au-Pd-Ar, Figura 4.17(b)					
Sensibilidade	θ , graus	d_{Pd} , μm	d_{gap} , μm	d_{Au} , μm	S
$\Delta C = 10^{-7}\%$ (I)	43,11304	0,005567	–	0,0010249	0,0872
	61625	2493454	–	5899946	053302
$\Delta C = 4\%$ (II)	43,77698	0,006194	–	0,0014004	0,1004
	6986	9878554	–	0493386	931077
$S = R(4\%) - R(0\%)$ (III)	44,39661	0,005812	–	0,0010121	0,4020
	56787	6055813	–	9198149	638939

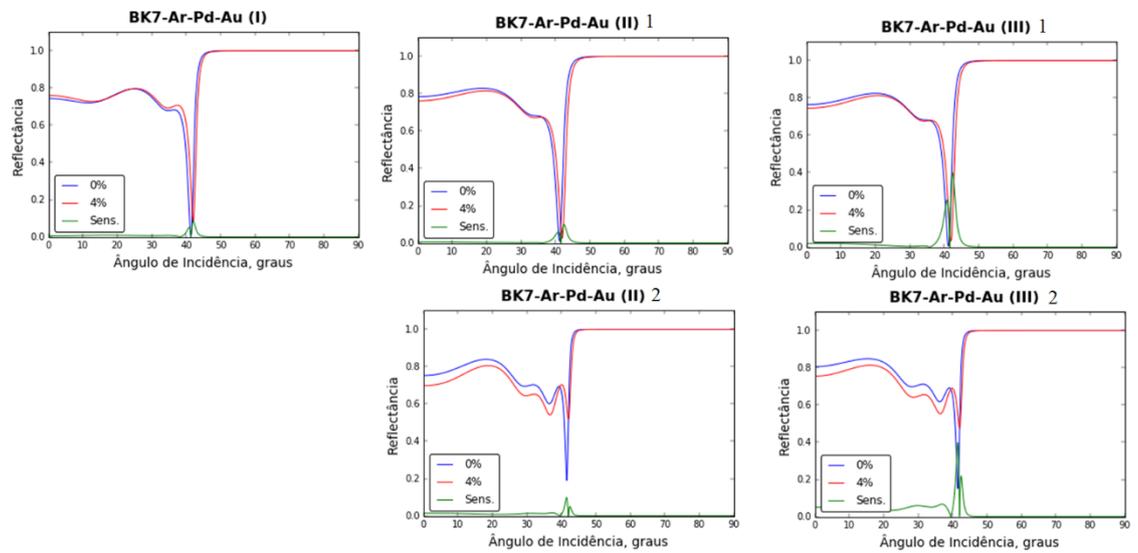
Figura 4.19 – Resultados da otimização para BK7-Au-Pd-Ar.



Otto, BK7-Ar-Pd, Figura 4.17(c)

Sensibilidade	θ , graus	d_{Pd} , μm	d_{gap} , μm	d_{Au} , μm	S
$\Delta C = 10^{-7}\%$ (I) 1	41,98152	—	0,94005187	—	0,0816
	83547	—	2897	—	993706
$\Delta C = 10^{-7}\%$ (I) 2	41,49368	—	1,57676978	—	0,0817
	85119	—	699	—	026763
$\Delta C = 4\%$ (II)	42,46007	—	0,75101840	—	0,0950
	23649	—	3807	—	282157
$S = R(4\%) - R(0\%)$ (III) 1	42,46007	—	0,75101840	—	0,3801
	23695	—	7902	—	128627
$S = R(4\%) - R(0\%)$ (III) 2	41,51059	—	1,37090473	—	0,3801
	19188	—	527	—	513890

Figura 4.20 – Resultados da otimização para BK7-Ar-Pd.



Otto, BK7-Ar-Pd-Au, Figura 4.17(d)

Sensibilidade	θ , graus	d_{Pd} , μm	d_{gap} , μm	d_{Au} , μm	S
$\Delta C = 10^{-7}\%$ (I)	42,08902	0,020720	0,99613640	—	0,0860
	28068	4153093	8847	—	937999
$\Delta C = 4\%$ (II) 1	42,46077	0,025523	0,87300150	—	0,0996
	78542	9810238	8608	—	777185
$\Delta C = 4\%$ (II) 2	41,51633	0,035012	1,39465532	—	0,0989
	8975	4724195	012	—	390549
$S = R(4\%) - R(0\%)$ (III) 1	42,46046	0,024663	0,89236436	—	0,3983
	93765	2354247	712	—	255432
$S = R(4\%) - R(0\%)$ (III) 2	41,48406	0,036994	1,34146880	—	0,3976
	94579	8795833	533	—	210445

Figura 4.21 – Resultados da otimização para BK7-Ar-Pd-Au.

4.4 Outra Aplicação: Projeto de Sensores de Ondas de Superfície de Bloch

O aplicativo SWSO encontra aplicações no projeto de diversos sistemas ópticos. Além do projeto de sensores RPS de interfaces planares otimizados, ele pode ser utilizado no projeto de dispositivos ópticos multicamadas como, por exemplo, filtros ópticos, camadas anti-refletores, separadores de feixe e espelhos dicróicos [53].

Uma aplicação particular encontrada na literatura descrita como uma solução alternativa aos sensores RPS são os sensores ópticos baseados em Ondas de Superfície de Bloch (OSB) [54,55]. Sensores OSB operam similarmente aos sensores RPS, entretanto, fazem uso de estruturas multicamadas periódicas compostas de materiais dielétricos (cristais fotônicos de uma dimensão) no lugar do filme metálico onde a luz apresenta uma relação de dispersão formada por bandas e *gaps* [56,57]. Uma vez acopladas por efeitos de interferência, as OSB propagam-se na interface entre o topo da estrutura multicamadas e o meio sensoriado, apresentando menores perdas comparadas aos PS e, conseqüentemente, uma ressonância altamente estreita aumentando a sensibilidade do sensor [58]. Ademais, sensores OSB podem ser projetados para operarem em qualquer comprimento de onda para diferentes tipos de polarização [59] e, dependendo dos dielétricos utilizados, podem apresentar insensibilidade a variações de temperatura [60] e melhores propriedades mecânicas e químicas, permitindo seu uso em diversos ambientes [61]. O projeto de sensores OSB otimizados é um problema bastante complexo devido à grande quantidade de parâmetros e configurações possíveis [62,63]. Uma possível metodologia de otimização de sensores OSB utilizando algoritmos heurísticos com apenas duas variáveis de decisão é investigada.

Demonstra-se agora a aplicação do aplicativo SWSO sobre o sensor OSB descrito em [58] que é utilizado para medição de concentração de diferentes soluções de glicose. A Figura 4.22 apresenta o sistema sensor utilizado.

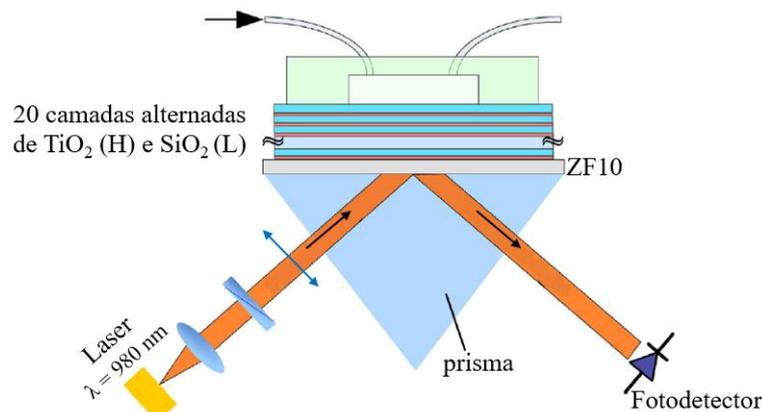


Figura 4.22 – Sensor OSB proposto em [58].

O sensor é baseado na configuração de Kretschmann onde uma estrutura multicamadas de materiais dielétricos substitui o filme metálico de um sensor RPS. O feixe de luz tem comprimento de onda de 980 nm e possui polarização paralela ao plano de incidência. A estrutura multicamadas é composta de 20 camadas alternadas de TiO_2 ($n = 2,30$) e SiO_2 ($n = 1,434$) com espessuras de 163 nm e 391 nm, respectivamente, onde a última camada de SiO_2 adjacente ao meio sensoriado — nesse caso água ($n = 1,33$) — possui uma espessura de 500 nm. Os valores das espessuras são determinados pela formulação descrita em [56]. Esses valores concebem uma configuração capaz de excitar ondas OSB. Não se adentrou muito em aspectos teóricos a respeito da excitação de OSB pela limitação de tempo da pesquisa, entretanto, esses valores são determinados pelas equações de um refletor de Bragg de quarto de onda, garantindo modos de propagação localizados nas bandas proibidas da relação de dispersão de um cristal fotônico [56,57,61] ao variar-se a espessura da última camada. Há diversas configurações possíveis para excitar OSB, não se restringindo apenas a esta citada em [58]. A estrutura multicamadas é evaporada sobre um substrato de vidro ZF10 ($n = 1,668$). O resultado de uma simulação para a varredura angular da reflectância é apresentada no artigo e reproduzida aqui na Figura 4.23.

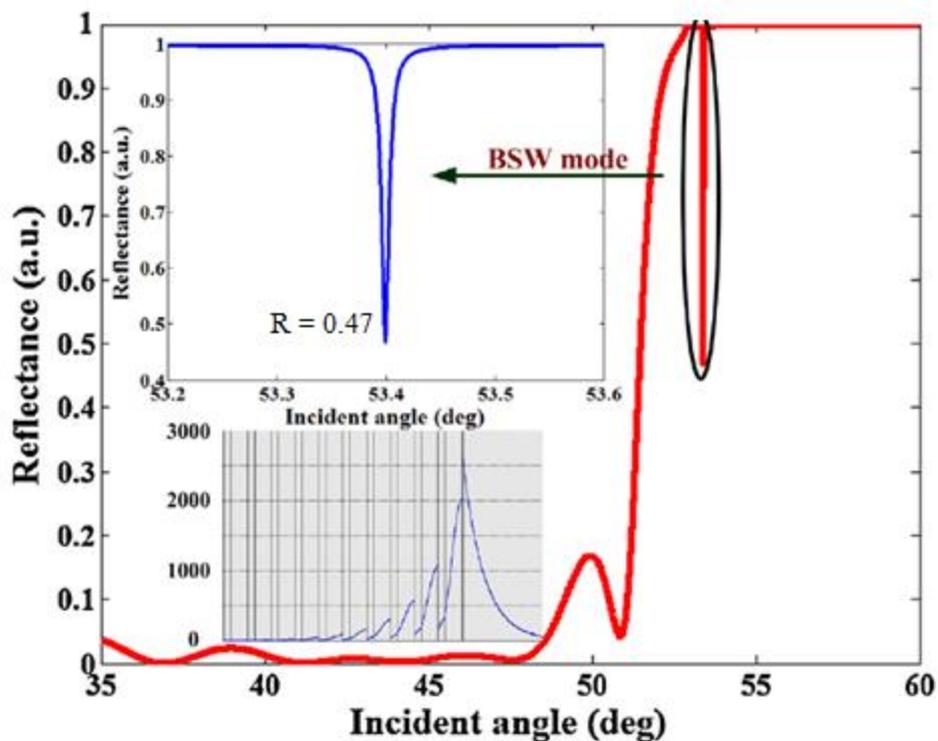


Figura 4.23 – Dependência angular da reflectância simulada para a estrutura multicamadas projetada com o meio externo sendo água para polarização-p. *Inset*: distribuição do campo para o modo OSB (BSW) [58].

Reproduziu-se o resultado mostrado na Figura 4.23 no aplicativo SWSO obtendo praticamente o mesmo resultado como mostrado na Figura 4.24. Para facilitar a inserção dos parâmetros do sensor OSB, elaborou-se uma rotina em JavaScript denominada de Preenchimento automático para estruturas periódicas em bicamadas.

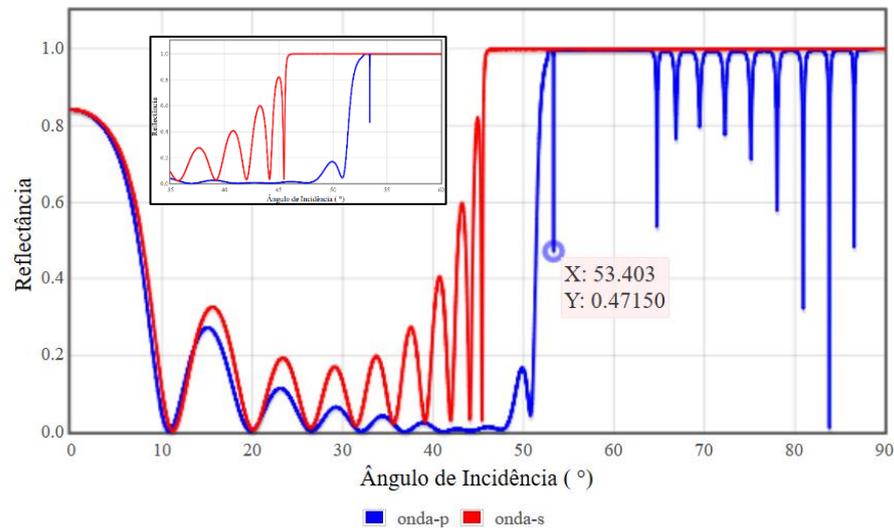


Figura 4.24 – Resultado da dependência angular simulada no aplicativo SWSO.

Inset: Zoom na região angular entre 35° e 60°.

Observa-se na dependência angular da reflectância que existem outros vales além do correspondente a OSB. Esses outros vales correspondem a modos guiados dentro da estrutura multicamadas e não devem ser confundidos com OSB. O aplicativo SWSO pode ser útil em identificar qual desses vales corresponde a OSB, visto que sensores OSB apresentam altíssima sensibilidade em relação a variações do índice de refração do meio sensoriado. A Figura 4.25 apresenta o gráfico da varredura angular da sensibilidade da qual se verifica um elevado valor da sensibilidade na faixa angular onde ocorre a excitação de OSB.

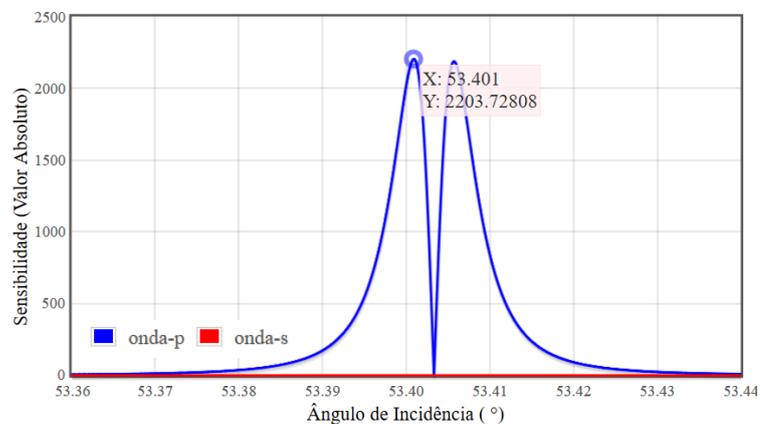


Figura 4.25 – Dependência angular da sensibilidade obtida por SWSO, a partir da qual se identifica o vale corresponde a excitação de ondas OSB.

De fato, a sensibilidade desse sensor OSB é extremamente alta ($S = dR/dn = 2203,73$), o que corresponde a uma largura de ressonância bastante estreita com largura à meia altura de aproximadamente $0,008^\circ$.

Implementou-se no aplicativo SWSO uma rotina para otimização de sensores OSB a qual foi aplicada ao sensor projetado em [58] para investigar se existe uma configuração com sensibilidade maior. Para tanto, considerou-se duas variáveis de decisão: ângulo de incidência e espessura da última camada adjacente ao meio sensoriado (aquela com 500 nm de espessura inicialmente). Aplicou-se o algoritmo PSO em duas tentativas com 100 partículas e 300 iterações cujos resultados estão mostrados na Tabela 4.3. Os resultados são drasticamente diferentes entre si revelando a dificuldade de convergência da otimização, entretanto, são valores bastante superiores ao do sensor originalmente proposto na Ref. [58] e ao dos sensores RPS otimizados neste trabalho. As Figuras 4.26 e 4.27 mostram as curvas de ressonâncias dos resultados das duas tentativas de otimização.

Tabela 4.3 – Otimização do sensor OSB proposto em [58].

Kretschmann, BK7-Au-Ar				
Tentativas	θ , graus	d , nm	S	Execução
1 ^a	52,8789356625	344,500776785	3.491.781,5164	9,16 s
2 ^a	55,2935275362	847, 87827392	10.428,2581095	8,64 s

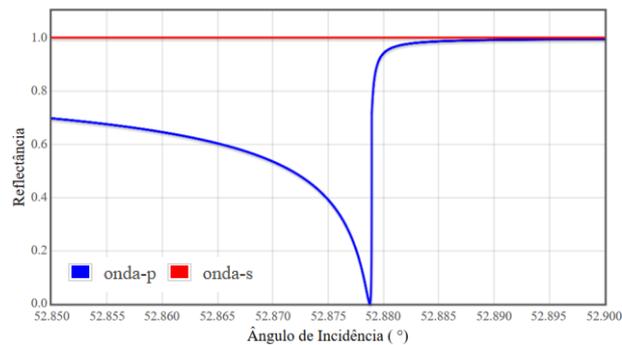


Figura 4.26 – Curva de ressonância de um sensor OSB otimizado: 1^a tentativa.

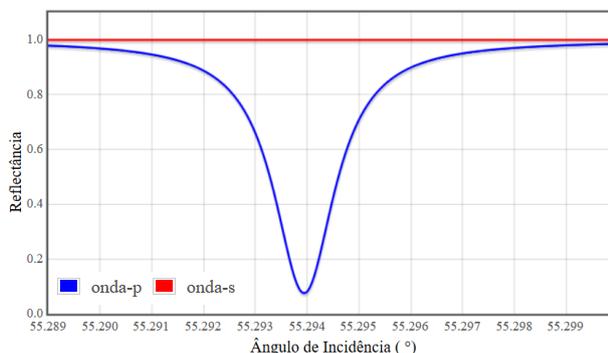


Figura 4.27 – Curva de ressonância de um sensor OSB otimizado: 2^a tentativa.

5 Conclusões

Nesta dissertação otimizou-se a sensibilidade de sensores RPS pelo uso de dois algoritmos heurísticos, de Monte Carlo e do Enxame de Partículas, com a vantagem de não se utilizar a aproximação lorentziana. Além disso, os algoritmos heurísticos simplificam bastante o projeto de sensores RPS otimizados permitindo adotar um procedimento robusto que pode ser aplicado tanto na configuração de Kretschmann quanto na de Otto, podendo também serem usados em outras configurações de acoplamento. Quando comparado com o algoritmo de busca direta descrito em [10] e com o algoritmo de Monte Carlo, o algoritmo PSO demonstrou melhor eficiência computacional, facilitando a elaboração das curvas de dependência espectral dos parâmetros ótimos do sensor RPS, sendo utilizado ao decorrer de toda dissertação.

Baseado nos resultados encontrados, pode-se projetar um sensor RPS de alta sensibilidade operando na mesma faixa de comprimentos de onda dos sistemas de comunicações ópticas ($\sim 1,55 \mu\text{m}$). Constatou-se que sua sensibilidade ótima em $1,6 \mu\text{m}$ é aproximadamente 2 vezes maior que aquela em $1 \mu\text{m}$ para todas configurações apresentadas. Sensores RPS para detecção de hidrogênio com filmes de paládio e ouro-paládio foram otimizados, apresentando uma ressonância bem definida na configuração de Otto.

Na otimização de sensores com filmes de Pd e Au/Pd, houve situações em que o algoritmo PSO não apresentou boa convergência sendo necessário diminuir a região de busca e rodar sua rotina diversas vezes a fim de aumentar a probabilidade de encontrar a sensibilidade máxima. Em outros casos, o PSO apresentou mais de uma solução possível com sensibilidades bem próximas.

Foi desenvolvido um aplicativo *web* SWSO em Python, com a finalidade de auxiliar no projeto de sensores RPS otimizados, e disponibilizado para toda comunidade científica [33] e seu uso independe do sistema operacional da máquina do usuário. A otimização de sensores RPS com filmes de paládio ou ouro-paládio para detecção de hidrogênio ainda não foi totalmente implementada. Ademais, o SWSO encontra aplicações no projeto de diversos dispositivos ópticos tais como como filtros ópticos, camadas anti-refletoras, separadores de feixe, espelhos dicróicos e sensores OSB. Particularmente, relatou-se um breve estudo de caso do uso do SWSO no desenvolvimento de sensores OSB constatando que eles possuem sensibilidade bastante superior aos sensores RPS.

Por fim, seguem propostas para trabalhos futuros:

- O objetivo deste trabalho focou-se na otimização da sensibilidade, entretanto, deve-se considerar outras figuras de mérito que qualificam e quantificam o desempenho de sensores RPS como, por exemplo, a faixa dinâmica, linearidade e a relação sinal ruído.
- Os métodos heurísticos de otimização podem ser aplicados na otimização de sensores RPS por acoplamento via grade de difração, não se restringindo apenas a esquemas de acoplamento por prisma. Há também a possibilidade de incluir esses algoritmos heurísticos em métodos de estimação de parâmetros de sensores RPS via regressão não-linear.
- Uma outra estratégia não explorada neste trabalho consiste na utilização de adaptações do PSO que permitem uma exploração mais refinada ao longo da execução do algoritmo, reduzindo gradativamente o fator de inércia.
- Para aumentar a eficiência dos métodos de Monte Carlo e PSO, procura-se diminuir a região de busca para sortear pontos os mais próximos do ponto ótimo global. Nesta dissertação foi obtido um intervalo de busca reduzido relativo ao ângulo de incidência. Criar estratégias que definam um intervalo de busca reduzido relativo também à espessura do filme/*gap* auxiliaria na obtenção de resultados de forma mais rápida e consistente.
- Um estudo mais detalhado sobre pontos de descontinuidade em certas curvas de ressonância pode ser feito a fim de que possa excluir essas possibilidades no sorteio dos algoritmos heurísticos. Essas descontinuidades geram picos na função objetivo que podem ser considerados como ponto ótimo global.
- Deseja-se aprimorar a interface e a aplicabilidade do SWSO abrangendo o projeto de outros dispositivos ópticos. Também deseja-se integrar sua funcionalidade com a base de dados do *Refractive index database* [42].
- Fundamental é verificar experimentalmente os resultados obtidos neste trabalho.

Publicações

CAVALCANTI, L. M.; FONTANA, E. Métodos Monte Carlo e do Enxame de Partículas Aplicados à Otimização de Sensores Baseados em Ressonância de Plasmons de Superfície. In: MOMAG 2016, 2016. Porto Alegre. Anais do MOMAG 2016. v. 1. pp. 1-5.

CAVALCANTI, L. M.; FONTANA, E. Monte Carlo and Particle Swarm Methods Applied to the Design of Surface Plasmon Resonance Sensors. In: IEEE Sensors 2016, 2016. Orlando. Aceito.

Referências

- [1] CHEN, W. P.; M, C. J. Use of surface plasma waves for determination of the thickness and optical constants of thin metallic films. **J. Opt. Soc. Am.**, v. 71, n. 2, p. 189-191, Fevereiro 1981.
- [2] CAVALCANTI, G. O.; FONTANA, E.; OLIVEIRA, S. C. Hydrogen detection using surface plasmon resonance in palladium films. **International Microwave and Optoelectronics Conference (IMOC) SBMO/IEEE MTT-S**, Belém, p. 312-315, Novembro 2009.
- [3] HOMOLA, J.; YEE, S. S.; GAUGLITZ, G. Surface plasmon resonance sensors: review. **Sensors and Actuators B**, v. 54, p. 3-15, Janeiro 1999.
- [4] MAIER, S. A. **Plasmonics: Fundamentals and Applications**. New York: Springer, 2007. 21-47 p.
- [5] KITTEL, C. **Introduction to Solid State Physics**. 8^a. ed. Hoboken: John Wiley & Sons, 2005. 395-426 p.
- [6] KRETSCHMANN, E. Die Bestimmung optischer Konstanten von Metallen durch Anregung von Oberflächenplasmaschwingungen (The determination of the optical constants of metals by excitation of surface plasmons). **Zeitschrift für Physik**, v. 241, n. 4, p. 313-324, Agosto 1971.
- [7] OTTO, A. Excitation of nonradiative surface plasma waves in silver by the method of frustrated total reflection. **Zeitschrift für Physik**, v. 216, n. 4, p. 398-410, Agosto 1968.
- [8] ZAIDI, S. H.; YOUSAF, M.; BRUECK, S. R. J. Grating coupling to surface plasma waves. I. First-order coupling. **Journal of the Optical Society of America B**, v. 8, n. 4, p. 770-779, Abril 1991.
- [9] FONTANA, E. et al. Microfabricated Otto chip device for surface plasmon resonance-based optical sensing. **Applied Optics**, v. 54, n. 31, p. 9200-9204, Novembro 2015.
- [10] FONTANA, E. Thickness optimization of metal films for the development of surface-plasmon-based sensors for nonabsorbing media. **Applied Optics**, v. 45, n. 29, p. 7632-7642, Outubro 2006.
- [11] LI, C. T.; YEN, T. J.; CHEN, H. F. A generalized model of maximizing the sensitivity in intensity-interrogation surface plasmon resonance biosensors. **Optics Express**, v.17, n. 23, p. 20771-20776, Novembro 2009.

- [12] BORN, M.; WOLF, E. **Principles of Optics: Electromagnetic theory of Propagation, Interference and Diffraction of Light**. 7^a. ed. Cambridge: Cambridge University Press, 2002.
- [13] SCHWAAB, M.; PINTO, J. C. **Análise de Dados Experimentais I: Fundamentos de Estatística e Estimação de Parâmetros**. Rio de Janeiro: E-papers, 2007. 338-358 p.
- [14] RUBINSTEIN, R. Y.; KROESE, D. P. **Simulation and the Monte Carlo Method**. 2^a. ed. Hoboken: Wiley, 2008. 201-233 p.
- [15] EBERHART, R. C.; SHI, Y. Particle swarm optimization: developments, applications and resources. **Proceedings of the 2001 Congress on Evolutionary Computation**, Seul, v.1, p. 81-86, Maio 2001.
- [16] FURHT, B.; ESCALANTE, A. **Handbook of Cloud Computing**. New York: Springer, 2010. 3-8 p.
- [17] TENDÊNCIAS da Ciência da Computação: Cloud Computing. **Guia da Carreira**. Disponível em: <<http://www.guiadacarreira.com.br/carreira/ciencia-computacao-cloud-computing/>>. Acesso em: 17 Julho 2016.
- [18] FONTANA, E. **Fundamentos de Óptica e Propagação de Luz**. Recife. 2014. Notas de Aula, PPGEE-UFPE.
- [19] ASHCROFT, N. W.; MERMIN, N. D. **Solid State Physics**. Orlando: Harcourt, 1976. 1-20 p.
- [20] ORFANIDIS, S. J. **Electromagnetic Waves and Antennas**. Piscataway: [s.n.], 2014. 270-275, 309-322 p. Disponível em: <<http://www.ece.rutgers.edu/~orfanidi/ewa/>>. Acesso em: 18 Julho 2016.
- [21] RAETHER, H. **Surface Plasmons on Smooth and Rough Surfaces and on Gratings**. Heidelberg: Springer, 1988. 4-39 p.
- [22] SURFACE Plasmons Basics. **OPTREL**, 2005. Disponível em: <http://www.optrel.de/products_multiskop_plasmons_basics.html>. Acesso em: 19 Julho 2016.
- [23] FONTANA, E. Theoretical and experimental study of the surface plasmon resonance effect on a recordable compact disk. **Applied Optics**, v. 43, n. 1, p. 79-87, Janeiro 2004.
- [24] PILIARIK, M.; J, H. Surface plasmon resonance (SPR) sensors: approaching their limits? **Optics Express**, v. 17, n. 19, p. 16505-16517, Setembro 2009.
- [25] RENADIN, A. et al. Integrated active mixing and biosensing using surface acoustic waves (SAW) and surface plasmon resonance (SPR) on a common substrate. **Lab on a Chip**, v. 10, n. 1, p. 111-115, 2010.

- [26] LUO, R. Guide to SPR Data Analysis on the ProteOn™ XPR36 System. **Bioradiations**, 9 Julho 2013. Disponível em: <<http://www.bioradiations.com/guide-to-spr-data-analysis-on-the-proteon-xpr36-system/>>. Acesso em: 21 Julho 2016.
- [27] POSSETTI, G. R. C. et al. Metrological Evaluation of Optical Fiber Grating-Based Sensors: An Approach Towards the Standardization. **Journal of Lightwave Technology**, v. 30, n. 8, p. 1042-1052, Abril 2012.
- [28] DÖRBAND, B.; GROSS, H.; MÜLLER, H. **Handbook of Optical Systems, Metrology of Optical Components and Systems**. Weinheim: John Wiley & Sons, v. 5, 2012. p. 140 p.
- [29] CAVALCANTI, L. M.; FONTANA, E. Monte Carlo and Particle Swarm Methods Applied to the Design of Surface Plasmon Resonance Sensors. **IEEE Sensors 2016**, Aceito.
- [30] YEATMAN, E. M. Resolution and sensitivity in surface plasmon microscopy and sensing. **Biosensors & Bioelectronics**, v. 11, n. 6/7, p. 635-649 , 1996.
- [31] LI, C. T.; YEN, T. J.; CHEN, H. F. A generalized model of maximizing the sensitivity in intensity-interrogation surface plasmon resonance biosensors, v.17,n. 23, p. 20771-20776, Outubro 2009.
- [32] KESSENTINI, S. et al. Particle swarm optimization and evolutionary methods for plasmonic biomedical applications. **2011 IEEE Congress of Evolutionary Computation (CEC)**, New Orleans, p. 2315-2320, Junho 2011.
- [33] CAVALCANTI, L. M.; FONTANA, E. SWSO - Surface Wave Sensor Optimizer, 2016. Disponível em: <<https://www.ufpe.br/fontana/swso/index.html>>. Acesso em: 01 Agosto 2016.
- [34] KUROSE, J. F.; ROSS, K. W. **Computer Networking: A top-down approach**. 6ª (edição internacional). ed. Harlow: Pearson, 2013. 109-209 p.
- [35] LINODE: Cloud Hosting for You, 2016. Disponível em: <<https://www.linode.com/>>. Acesso em: 2 Agosto 2016.
- [36] HALES, W. **HTML5 and JavaScript Web Apps**. Sebastopol: O'Reilly, 2013.
- [37] MORRISON, M. **Use a Cabeça! JavaScript**. Rio de Janeiro: Alta Books, 2008. 537-597 p.
- [38] COMMON Gateway Interface support. **Documentation » The Python Standard Library**. Disponível em: <<https://docs.python.org/2/library/cgi.html>>. Acesso em: 1 Agosto 2016.
- [39] MCKINNEY, W. **Python for Data Analysis**. Sebastopol: O'Reilly, 2013.

- [40] FLOT. Disponível em: <<http://www.flotcharts.org/>>. Acesso em: 1 Agosto 2016.
- [41] BENEDETTI, R.; CRANLEY, R. **Use a Cabeça! jQuery**. Rio de Janeiro: Alta Books, 2013.
- [42] POLYANSKIY, M. Refractive Index Database, 2008. Disponível em: <<http://refractiveindex.info/>>. Acesso em: 1 Agosto 2016.
- [43] CHAPRA, S. C. **Métodos Numéricos Aplicados com Matlab para engenheiros e cientistas**. 3ª. ed. Porto Alegre: AMGH, 2013. 428-454 p.
- [44] BASS, M. **Handbook of Optics**. 2ª. ed. [S.l.]: McGraw-Hill, v. 2, 1995. 33.3-33.101 p.
- [45] RAKIC, A. D. et al. Optical properties of metallic films for vertical-cavity optoelectronics devices. **Applied Optics**, v. 37, p. 5271-5283, 1998.
- [46] HALE, G. M.; QUERRY, M. R. Optical constants of water in the 200-nm to 200-um wavelength region. **Applied Optics**, v. 12, p. 555-563, 1973.
- [47] LEE, J. D. **Química Inorgânica não tão concisa**. 5ª. ed. São Paulo: Blucher, 1999. 122-129 p.
- [48] ALEIXANDRE, M. et al. Development of fiber optic hydrogen sensors for testing nuclear waste repositories. **Sensors and Actuators B: Chemical**, v. 107, n. 1, p. 113-120, 27 Maio 2005.
- [49] DUVAL, M.; PABLO, A. Interpretation of Gas-in-Oil Analysis Using New IEC Publication 60599 and IEC TC 10 Databases. **IEEE Electrical Insulation Magazine**, v. 17, n. 2, p. 31-41, Abril 2001.
- [50] MEASURED Hydrogen Spectrum. **HyperPhysics**. Disponível em: <<http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbase/tables/hydspec.html>>. Acesso em: 01 Setembro 2016.
- [51] OLIVEIRA, S. C.; FONTANA, E. Otimização de Sensores de Hidrogênio Baseados em Excitação de Plásmos de Superfície em Filmes Finos de Paládio e Ouro-Paládio. **Anais do SBMO / MOMAG 2006**, Belo Horizonte, 2006.
- [52] LIDE, D. R. **Handbook of Physics and Chemistry**. 85ª. ed. [S.l.]: [s.n.], 2005. 12:133-12:156 p.
- [53] HECHT, E. **Optics**. 4ª. ed. Glenview: Addison Wesley, 2002.
- [54] ROBERTSON, W. M.; MAY, M. S. Surface electromagnetic wave excitation on one-dimensional photonic band-gap arrays. **Appl. Phys. Lett.**, v. 74, n. 13, p. 1800-1802, Fevereiro 1999.

- [55] SINIBALDI, A. et al. Direct comparison of the performance of Bloch surface wave and surface plasmon polariton sensors. **Sensors and Actuators B: Chemical**, v. 174, p. 292-298, Novembro 2012.
- [56] YEH, P.; YARIV, A.; HONG, C. S. Electromagnetic propagation in periodic stratified media. I. General theory. **ournal of the Optical Society of America**, v. 67, n. 4, p. 423-438, Abril 1977.
- [57] MEADE, R. D. et al. Electromagnetic Bloch waves at the surface of a photonic crystal. **Physical Review B**, v. 44, n. 19, p. 10961-10964, Novembro 1991.
- [58] KONG, W. et al. High-sensitivity sensing based on intensity-interrogated Bloch surface wave sensors. **Sensors and Actuators B: Chemical**, v. 193, p. 467–471, Março 2014.
- [59] DESCROVI, E. et al. Coupling of surface waves in highly defined one-dimensional porous silicon photonic crystals for gas sensing applications. **Applied Physics Letters**, v. 91, p. 241109-1 a 241109-13, Dezembro 2007.
- [60] MICHELOTTI, F.; DESCROVI, E. Temperature stability of Bloch surface wave biosensors. **Appl. Phys. Lett.**, v. 99, p. 231107 , Dezembro 2011.
- [61] SHINN, M.; ROBERTSON, W. M. Surface plasmon-like sensor based on surface electromagnetic waves in a photonic band-gap material. **Sensors and Actuators B: Chemical**, v. 105, n. 2, p. 360–364, Março 2005.
- [62] LI, S. et al. Characteristic Optimization of Multilayer Dielectric for the Bloch-Surface-Wave Based Sensor. **IEEE GreenCom, iThings/CPSCoM**, Beijing, p. 1740-1743, Agosto 2013.
- [63] RIZZO, R. et al. Optimization of angularly resolved Bloch surface wave biosensors. **Optics Express**, v. 22, n. 19, p. 23202-23214, Setembro 2014.

Anexo A – Instruções de uso do aplicativo SWSO

- Número máximo de meios: 25 (24 interfaces).
- n : índice de refração, κ : coeficiente de extinção, θ : ângulo de incidência, λ : comprimento de onda, S : sensibilidade;
- Referências das bases de dados dos materiais são mostradas ao passar o mouse sobre os menus *pop-up*;
- Quando o próprio usuário define os valores de n e κ , eles são considerados constantes em relação ao comprimento de onda;
- *Web site* contendo diversas bases de dados das constantes ópticas de alguns materiais: <http://refractiveindex.info/>
- O Preenchimento Automático permite que o usuário insira os parâmetros de um cristal fotônico de uma dimensão rapidamente;
- Para definir a configuração do sensor como de Kretschmann(3,4,5,...) ou de Otto(2), selecione o meio sensoriado desejado;
- Os valores da sensibilidade S e dos resultados dos algoritmos de otimização dependem da escolha do meio sensoriado;
- A definição da região de busca é feita pelo usuário (espessura) e pelo aplicativo (ângulo de incidência). O aplicativo define o intervalo do ângulo através das equações físicas da RPS.
- Rode pelo menos 10 vezes os algoritmos heurísticos para verificar a consistência dos pontos ótimos. A otimização baseia-se na maximização da Sensibilidade;
- Ao passar o mouse sobre um ponto da curva, suas coordenadas tornam-se visíveis;
- Selecione uma área no gráfico com o mouse para aplicar Zoom. Para retirar o Zoom clique duas vezes sobre a área do gráfico;
- Para refinamento das curvas é necessário ajustar os valores de $\Delta\theta$ e $\Delta\lambda$
- NaN é substituído por 0 (zero) para que a biblioteca Flot possa renderizar as curvas.
- Este aplicativo também pode ser útil para projetos de filtros ópticos e outros dispositivos fotônicos.