



**Investigação Numérica do Desempenho de um Sensor
de Fibra Ótica de Índice de Refração, Baseado em SPR
e Utilizando COMSOL Multiphysics**

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

Diego Felipe de Nóbrega dos Santos

MESTRADO EM ENGENHARIA DE TELECOMUNICAÇÕES
E REDES DE ENERGIA



UNIVERSIDADE da MADEIRA

A Nossa Universidade

www.uma.pt

setembro | 2012

UMA

Inv

Investigação Numérica do Desempenho de um Sensor de Fibra Ótica de Índice de Refração, Baseado em SPR e Utilizando COMSOL Multiphysics

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

Diego Felipe de Nóbrega dos Santos

MESTRADO EM ENGENHARIA DE TELECOMUNICAÇÕES
E REDES DE ENERGIA

ORIENTAÇÃO

José Manuel Rocha Teixeira Baptista

CO-ORIENTAÇÃO

Ariel Ricardo Negrão da Silva Guerreiro

Resumo

Esta tese é dedicada aos sensores de fibra ótica especificamente aos sensores baseados no fenómeno de ressonância de plasmão de superfície, SPR (*Surface Plasmon Resonance*), gerados em fibras óticas com configuração do tipo “D”, para aplicação em sensores refratométricos.

Numa primeira parte desta dissertação são descritos os aspetos teóricos fundamentais para a compreensão dos fenómenos de ressonância de plasmões de superfície e a sua utilização em sistemas sensores. Estes fenómenos ocorrem na superfície de interface entre metais e outros meios materiais, sendo capazes de afetar as propriedades em reflexão e transmissão de uma onda eletromagnética incidente (feixe luminoso), de uma forma que é fortemente dependente dos meios na proximidade do metal. Assim, a medição das propriedades do feixe luminoso, como por exemplo o comprimento de onda de ressonância com SPR, permite monitorizar esses meios.

Numa segunda fase foi implementada a simulação destes modelos, em COMSOL Multiphysics, que permitia não só a obtenção dos espectros de transmissão dos fenómenos de ressonância de plasmões de superfície, mas também a obtenção das distribuições do campo elétrico e magnético em função das dimensões do sensor. O COMSOL permitiu também a obtenção das curvas do deslocamento do comprimento de onda ressonante, perante variações do índice de refração exterior, da espessura do metal, da espessura da bainha e da espessura de outro elemento de elevado índice de refração.

A fase seguinte foi verificar que os resultados dos métodos teóricos para os diferentes parâmetros de estudo eram semelhantes aos resultados obtidos no COMSOL.

Conclui-se que com este programa é possível criar novos sensores em fibra ótica, baseados em SPR, para melhorar e otimizar os parâmetros de ressonância e sensibilidade do sensor.

A última fase do trabalho baseou-se na modelização de uma fibra cuja configuração seja tal que possa criar um pequeno efeito de antena e fazer com que parte da luz seja guiada para o exterior da fibra e possa interatuar com o meio externo para melhor sensibilidade.

Palavras-chave: Fenómeno de ressonância de plasmão de superfície; Simulação; COMSOL Multiphysics; Sensores de fibra ótica; Sensores refratométricos.

Abstract

This thesis is specifically dedicated to optical fiber sensors based on surface plasmon resonance, SPR, created in optical D-type fibers, for application in refractometric sensors.

The first part of this thesis describes the theoretical aspects critical to understanding the phenomena of surface plasmon resonance and its use in sensor systems. These phenomena occur on the interface surface between a metal and another material, being able to affect the reflection and transmission properties of an incident electromagnetic wave (beam), in a way that is strongly dependent of the media in proximity to the metal. Thus, the measurement of light properties, such as the wavelength of the plasmon resonance, allows monitoring of the external physical properties, such as the refractive index.

In a second stage, we developed a simulation tool of these models, based on COMSOL Multiphysics, allowing us not only to obtain the transmission spectra of the SPR, but also the distribution of the electric and magnetic fields depending on the size of the sensor. The COMSOL also allows us to obtain the curves of the displacement of the resonant wavelength, in view of variations of the external refractive index, of the optical fiber cladding thickness, or of the thickness of another element of high refractive index, for instance a metal.

The next step was to verify that the result obtained from theoretical methods need to study different parameters were similar to the ones obtained through use of in COMSOL.

It was concluded that with this program one can study new optical fiber sensors based on SPR, to improve and optimize the parameters of the resonance and the sensitivity of the sensor.

The last stage of the work was to model theoretically a fiber which was configured to act in a manner similar to a small antenna which causes part of the light to be guided to the outside of the fiber and to interact more with the external environment, for achieving better sensitivity.

Keywords: Surface Plasmon Resonance; Simulation; COMSOL Multiphysics; Optical fiber sensors; Refractometric sensors.

Agradecimentos

Em primeiro lugar agradeço a Deus, que me deu a oportunidade de viver e que sempre está presente em cada passo da minha vida.

Agradeço a toda a minha família, pela compreensão, pelo carinho, pela motivação e por estarem sempre presentes.

Ao Prof. Dr. José Manuel Baptista, orientador na UMa (Universidade da Madeira), pela sua competência e apoio que transmitiu ao longo deste trabalho, pelo incentivo científico e moral, bem como pela disponibilidade e acima de tudo pela sua amizade.

Ao Prof. Dr. Ariel Guerreiro, coorientador e responsável pela formação no INESC Porto, demonstro o meu reconhecimento pelo seu incentivo científico e os muitos ensinamentos que me transmitiu ao longo do meu estágio.

Aos amigos, docentes e funcionários da UMa pelo companheirismo e profissionalismo demonstrado ao longo dos anos.

A todos, os meus sinceros agradecimentos e espero poder continuar a contar com todos para trabalhos futuros.

Índice

1. Introdução.....	1
1.1. Motivação.....	1
1.2. Estado da arte	2
1.3. Estrutura da tese.....	4
2. Fundamentação Teórica	7
2.1. Princípios básicos da propagação da luz numa fibra ótica.....	7
2.2. Princípio de propagação na fibra ótica através de SPR	10
2.3. Configurações sensoras com SPR	15
2.3.1. Configuração de Otto e Kretschmann.....	16
2.3.2. Configuração de acoplamento por rede de difração (<i>Grating coupling</i>) ..	18
2.3.3. Configuração de Guia de onda acoplado (<i>Waveguide coupling</i>)	19
2.4. SPR baseado em fibra ótica.....	20
2.4.1. Configuração de SPR com remoção total ou parcial da bainha	22
2.4.2. Configuração de SPR <i>Tapered</i>	25
2.4.3. Configuração de SPR <i>modified fiber end</i>	26
2.4.4. Configuração com redes de período longo.....	26
2.4.5. Configuração com <i>Tilted fibre Bragg grating</i>	27
2.4.6. Configuração baseada em <i>Photonic Crystal fibres</i>	28
2.5. Sensibilidade nas configurações em SPR	30
2.6. Análise de sensores de fibras óticas baseados em SPR	32
2.6.1. Cálculo do coeficiente de reflexão e de transmissão utilizado as equações de Fresnel	32
2.6.2. Cálculo do coeficiente de reflexão e de transmissão utilizando o método das matrizes para sistemas multicamadas.	35
2.6.3. Método de expansão e propagação	36

2.6.4.	Análise rigoroso do acoplamento de ondas.....	37
2.6.5.	Métodos computacionais.....	38
2.7.	Tipos de camadas.....	39
3.	COMSOL Multiphysics	41
3.1.	Modelos do COMSOL Multiphysics	41
3.2.	Interface do COMSOL Multiphysics	42
3.3.	Radio frequência e ondas eletromagnéticas (<i>Radio frequency and electromagnetic waves</i> , ).....	46
3.3.1.	Módulo: <i>Wave equation, Electric</i>	51
3.3.2.	<i>Perfectly Matched Layer (PML)</i>	51
3.4.	Materiais (<i>Materials</i> )	52
3.5.	Grelha (<i>Mesh</i> )	53
3.6.	Estudo ou Simulação (<i>Study</i> )	55
3.7.	Resultados (<i>Results</i> )	58
4.	Procedimento e análise de resultados	61
4.1.	Modos de propagação de uma fibra mono e multimodo.....	61
4.2.	Modos de propagação de uma <i>index guiding</i> PCF	66
4.3.	Modos de propagação de uma fibra de tipo “D”	68
4.4.	Análise de um sensor de índice de refração de fibra ótica de tipo “D” baseado em SPR	72
5.	Novas configurações de fibras óticas para sensores	81
5.1.	Análise comparativa de uma fibra ótica de tipo “D” convencional com uma fibra PCF de tipo “D”.	81
5.2.	Comportamento de uma PCF de tipo “D” para sensor de índice de refração baseado em SPR.....	83
5.3.	Novas propostas com fibras óticas de tipo “D”	85

5.4. Novas propostas com fibras óticas de tipo “D” aplicando SPR	89
6. Conclusões e perspectivas de trabalhos futuros	93
Bibliografia.....	97
Anexo A Publicações decorrentes do trabalho realizado	103
Anexo B Parâmetros definidos pelo utilizador e COMSOL	111
Anexo C Algoritmo para a elaboração das equações do Fresnel utilizado o MatLab	117

Índice de Figuras

Figura 2.1 Estrutura básica de uma fibra ótica monomodo convencional. O contorno verde delimita o núcleo e a azul delimita a bainha. a) Vista em 3D b) vista em corte longitudinal com varias camadas.	8
Figura 2.2 Plasmão de superfície que é propagado ao longo da interface entre o metal e o dielétrico, onde ϵ_m é a permitividade do metal, ϵ_d é a permitividade do dielétrico e a penetração do campo em cada elemento é dada como δ_d e δ_m , para o dielétrico e metal, respetivamente. a) Linhas do campo elétrico e b) distribuição do campo elétrico, E_x e magnético, H_y respetivamente [1].	10
Figura 2.3 Comportamento das constantes de propagação do SP (k_{sp}) e da luz incidindo diretamente no dielétrico externo, k_s . O ω_p é a frequência do plasmão do metal [24]. ..	14
Figura 2.4 Diversas configurações de SPR: a) prisma de Otto, b) prisma de Kretschmann, c) acoplamento por rede de difração e d) guia de onda.	17
Figura 2.5 Curvas da constante de propagação da onda de luz no dielétrico externo, k_{ext} , no prisma para um certo ângulo θ , $k_z = k_p \sin(\theta)$, prisma para um ângulo $\theta = 90$, $k_z = k_{sp}$, e onda de plasmão de superfície, k_{sp} , na interface metal-dielétrico externo, (M/D), e metal-prisma, (M/P) [24].	18
Figura 2.6 Configuração básica de um sensor SPR baseado em fibra ótica com remoção da bainha.	21
Figura 2.7 Comportamento da transmissão de luz em função do comprimento de onda depois da interação com o SPR [1].	21
Figura 2.8 Corte transversal e longitudinal do sensor de fibra ótica: a) de tipo “D” e b) de tipo <i>side-polished</i>	24
Figura 2.9 Sensor de fibra ótica baseado na tecnologia SPR com configuração <i>Tapered</i> [1].	25
Figura 2.10 Esquemas básicos de sensores de fibra ótica baseados em SPR com a) reflexão no fim da fibra ótica b) forma cônica na ponta da fibra [39].	26
Figura 2.11 Esquemas básicos de sensores de fibra ótica baseados em SPR: a) corte em U [40] b) corte em H [41].	26
Figura 2.12 Exemplos de sensores de fibra ótica baseados em SPR combinado com a tecnologia de LPG [1].	27

Figura 2.13 Esquema de um sensor de fibra ótica baseado em SPR e utilizando redes inclinadas de Bragg [43].	28
Figura 2.14 Configurações básicas de uma PCF a) <i>index guiding Photonic Crystal Fibres</i> b) <i>Photonic BandGap Fibres</i>	29
Figura 2.15 Configuração de fibra de tipo “D” de um sensor SPR, a) vista da secção, b) vista longitudinal para 4 camadas.	33
Figura 2.16 Modelo para o cálculo do coeficiente de reflexão com multicamadas [8]. .	35
Figura 2.17 Estrutura equivalente de um guia de onda planar para a análise de um sensor SPR baseado em fibra ótica utilizado o MEP [53].	37
Figura 2.18 Sensor SPR com estrutura não contínua da camada de metal [56].	37
Figura 3.1 Módulos fornecidos pelo COMSOL Multiphysics.	42
Figura 3.2 Interface do COMSOL Multiphysics.	45
Figura 3.3 Interface de configuração da simulação das ondas eletromagnéticas.	47
Figura 3.4 Características das ondas eletromagnéticas a estudar no COMSOL Multiphysics.	50
Figura 3.5 Parâmetros característicos do ouro.	53
Figura 3.6 Exemplo do dimensionamento da grelha; a) fibra de tipo “D” b) detalhe do núcleo.	54
Figura 3.7 Configuração do parâmetro de varrimento.	56
Figura 3.8 Parâmetros e configuração do estudo baseado na análise de modos.	58
Figura 3.9 Resultados da simulação do COMSOL de uma fibra tipo “D”, com buracos ao redor do núcleo e com geração de SPR, onde é mostrada a amplitude do campo elétrico (<i>contour</i>) e da componente <i>z</i> do campo elétrico (<i>surface</i>) em V/m, o dimensionamento da grelha utilizada (cinzento) e a direção do modo TE (seta a vermelho no centro).	59
Figura 4.1 Representação do modelo de fibra ótica convencional implementado no COMSOL: a) monomodo b) multimodo.	61
Figura 4.2 Modos da fibra ótica monomodo: a) o modo fundamental propagando-se na fibra b) modo TM, c) modo TE e d) modos propagados na fibra num gráfico 1D.	63
Figura 4.3 Modos da fibra ótica multimodo: a) o modo LP ₁₁ ; b) modo LP ₃₁ ; c) modo LP ₂₂ ; d) modo LP ₂₁ e e) modos propagados na fibra num gráfico 1D.	65

Figura 4.4 a) Estrutura básica de uma PCF b) malha utilizada para o estudo dos elementos finitos.	67
Figura 4.5 Resultado da computação da análise dos modos no COMSOL Multiphysics para uma fibra PCF.	68
Figura 4.6 Configuração de uma fibra de tipo “D” convencional.	69
Figura 4.7 Campo elétrico no eixo z , a) polarização x e b) polarização y	69
Figura 4.8 Intensidade do campo elétrico na direção z ao longo do eixo x	70
Figura 4.9 Variação do índice de refração em função da coordenada espacial x da fibra de tipo “D” e do índice de refração externo, sendo que o núcleo tem um raio de $4\ \mu\text{m}$ a distância do centro do núcleo ao corte em “D” é de $5\ \mu\text{m}$	71
Figura 4.10 Intensidade do campo elétrico na componente z em função da coordenada espacial x para vários índices de refração externos, sendo que o núcleo tem um raio de $4\ \mu\text{m}$ e que a distância do centro do núcleo ao corte em “D” é de $5\ \mu\text{m}$	72
Figura 4.11 Coeficiente de transmissão, T , em função do comprimento de onda para várias espessuras da camada metálica (Ouro - Au), $d = 4,5\ \mu\text{m}$, $L = 1\ \text{mm}$, $n_{ext} = 1,3943$ e $\theta = 88,85^\circ$	73
Figura 4.12 Coeficiente de transmissão, T , em função do comprimento de onda para vários metais, com $d_m = 50\ \text{nm}$, $d = 4,5\ \mu\text{m}$, $L = 1\ \text{mm}$ e $n_{ext} = 1,343$	74
Figura 4.13 Coeficiente de transmissão, T , em função do comprimento de onda para várias distâncias do núcleo ao metal (ouro com espessura de $65\ \text{nm}$), $L = 1\ \text{mm}$, $n_{ext} = 1,3943$	75
Figura 4.14 Coeficiente de transmissão, T , em função do comprimento de onda para várias espessuras de: a) Ta_2O_5 , b) TiO_2 c) SiO_2 , com $L = 1\ \text{mm}$, $n_{ext} = 1,329$, $d = 4\ \mu\text{m}$, $d_m = 65\ \text{nm}$ e $\theta = 88,85^\circ$	76
Figura 4.15 Coeficiente de transmissão, T , em função do comprimento de onda para vários índice de refração do meio externo (n_{ext}), com e sem $Ta_2O_5 = 19\ \text{nm}$, $L = 1\ \text{mm}$, $d_m = 65\ \text{nm}$ e $d = 4\ \mu\text{m}$	78
Figura 5.1 Intensidade do campo elétrico de uma secção da fibra PCF de tipo “D” para um $n_{ext} = 1,42$	81
Figura 5.2 Intensidade do campo elétrico absoluto em função da distância do centro da fibra (eixo x) comparando a PCF de tipo “D” e a fibra de tipo “D” convencional, para	

vários índices de refração: a) todo o estudo; b) zona ampliada onde é feito o corte (3 - 6 μm).	82
Figura 5.3 Coeficiente de transmissão, T , de uma PCF de tipo “D” em função do comprimento de onda para várias espessuras da camada metálica (Au), $d = 4,5 \mu\text{m}$, $L = 1 \text{ mm}$ e $n_{ext} = 1,3943$	84
Figura 5.4 Coeficiente de transmissão, T , de uma PCF de tipo “D” em função do comprimento de onda para vários índices de refração externo (n_{ext}), $d = 4,5 \mu\text{m}$, $L = 1 \text{ mm}$ e $d_m = 65 \text{ nm}$	85
Figura 5.5 Primeira configuração para aumentar o campo elétrico no meio externo onde $p = 9 \mu\text{m}$, $d = 4 \mu\text{m}$, a espessura das retas é $Dr = 2 \mu\text{m}$ e o ângulo de 60° com respeito ao eixo x	86
Figura 5.6 Segunda configuração para aumentar o campo elétrico no meio externo onde $p = 9 \mu\text{m}$, $d = 4 \mu\text{m}$, o diâmetro dos buracos é de $1,4 \mu\text{m}$ e o ângulo de 60° com respeito ao eixo x	87
Figura 5.7 Terceira configuração para aumentar o campo elétrico no meio externo com $p = 9 \mu\text{m}$, $h = 2,3 \mu\text{m}$ e $d = 4 \mu\text{m}$	88
Figura 5.8 Intensidade do campo elétrico ao longo do eixo x , com e sem linhas retas preenchidas, parábolas e buracos com ar com $Dr = 2 \mu\text{m}$, $p = 9 \mu\text{m}$, $h = 2,3 \mu\text{m}$ e $d = 4 \mu\text{m}$, a) todo o estudo, b) zona onde é feito o corte ampliada.	89
Figura 5.9 Coeficiente de transmissão, T , em função do comprimento de onda para várias espessuras da camada metálica (Ouro - Au), para as três configurações propostas, $d = 4,5 \mu\text{m}$, $L = 1 \text{ mm}$ e $n_{ext} = 1,3943$	90
Figura 5.10 Coeficiente de transmissão, T , em função do comprimento de onda para várias espessuras da camada metálica (Ouro - Au), para a fibra ótica de tipo “D” convencional e com linhas retas, $d = 4,5 \mu\text{m}$, $L = 1 \text{ mm}$ e $n_{ext} = 1,3943$	91
Figura 5.11 Coeficiente de transmissão, T , em função do comprimento de onda para vários índices de refração externo, n_{ext} , para as três configurações propostas, $d_m = 65 \text{ nm}$, $d = 4,5 \mu\text{m}$ e $L = 1 \text{ mm}$	92

Índice de Tabelas

Tabela 2.1 Parâmetros relevantes da equação do Drude para a prata e o ouro [20].	12
Tabela 2.2 Valores de comprimento de onda do plasmão e de colisão para diferentes metais.	12
Tabela 2.3 Valores de penetração do metal δ_m , e do dielétrico δ_d para valores e componentes típicos de um sensor baseado em SPR [1].	15
Tabela 2.4 Características gerais de sensores de fibra ótica baseados em SPR [1].	31
Tabela 2.5 Constantes de Sellmeier para a sílica pura, sílica dopada com germânio e sílica dopada com flúor [54].	34
Tabela 3.1 Parâmetros de estudo fornecidos pelo COMSOL Multiphysics.	44
Tabela 4.1 Alteração dos comprimentos de onda de ressonância em função da composição e espessura da camada de dielétrico.	77
Tabela 4.2 Comparação entre os comprimentos de onda de ressonância para os dois métodos (Fresnel e FEM, obtidos através do MatLab e COMSOL, respetivamente).	77
Tabela 4.3 Sensibilidade do sensor com e sem Ta ₂ O ₅ .	78
Tabela 5.1 Índice de refração eficaz e birrefringência de cada uma das configurações.	83
Tabela 5.2 Sensibilidade do sensor PCF de tipo “D” baseado em SPR.	85
Tabela 5.3 Comprimento de onda e sensibilidade das três configurações de fibra óticas propostas.	92

Lista de Acrónimos

ATR – *Attenuated Total Reflection*

Reflexão Total Atenuada

FDTD – *Finite-Difference Time Domain*

Diferenças finitas no domínio dos tempos

FEM – *Finite Element Method*

Método dos elementos finitos

IR – Índice de refração

LP – *Linear Polarization*

Linearmente polarizado

LPG – *Long-period fibre grating*

Redes em fibra de período longo

M/D – Metal-dielétrico externo

M/P – Metal-prisma

MEP – *Expansion and Propagation Method*

Método de expansão e propagação

MMF – *Multi-Mode Fiber*

Fibra multimodo

MUMPS – *MUltifrontal Massively Parallel sparse direct Solver*

NA – *Numerical Aperture*

Abertura numérica

PBF – *Photonic Bandgap Fibres*

Fibras de banda fotónica proibida

PDE – *Partial Differential Equations*

Equações diferenciais parciais

PFC – *Photonic-Crystal Fiber*

Fibra de cristal fotónico

PML – *Perfectly Matched Layer*

Camada de adaptação perfeita

RCWA – *Rigorous Coupled Wave Analysis*

Análise de acoplamento de onda rigoroso

RIU – *Refractive Index Unit*
Unidade de índice de refração

SNR – *Signal-to-Noise Ratio*
Relação sinal ruído

SMF – *Single-Mode Fiber*
Fibra monomodo

SPR – *Surface Plasmon*
Plasmão de Superfície

SPR – *Surface plasmon Resonance*
Ressonância de plasmão de superfície

SPW – *Surface Plasmon Wave*
Onda de plasmão de superfície

T-FBG – *Tilted Fiber Bragg Gratings*
Redes de Bragg com inclinação

TIR – *Total Internal Reflection*
Reflexão interna total

1. Introdução

Este primeiro capítulo apresenta a motivação que levou à realização deste trabalho, faz uma pequena resenha histórica da evolução dos sensores em fibra ótica e apresenta a estrutura da tese.

1.1. Motivação

Uma das principais motivações para realizar este estudo foi a necessidade de possuir ferramentas que permitam simular o comportamento de sensores de fibra ótica baseados em SPR para a medição do índice de refração externo. Devido aos diferentes tipos de fibras óticas e de configurações de sensores associados aos fenômenos de SPR, a sua construção real e ensaio é muito cara e morosa, tornando os programas de simulação ferramentas importantes para se obter uma primeira e rápida aproximação do comportamento do sensor final. Com uma ferramenta deste tipo é possível solucionar um conjunto de problemas que surgem no decorrer do estudo e ao mesmo tempo otimizar o projeto a realizar. A possibilidade de se ter uma só ferramenta para que se possa simular o desempenho de sensores em fibra ótica foi o objetivo neste trabalho no âmbito de sensores de fibra ótica baseados em SPR.

Assim, foi utilizado o COMSOL Multiphysics como ferramenta para a simulação do comportamento da luz em determinadas fibras óticas. Em particular foram estudadas estruturas destinadas a fomentar o fenômeno de SPR para diferentes configurações de sensores de fibras óticas, e assim se poder otimizar o seu funcionamento.

Os sensores de fibra ótica baseados em SPR para medição de índice de refração têm vindo a evoluir bastante, apresentando uma alta sensibilidade em comparação com outros sensores, entre outras características. Por isso, a existência de ferramentas que permitam resolver vários dos problemas na implementação do sensor é muito importante.

Para realizar o estudo dos SPRs foi utilizada uma ferramenta poderosa como é o COMSOL Multiphysics. Esta escolha deve-se ao alto desempenho que este programa

apresenta para a elaboração de sensores com diferentes configurações e utilizando várias propriedades físicas. O COMSOL utiliza o método dos elementos finitos (*Finite Element Method* – FEM) que é um método com vantagens para resolver problemas associados à tecnologia nano- e micro- estruturada [1].

1.2. Estado da arte

Existe um elevado interesse em utilizar sensores para monitorização ambiental, para melhorar a qualidade de vida das populações, bem como em aplicações em industriais, em estruturas, máquinas, animais, entre outros. As condições ótimas em termos de pH, temperatura, índice de refração, humidade, pressão, tensão, concentração de dióxido de carbono (CO₂) e muitos outros parâmetros são necessários para uma melhor qualidade de vida. O uso de sensores é crucial para se obter informação relevante do ambiente, a fim de realizar uma boa regulação dos parâmetros ambientais críticos.

Os sensores de fibra ótica constituem uma solução com muito interesse para a monitorização ambiental devido às suas características intrínsecas, tais como a elevada quantidade de sensores que pode existir numa única fibra ótica, funcionamento remoto, tamanho pequeno dos sensores e imunidade a interferências [1]. Além de alguns sistemas de fibra ótica de deteção do índice de refração externo já estarem disponíveis comercialmente, tem havido um notável interesse científico na tecnologia de sensores de SPR associados a fibras de cristal fotónico (*Photonic-crystal fiber* – PFC). Este novo tipo de sensores, com base em microcamadas de material depositado sobre fibras nano- e micro- estruturadas, vem atraindo a atenção dos investigadores [2].

O funcionamento de sensores de ressonância de plasmão de superfície como biosensores foi demonstrado por *Liedberg et al.* [3] em 1983. Neste estudo foi utilizado um método prático e comumente usado para excitar o plasmão de superfície, que foi originalmente sugerido por Kretschmann em 1971. É um método no qual a luz propaga-se através de um prisma, na configuração de reflexão total, tendo sido depositada uma película de metal por evaporação na base desse prisma [4].

Em 1993, *Jorgenson e Yee* [5] construíram o primeiro sensor SPR baseado em fibra ótica. Este trabalho demonstrou que a fibra ótica pode substituir o prisma, na configuração de Kretschmann, permitindo também gerar a ressonância dos plasmões de superfície. A fibra utilizada foi quimicamente tratada para remover quase toda a bainha e desta maneira aumentar a sensibilidade do sensor. Este tipo de sensor de fibra ótica baseado em SPR é capaz de apresentar uma sensibilidade muito elevada ao índice de refração e um curto tempo de resposta. Por outro lado, apresenta as vantagens de usar fibra ótica como elemento sensor [6].

Configurações típicas dos sensores SPR em fibra ótica são baseadas nos seguintes tipos ou estruturas: fibra tipo “D”, remoção da bainha da fibra, espelho de reflexão na ponta da fibra e fibra em ângulo cônico (*taper*), sendo que habitualmente o principal parâmetro em estudo é a espessura do filme do sensor e do efeito que tem sobre a sensibilidade [6]. Outros estudos incluem o revestimento residual complementar da fibra [7], a combinação de várias camadas de metal [8], a utilização de uma sobre-camada, colocada depois do metal [7, 8, 9], entre outros. Nestes casos, o objetivo é melhorar a gama do comprimento de onda de operação, gama de índice de refração de detecção, sensibilidade, resolução, entre outros, para obter a melhor configuração para a aplicação do sensor. Configurações típicas têm uma zona de operação entre 600-1000 nm em termos de comprimento de onda, pelo que, um esforço importante de investigação científica tem de ser feito para se usar a janela de telecomunicações (1300-1550 nm), sendo para isso necessária uma combinação de outras tecnologias [10, 11]. Exemplos destas novas tecnologias incluem as fibras de cristal fotônicos que podem ser usadas para ajustar vários parâmetros tais como: as perdas óticas, a resolução, a zona de operação do comprimento de onda, e outros [12, 13].

Devido aos diferentes tipos de fibras óticas e às configurações de sensores associados aos fenómenos de SPR, a sua construção real e ensaio é muito cara e morosa, tornando os programas de simulação ferramentas importantes para se obter uma primeira e rápida aproximação do comportamento do sensor final. Estas ferramentas devem permitir analisar parâmetros tais como: a intensidade do campo elétrico e magnético, o índice efetivo de refração, entre outros.

Existem várias dificuldades para desenvolver um bom programa de simulação, incluindo as que são encontradas ao escrever o código para 2D e 3D [1]. Em particular, quando a estrutura do sensor é demasiado complexa, os cálculos passam a ser bastante elaborados, sendo necessário utilizar métodos de análise numérica mais simplificados, como são: o método de expansão e propagação (*Expansion and Propagation Method – MEP*), o método de modelação de multicamadas através de matriz de estrutura de transferência [7, 8], a matriz de transferência para guias de ondas cilíndricas para multicamadas (*transfer matrix for multilayer cylindrical waveguide*) [14] e a análise de acoplamento de onda rigoroso (*Rigorous Coupled Wave Analysis – RCWA*) [15]. Contudo, estes métodos têm algumas limitações ao analisar estruturas com irregularidades nano-estruturadas [16]. Dai, a necessidade de ferramentas de simulação um pouco mais complexas, como por exemplo: o método das diferenças finitas no domínio dos tempos (*finite-difference time domain - FDTD*) e o método dos elementos finitos, que permitem calcular o campo elétrico e magnético nessas estruturas, mas requerem elevadas capacidades de memória computacional [12]. Neste trabalho foi utilizado o método dos elementos finitos para o estudo e otimização do desempenho de sensores de fibra ótica baseados em SPR, usando o COMSOL Multiphysics.

1.3. Estrutura da tese

Este trabalho está organizado em seis capítulos, incluindo esta introdução. No segundo capítulo é feito um estudo da teoria fundamental de fibra ótica e do estado atual das configurações sensoras baseadas em SPR que existem na literatura. Finalmente é apresentada uma breve explicação das aplicações que envolvem SPR, juntamente com as expressões matemáticas que descrevem esses fenómenos.

No terceiro capítulo é descrito o funcionamento do COMSOL e a estrutura dos módulos do programa; como são os parâmetros de estudo, estudo físico a realizar, entre outros. Nesse capítulo, também são enumerados os problemas encontrados e as soluções criadas para um melhor desempenho do programa.

No capítulo quatro são mostrados os resultados obtidos pelo COMSOL para o estudo dos modos de propagação em diferentes fibras e também para o desempenho

como sensor de índice de refração baseado em SPR. Em seguida estes resultados são comparados com os resultados obtidos pelas aproximações feitas nas expressões matemáticas e pelos conhecimentos teóricos do comportamento da luz na fibra ótica para verificar o bom comportamento do COMSOL.

No quinto capítulo são mostradas novas configurações para melhorar o desempenho do sensor de índice de refração baseado em SPR.

No sexto e último capítulo, é resumido todo o trabalho e são apresentadas as conclusões e os trabalhos passíveis de serem executados futuramente.

No anexo A são apresentadas as contribuições decorrentes do trabalho de mestrado, com alguns dos resultados obtidos. No anexo B são expostos os parâmetros e variáveis utilizados no COMSOL, bem como que as variáveis fornecidas pelo COMSOL. No anexo C é mostrado o algoritmo baseado nas equações de Fresnel utilizando o MatLab.

2. Fundamentação Teórica

Neste capítulo será apresentada a teoria fundamental da propagação da luz na fibra ótica, assim como a teoria para a compreensão do funcionamento do SPR, bem como de algumas das configurações que aparecem na literatura sobre sensores baseados em SPR. Por último, será também apresentado o desenvolvimento de expressões matemáticas que permitiram realizar a simulação.

2.1. Princípios básicos da propagação da luz numa fibra ótica

A fibra ótica é um componente muito utilizado nas telecomunicações assim como na criação de dispositivos sensores óticos. Este tipo de tecnologia traz múltiplas vantagens, pois permite desenvolver dispositivos mais pequenos, com imunidade ao ruído eletromagnético, eletricamente passivos, com altos débitos de comunicação, com inúmeros canais passíveis de multiplexagem, entre outras.

A fibra ótica não é mais que um guia de onda cilíndrico, no qual a luz é confinada e transmitida entre as extremidades. É caracterizada por ter uma estrutura muito fina de vidro ou plástico denominada núcleo, coberta por outra camada conhecida como bainha, como é observado na figura 2.1.a). Dependendo da aplicação, e de onde será colocada, a fibra, pode ser coberta por diferentes elementos, para se conseguir que a fibra suporte as condições ambientais.

O confinamento da luz pode ser explicado através de ótica geométrica usando, a reflexão total da luz descrita pela lei de Snell [17]:

$$\frac{\sin(\theta_{core})}{\sin(\theta_{clad})} = \frac{n_{clad}}{n_{core}} \quad (2.1)$$

onde θ_{core} e θ_{clad} é o ângulo de incidência refração, respetivamente, n_{clad} e n_{core} são os índices de refração da bainha e do núcleo, respetivamente. Para que exista o confinamento total da luz o $n_{clad} < n_{core}$, e assim define-se o ângulo crítico, θ_c , como o menor ângulo a partir do qual existe a reflexão total da luz, como é mostrado na figura 2.1.b) e escrita como:

$$\theta_c = \arcsin\left(\frac{n_{clad}}{n_{core}}\right) \quad (2.2)$$

A propagação de luz na fibra ótica é também explicada pela teoria eletromagnética com recurso às equações Maxwell:

$$\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\frac{\partial \mathbf{B}(\mathbf{r}, t)}{dt} \quad (2.3)$$

$$\nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{J}(\mathbf{r}, t) + \frac{\partial \mathbf{D}(\mathbf{r}, t)}{dt} \quad (2.4)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{D}(\mathbf{r}, t) = \rho(\mathbf{r}, t) \quad (2.5)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (2.6)$$

onde \mathbf{E} , \mathbf{H} , \mathbf{D} e \mathbf{B} são o campo elétrico, campo magnético, indução elétrica e indução magnética, respetivamente. O termo \mathbf{J} representa a densidade de corrente, ρ representa a densidade de carga total, \mathbf{r} são as coordenadas espaciais e t denota o tempo. Ao resolver as equações 2.3 a 2.6, com as condições fronteira impostas pela geometria da fibra encontram-se várias soluções para as quais a luz pode viajar na fibra ótica, conhecidas como modos. Um modo de propagação na fibra não é mais do que a forma como a onda se propaga dentro da fibra num regime estacionário. O número de modos que pode propagar-se numa fibra é dependente das dimensões do núcleo da fibra, da diferença relativa entre os índices de refração e do comprimento de onda [17, 18].

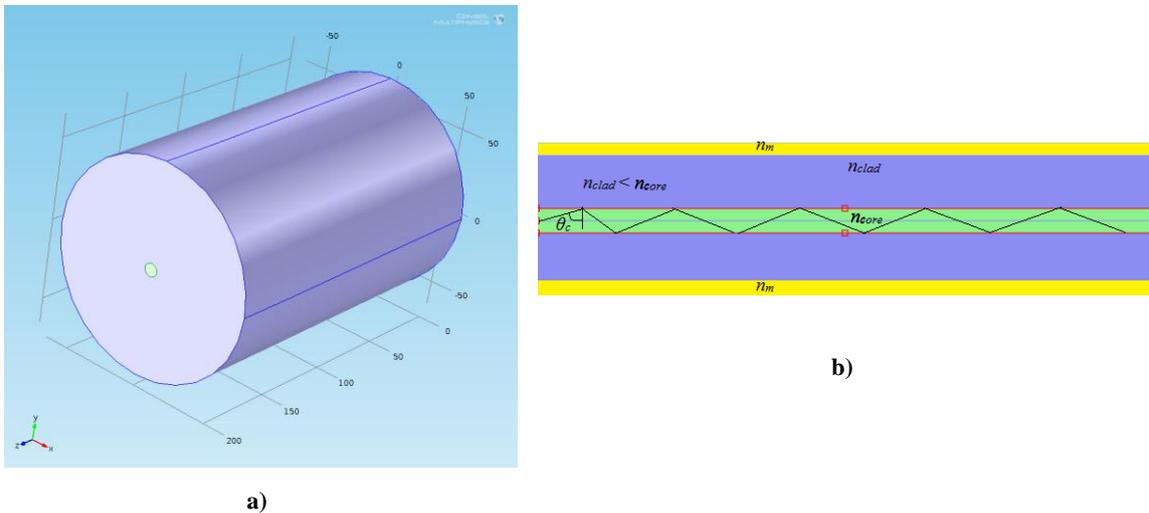


Figura 2.1 Estrutura básica de uma fibra ótica monomodo convencional. O contorno verde delimita o núcleo e a azul delimita a bainha. a) Vista em 3D b) vista em corte longitudinal com varias camadas.

Para se saber na fibra qual é o modo que está a ser propagado na fibra são utilizadas as equações de Bessel. As equações de Bessel permitem escrever a propagação da luz na fibra ótica para cada camada i que existe na estrutura da fibra

(figura 2.1.b)) e são obtidas através das equações de Maxwell (equações 2.3 a 2.6). Podem-se obter as componentes longitudinais do campo elétrico e magnético da fibra, $U_{vj,i}(r)$, como é mostrado na seguinte expressão:

$$\begin{aligned}
 U_{vj,i}(r) &= [A_{vj,i} \mathbf{C}_v(r\gamma_{vj,i}) + B_{vj,i} \mathbf{D}_v(r\gamma_{vj,i})] \\
 &= \begin{cases} A_{vj,i} J_v(r\gamma_{vj,i}) + B_{vj,i} Y_v(r\gamma_{vj,i}) & \text{para } k_{vj} < k_0 n_i \\ A_{vj,i} I_v(r\gamma_{vj,i}) + B_{vj,i} K_v(r\gamma_{vj,i}) & \text{para } k_{vj} > k_0 n_i \end{cases} \quad (2.7)
 \end{aligned}$$

onde A_i e B_i são os coeficientes de campos obtidos para cada uma das constante de propagação (k_{vj}) em cada camada i , designada pela variável i , e que determinado pelas condições fronteiras dentro de cada camada cilíndrica, $J_v(r\gamma_{vj,i})$ e $Y_v(r\gamma_{vj,i})$ são as funções de Bessel do primeiro e do segundo ordem de v , $I_v(r\gamma_{vj,i})$ e $K_v(r\gamma_{vj,i})$ são as funções de Bessel modificadas, em ordem v . A constante de propagação longitudinal para os modos LP_{vj} , $\gamma_{vj,i}$, é definida como:

$$\gamma_{vj,i} = \sqrt{(k_0 n_i)^2 - k_{vj}^2} \quad (2.8)$$

onde $k_0 = 2\pi/\lambda_0$ é a onda numérica que opera no espaço livre, λ_0 , n_i é o índice de refração da camada i , e k_{vj} é a constante de propagação que existe na fibra [14]. Como é mostrado nas equações 2.7 e 2.8 é fácil concluir que podem existir varias soluções para a mesma constante de propagação, implicando que existem vários modos de propagação.

Como é conhecido da literatura e de uma forma genérica tem-se que uma fibra monomodo é uma fibra cujo núcleo tem um diâmetro inferior aos 10 μm , e é multimodo quando o diâmetro seja superior [17]. Para se conhecer o número de modos que se propaga na fibra é utilizada a seguinte expressão:

$$V = \frac{2\pi a}{\lambda} \sqrt{n_c^2 - n_{clad}^2} \quad (2.9)$$

onde a é o raio do núcleo da fibra, λ é o comprimento de onda e V é definido como a frequência normalizada, sendo este o parâmetro que governa o número de modos que se propaga numa fibra ótica.

O modo fundamental da fibra, que corresponde à função de Bessel de ordem 0, J_0 , é o único que se propaga na fibra para valores de V até 2,4048, o que implica que para valores de V superiores, a fibra passa a ser considerada multimodo.

Existem modos que são conhecidos como TM (*Transverse Magnetic*) e TE (*Transverse Electric*) e correspondem, respetivamente, a modos em que as componentes longitudinais do campo elétrico e magnético, E_z e H_z são nulas, respetivamente. Como normalmente o campo elétrico e magnético longitudinal é diferente de zero, os modos que são propagados na fibra são híbridos, e são conhecidos como EH ou HE dependendo de qual campo (elétrico ou magnético), é predominante. Estes tipos de modos podem ser agrupados em séries e passam a denominar-se modos linearmente polarizados (*Linear Polarization – LP*). Os modos $LP_{v,j}$ são caracterizados por dois parâmetros: número de modo de azimute, v , e o número de modos radiais, j [19].

2.2. Princípio de propagação na fibra ótica através de SPR

Um plasmão é definido como um campo (quase-partícula) resultante das oscilações dos eletrões livres num meio. A excitação do plasmão de superfície (*Surface Plasmon – SP*) [1] resulta do acoplamento das ondas eletromagnéticas com as oscilações dos eletrões livres do metal na superfície entre o metal e o meio dielétrico externo, como é mostrado na figura 2.2 a). Quando a excitação é produzida de forma ótica o efeito é conhecido como SPR [1, 2].

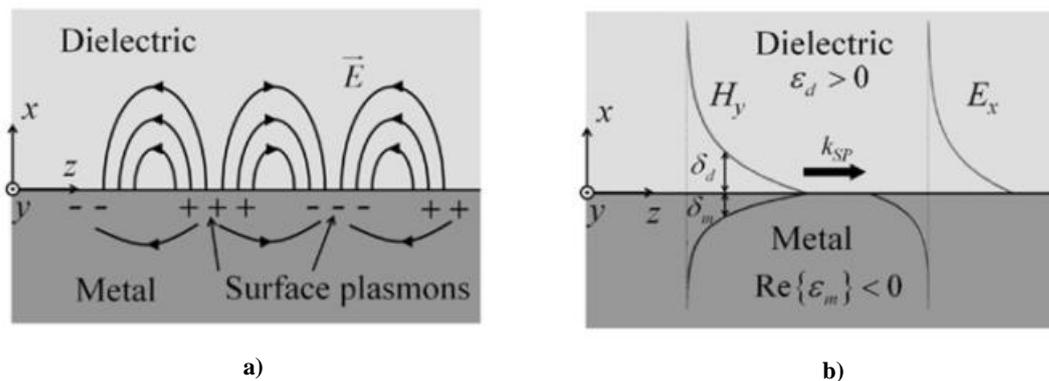


Figura 2.2 Plasmão de superfície que é propagado ao longo da interface entre o metal e o dielétrico, onde ϵ_m é a permitividade do metal, ϵ_d é a permitividade do dielétrico e a penetração do campo em cada elemento é dada como δ_d e δ_m , para o dielétrico e metal, respetivamente. a) Linhas do campo elétrico e b) distribuição do campo elétrico, E_x e magnético, H_y , respetivamente [1].

Como é mostrado na figura 2.2 a), apenas a polarização ou os modos de propagação que possuem campo elétrico paralelo à superfície do metal são capazes de

deslocalizar carga elétrica de modo a formar distribuições de carga localizadas, e assim excitar plasmões de superfície. Na figura 2.2 b) pode-se observar que a máxima amplitude do campo ocorre na interface entre a camada do metal e do dielétrico e que decai de maneira exponencial em ambos lados do metal e o dielétrico. A escala de decaimento do campo é determinada pela constante dielétrica do metal, a qual pode ser calculada pelo modelo de Drude [20]:

$$\varepsilon_m(\omega) = \varepsilon^\infty - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + j\omega_d)} \quad (2.10)$$

onde ε^∞ é a constante de alta frequência do dielétrico, ω é a frequência de radiação que, ω_d é a frequência de amortecimento (*damping*) e ω_p é a frequência de plasmão de Drude [20]. As frequências são escritas como:

$$\omega_p = \left(\frac{Ne^2}{\varepsilon_0 m_e} \right)^{1/2} \quad (2.11)$$

$$\omega_d = \frac{v_f}{R_{bulk}} \quad (2.12)$$

onde ε_0 é a permissividade do campo elétrico no vácuo, m_e , e , e N são definidos como a massa, carga e concentração de elétrons livres, respetivamente, e onde v_f representa a velocidade dos elétrons de energia de Fermi e R_{bulk} representa o percurso livre médio dos elétrons de condução do metal. Quando a placa metálica é composta por nanopartículas, a dependência da frequência de amortecimento no tamanho das partículas é dada por:

$$\omega_d(R) = \omega_d(bulk) + \frac{v_f}{R} \quad (2.13)$$

onde o tamanho das nano-partículas, R , (que é menor do que o percurso médio livre na massa do metal), faz com que os elétrons de condução sejam adicionalmente espalhados pela superfície [20]. Em tal caso, o percurso do caminho livre dos elétrons, R_{eff} , torna-se dependente do tamanho e da sua relação com o tamanho das nano-partículas, e é dado pela seguinte equação:

$$\frac{1}{R_{eff}} = \frac{1}{R} + \frac{1}{R_{bulk}} \quad (2.14)$$

Os valores típicos dos parâmetros abordados anteriormente são mostrados na tabela 2.1, para uma camada de prata ou ouro.

Tabela 2.1 Parâmetros relevantes da equação do Drude para a prata e o ouro [20].

Parâmetro	Prata (Ag)	Ouro (Au)
Constante de alta frequência do dielétrico, ϵ^∞	2,48	7,0
Frequência do Plasmão, ω_p (rad s ⁻¹)	$1,35 \times 10^{16}$	$1,40 \times 10^{16}$
Frequência de amortecimento, ω_d (bulk) (rad s ⁻¹)	$7,62 \times 10^{13}$	$3,78 \times 10^{13}$
Velocidade de Fermi, v_f (ms ⁻¹)	$1,40 \times 10^6$	$1,40 \times 10^6$

Da equação 2.10 pode concluir-se que a frequência de plasmão, ω_p , constitui o valor da frequência de corte, abaixo da qual o vetor de onda da luz torna-se imaginário, indicando que a luz não pode propagar-se no meio. Em vez disso, a luz que incide sobre a superfície do metal é totalmente refletida, e o campo eletromagnético só pode penetrar no interior do metal, até uma profundidade pequena. Em palavras simples, abaixo de ω_p , as cargas do metal podem oscilar com o campo, irradiando um campo eletromagnético secundário, que cancela a onda incidente. Acima de ω_p , as cargas movem-se de forma muito lenta, não conseguindo acompanhar as oscilações do campo e não podendo cancelá-lo. Este efeito resulta num forte acoplamento entre a oscilação do plasmão e do campo eletromagnético, o que resulta numa excitação, conhecida como o fenómeno de plasmão de superfície. Para a geração de oscilações das cargas livres na superfície do metal, apenas luz incidente cujo campo eletromagnético com uma polarização na qual o campo elétrico se propaga ao longo da direção da superfície do metal (*p*-polarização) permitem excitar os plasmões de superfície [21, 22].

A equação 2.10 pode-se escrever em função do comprimento de onda, ficando:

$$\epsilon_m(\lambda) = 1 - \frac{\lambda^2 \lambda_c}{\lambda_p^2 (\lambda_c + j\lambda)} \quad (2.15)$$

onde λ_p e λ_c são os comprimentos de ondas do plasmão e de colisão, respetivamente [8]. Os valores típicos do comprimento de onda do plasmão e de colisão para os metais utilizados para realizar SPR em fibra ótica são mostrados na tabela 2.2.

Tabela 2.2 Valores de comprimento de onda do plasmão e de colisão para diferentes metais.

Metal	Comprimento de onda do plasmão (λ_p) (m)	Comprimento de onda de colisão (λ_c) (m)
Prata (Ag)	$1,4514 \times 10^{-7}$	$1,7614 \times 10^{-5}$
Ouro (Au)	$1,6826 \times 10^{-7}$	$8,9342 \times 10^{-6}$
Alumínio (Al)	$1,0657 \times 10^{-7}$	$2,4511 \times 10^{-5}$
Cobre (Cu)	$1,3617 \times 10^{-7}$	$4,0852 \times 10^{-5}$

As equações 2.10 a 2.13 são utilizadas para os casos em que a película do metal é representada por um conjunto de nano-partículas metálicas [20]. A equação 2.15 é utilizada para um metal ou conjunto de metais, mas de espessuras mais elevadas [8].

Um parâmetro importante é a constante de propagação no meio i , que pode-se definir como:

$$k_i = \frac{\omega}{c} \sqrt{\varepsilon_i} = \frac{2\pi}{\lambda} \sqrt{\varepsilon_i} = \frac{2\pi}{\lambda} n_i \quad (2.16)$$

onde ε_i é permitividade do meio onde se propaga a luz e $c = 1/\sqrt{\mu_0\varepsilon_0}$ é a velocidade da luz que é definida pelos parâmetros de permitividade, ε_0 , e permeabilidade, μ_0 , no vácuo e n_i é o índice de refração do meio onde se propaga a luz [23]. A constante de propagação que ocorre entre a película do metal e o dielétrico externo, para excitação do SPR, é definida através da seguinte equação:

$$k_{sp} = \frac{2\pi}{\lambda} \sqrt{\frac{\varepsilon_m(\lambda)\varepsilon_{ext}}{\varepsilon_m(\lambda) + \varepsilon_{ext}}} \quad (2.17)$$

onde k_{sp} é a constante de propagação da excitação do SPR e ε_m e ε_{ext} são a permitividade do metal e do dielétrico externo, respetivamente. Como é notório na equação 2.15, a permitividade do metal tem parte real e imaginária, $\varepsilon_m(\lambda) = \varepsilon'_m(\lambda) + i\varepsilon''_m(\lambda)$, o que implica que na equação 2.17, a constante de propagação do SPR também é composta por uma parte real e outra imaginária. A parte imaginária do k''_{sp} representa a atenuação das ondas SPR devido às absorções do metal e pela perda de radiação, e é escrita como [21, 22]:

$$k''_{sp} = \frac{2\pi}{\lambda} \frac{\varepsilon''_m(\lambda)}{2(\varepsilon'_m(\lambda))^2} \left(\frac{\varepsilon'_m(\lambda)\varepsilon_{ext}}{\varepsilon'_m(\lambda) + \varepsilon_{ext}} \right)^{3/2} \quad (2.18)$$

A partir das equações 2.16 a 2.18 podem-se construir as curvas de dispersão ou as constantes de propagação dos meios, como representado na figura 2.3. Sempre que a constante de propagação da luz no dielétrico externo (k_s) toma valores abaixo da constante de propagação do plasmão de superfície (k_{sp}) (à esquerda da curva da constante de propagação do k_{sp} no gráfico da figura 2.3), e abaixo da frequência do plasmão do metal (ω_p), não há excitação do plasmão de superfície. Para conseguir gerar

o SPR é preciso então aumentar o índice de refração do dielétrico externo, o que permite criar um sensor de medida de índice de refração de elevada sensibilidade [23].

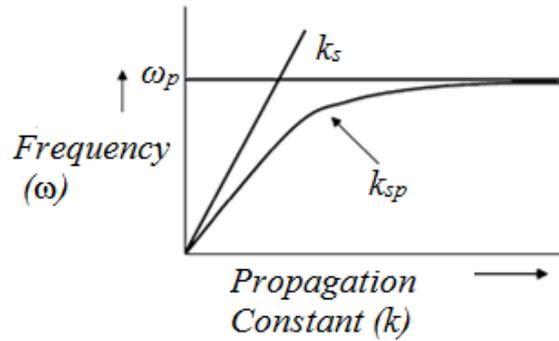


Figura 2.3 Comportamento das constantes de propagação do SP (k_{sp}) e da luz incidindo diretamente no dielétrico externo, k_s . O ω_p é a frequência do plasmão do metal [24].

Em combinação com a onda propagada k_{sp} , que é a componente incidente paralela ao interface metal-dielétrico, existe uma outra componente que é perpendicular à interface, k_x . Usando a figura 2.2 b) como referência e aplicando o teorema de Pitágoras e a lei de conversão de energia, pode-se escrever a constante de propagação na interface metal-dielétrico como:

$$k^2 = k_{sp}^2 + k_{x_i}^2 \quad (2.19)$$

para a qual k_{x_i} é um valor imaginário e é inferior à componente, k_{sp} , o que permite concluir, que existe uma diminuição exponencial do campo eletromagnético na direção x , que é dependente do meio onde se propagar a luz (metal ou dielétrico externo) [23].

A profundidade de penetração, δ_i , é definida como a distância, na direção perpendicular da interface metal-dielétrico, ao fim da qual o campo eletromagnético perde e^{-1} da sua máxima intensidade [1, 23]. A equação seguinte pode ser escrita a partir das equações 2.17 e 2.19:

$$\delta_i = \frac{\lambda}{2\pi} \sqrt{\frac{\epsilon_m'(\lambda) + \epsilon_{ext}}{\epsilon_i^2}} \quad (2.20)$$

onde i pode ser m ou ext dependendo de onde é realizado o estudo, metal ou dielétrico externo, respetivamente [24]. Na tabela 2.3 são indicados valores obtidos de profundidade de penetração do metal e do dielétrico, para diferentes comprimentos de onda, dielétrico externo e diferentes metais [1, 23].

Tabela 2.3 Valores de penetração do metal δ_m , e do dielétrico δ_d para valores e componentes típicos de um sensor baseado em SPR [1].

		$\lambda=633$ nm		$\lambda=1550$ nm			
n_{ext}	ϵ_m	Prata	Ouro	n_{ext}	ϵ_m	Prata	Ouro
		(-17,93+j0,68)	(-13,08+j0,99)			(-1,12+j0,099)	(-81,38+j14,29)
Ar (1,00)		$\delta_d=390$ nm	$\delta_d=290$ nm	Ar (1,00)		$\delta_d=2,3$ μ m	$\delta_d=2,4$ μ m
		$\delta_m=24$ nm	$\delta_m=31$ nm			$\delta_m=26$ nm	$\delta_m=25$ nm
Água (1,33)		$\delta_d=210$ nm	$\delta_d=160$ nm	Água (1,33)		$\delta_d=1,3$ μ m	$\delta_d=1,4$ μ m
		$\delta_m=24$ nm	$\delta_m=29$ nm			$\delta_m=26$ nm	$\delta_m=25$ nm
SiO₂ (1,54)		$\delta_d=160$ nm	$\delta_d=110$ nm	SiO₂ (1,54)		$\delta_d=0,97$ μ m	$\delta_d=1$ μ m
		$\delta_m=23$ nm	$\delta_m=28$ nm			$\delta_m=26$ nm	$\delta_m=25$ nm

Como é observado na tabela 2.3 e na figura 2.2 b), a distribuição do campo elétrico é assimétrica. A intensidade do campo elétrico é concentrada maioritariamente no dielétrico externo uma vez que a profundidade de penetração da onda no dielétrico é várias vezes superior ao do metal. Assim, sempre que a espessura do metal seja comparável com a profundidade de penetração da onda no metal pode-se gerar a ressonância dos plasmões de superfície. As pequenas variações do índice de refração perto da camada do metal afetam a intensidade de transmissão da luz, permitindo obter uma elevada sensibilidade.

Para melhorar os parâmetros de funcionamento do sensor existe um conjunto de parâmetros que se podem alterar:

- Espessura e formato do metal;
- Constante dielétrica do metal e do dielétrico, através da utilização de outros metais ou através da combinação de vários metais diferentes;
- Configuração do sensor, tipo de fibra utilizada (como por exemplo fibras PCF e fibras de tipo “D”), a estrutura do sensor, entre outros.

2.3. Configurações sensoras com SPR

Existem vários métodos para gerar o SPR para sensores, nomeadamente através de: prisma, guia de onda, fibra ótica convencional e estruturada (figura 2.4). O princípio de funcionamento é o mesmo, ou seja, para uma variação do índice de refração do meio externo consegue-se que o comprimento de onda ou a intensidade de luz mude. Os valores iniciais destes parâmetros são alterados conforme são variadas as características da interface M/D (tipo de material, espessura, entre outros) [25].

2.3.1. Configuração de Otto e Kretschmann

As configurações de Otto e Kretschmann utilizam um prisma como meio de propagação de luz para a construção do sensor. Neste tipo de configuração aplica-se o método de reflexão total atenuada (*Attenuated Total Reflection – ATR*). A onda luminosa que se propaga bate no prisma, e é refretada para dentro do prisma sempre e quando o ângulo crítico (equação 2.2) definido pelo índice de refração do prisma e metal cumpra a condição de reflexão interna total (*Total Internal Reflection – TIR*). Ao mesmo tempo é gerado um campo evanescente que consegue penetrar no metal (distância <100 nm), nas condições adequadas e penetrar até à região de interface entre o metal e o dielétrico externo, nas condições adequadas, a qual permite excitar o plasmão de superfície [24].

A excitação do SPR é produzida quando a componente de onda de luz que incide de forma paralela à interface é igual ao plasmão de superfície, na direção k_z , dado pela seguinte equação:

$$k_z = \frac{2\pi}{\lambda} n_p \sin(\theta) = k_p \sin(\theta) \quad (2.21)$$

onde n_p é o índice de refração do prisma, θ é o ângulo de incidência e k_p é a constante de propagação ao longo do prisma [1, 23, 24]. Igualando a equação anterior e a parte real da constante de propagação, k_{sp} , gerada pela onda que se propaga ao longo da interface metal-dielétrico (e que é influenciada pelo dielétrico externo, n_{ext}) tem-se como resultado a zona de limite de geração do SPR, como é observado pela seguinte equação:

$$k_{sp} = \frac{2\pi}{\lambda} \sqrt{\frac{\epsilon_m(\lambda)\epsilon_{ext}}{\epsilon_m(\lambda) + \epsilon_{ext}}} = \frac{2\pi}{\lambda} n_p \sin(\theta) = k_z \quad (2.22)$$

Na figura 2.4.a) e figura 2.4.b) apresentam-se as duas configurações mais conhecidas de plasmão de superfície baseados em prisma. Na figura 2.4.a) é mostrada a configuração criada por Otto, do ano 1968 [26], que é constituída por um prisma (ϵ_p) seguido de um dielétrico (ϵ_{ext}), normalmente ar, que separa o prisma do metal. Quando a luz incide na interface prisma-ar, o campo evanescente é acoplada a partir do plasmão de superfície entre a interface ar-metal. O problema desta configuração é a sua

implementação prática, dada a dificuldade de colocar o metal a uma distância pequena, por exemplo 200 nm, do prisma [24].

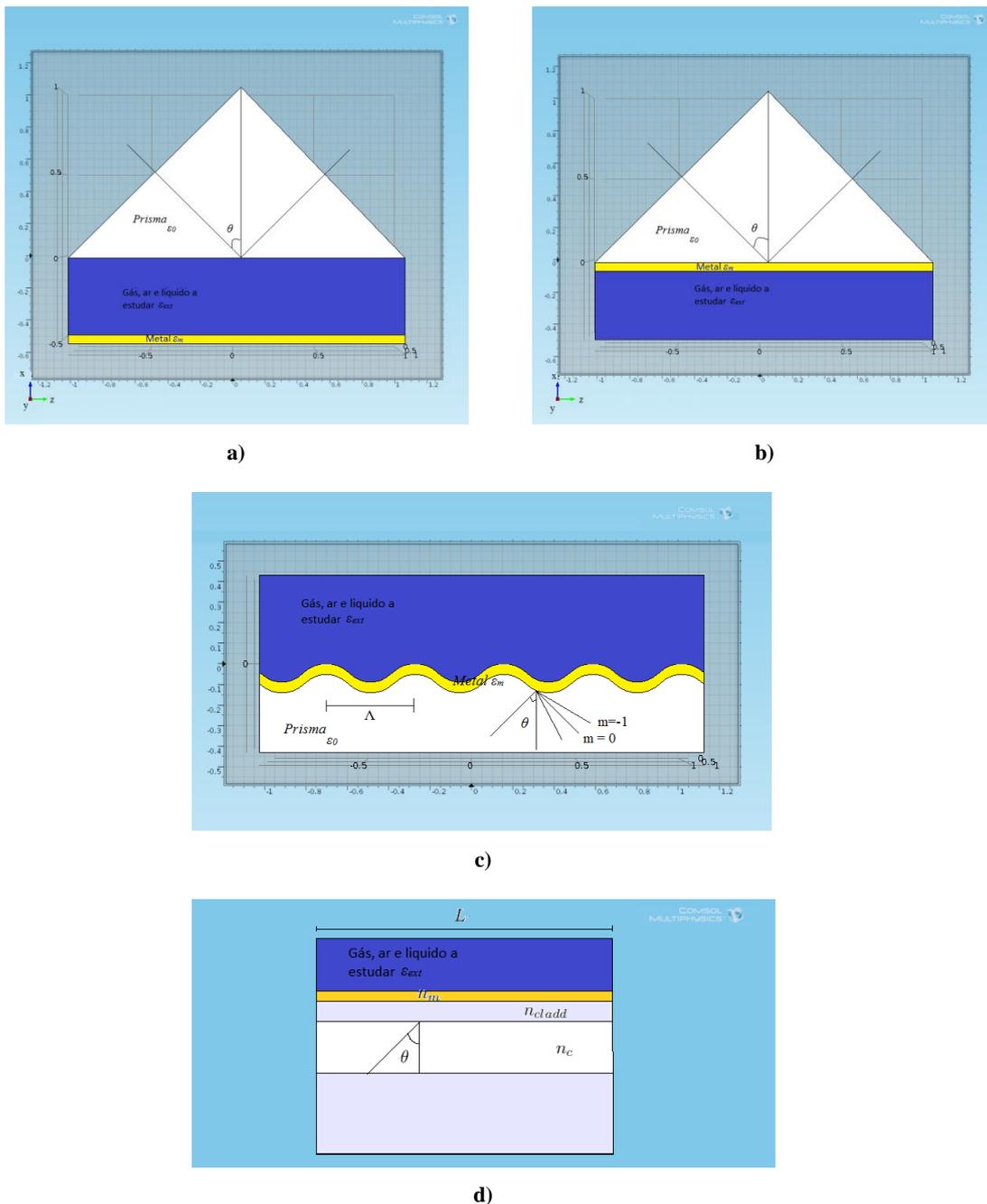


Figura 2.4 Diversas configurações de SPR: a) prisma de Otto, b) prisma de Kretschmann, c) acoplamento por rede de difração e d) guia de onda.

A segunda configuração é conhecida como configuração de Kretschmann, estudada no ano de 1968 [27], que é comumente utilizada para gerar a excitação do plasmão de superfície na película de metal. Como é mostrado na figura 2.4.b), a camada de metal encontra-se localizada imediatamente depois do prisma, facilitando a

construção dos dispositivos, sendo depois colocado um dielétrico a seguir do metal. Do mesmo modo que na configuração anterior, a luz incide na interface prisma-metal criando uma onda evanescente que decai exponencialmente dentro do metal até chegar à interface metal-dielétrico, excita, o plasmão de superfície. Na figura 2.4.c) é apresentada uma configuração de SPR por acoplamento de rede de difração e na figura 2.4.d) é apresentada outra configuração de SPR baseada num guia de onda.

Na figura 2.5 são apresentadas as constantes de propagação para as diferentes meios a estudar e que existem na configuração de Kretschmann. Como é observado na figura 2.5 para a existência de SPR, a constante de propagação do plasmão de superfície tem que intersecta a constante de propagação no prisma desde um certo ângulo de incidência ($k_z = k_p \sin(\theta)$) até ao ângulo de incidência de 90° ($k_z = k_p$). Também se pode observar que a condição para gerar as ondas de plasmão de superfície (*Surface Plasmon Waves* – SPW) ocorre na interface M/D (metal-dielétrico externo) e é dependente do ângulo de incidência e da frequência de propagação. Por último, observa-se que não é possível excitar a SPW na interface M/P (metal-prisma) uma vez que esta se encontra à direita da máxima constante de propagação da onda evanescente ($k_z = k_p$), e de que as duas curvas nunca se cruzam [24].

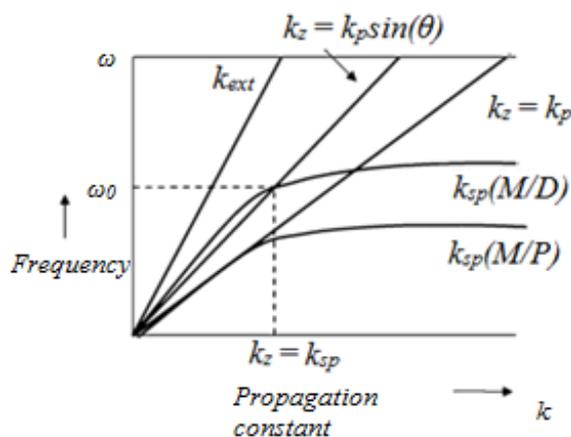


Figura 2.5 Curvas da constante de propagação da onda de luz no dielétrico externo, k_{ext} , no prisma para um certo ângulo θ , $k_z = k_p \sin(\theta)$, prisma para um ângulo $\theta = 90$, $k_z = k_p$, e onda de plasmão de superfície, k_{sp} , na interface metal-dielétrico externo, (M/D), e metal-prisma, (M/P) [24].

2.3.2. Configuração de acoplamento por rede de difração (*Grating coupling*)

O acoplamento por rede de difração (*grating*) é outro método para conseguir a excitação da SPW e consiste principalmente numa onda de luz que incide sobre uma superfície periódica (com período Λ), normalmente sinusoidal, e que ao ser refletida

pelo metal gera várias ondas difratadas, como é observado na figura 2.4 c). Do mesmo modo que nas outras configurações, a componente da constante de propagação, k , que é excitada é aquela que se encontra paralela à interface M/D e é dada como:

$$k'_{zm} = k_z + mG \quad (2.23)$$

onde m é um número inteiro que representa a ordem de difração, k_z é a constante de propagação ao longo da superfície do *grating*, $G = 2\pi/\Lambda$ é a componente de onda do *grating*, e k'_{zm} é a constante de propagação para as ondas de luz difratadas pelo metal no *grating* [28]. A SPW será excitada sempre e quando a equação 2.23 seja igual à propagação constante do plasmão de superfície, k_{sp} , como é mostrado em seguida:

$$\frac{2\pi}{\lambda} n_d \sin(\theta) + \frac{2\pi}{\Lambda} m = \pm k_{sp} \quad (2.24)$$

2.3.3. Configuração de Guia de onda acoplado (*Waveguide coupling*)

Este tipo de configuração é muito semelhante às configurações de prisma, de Otto e Kretschmann também conhecidas como configurações ATR, mas apresenta algumas vantagens como: maior simplicidade, pequenas dimensões e fornece as mesmas ou melhores medições de alta resolução que as oferecidas pelas configurações ATR. Como é mostrado na figura 2.4 d) a excitação é observada pela perda de intensidade da luz por acoplamento para fora do guia de onda, em comparação com a intensidade da luz que foi colocada no início do guia de onda. Esta perda é devida ao efeito radiativo do plasmão de superfície que ocorre na interface entre o metal e o guia de onda. Os índices de refração dos materiais por cima e por debaixo do metal (índice de refração do material do guia de onda e índice de refração do dielétrico externo) são os valores que fazem variar a intensidade de acoplamento do plasmão, ou seja, pequenas variações do índice de refração do meio externo implicam elevadas variações das perdas no modo do guia de onda, pelo que se podem observar as perdas no sinal transmitido. Este efeito faz com que este tipo de sensores seja muito sensível às variações do índice de refração externo.

Este tipo de sensores SPR com base em ótica integrada é uma das abordagens mais estudadas para desenvolver sensores multiplexados e integrados numa única estrutura, capazes de medir simultaneamente diferentes amostras. A utilização de fibras óticas permite também um elevado nível de miniaturização dos sensores baseados no

fenômeno de ressonância dos plasmões de superfície e permite trabalhar sem problemas de alinhamento mecânicos, que estão muitas vezes presentes em configurações do tipo *bulk* (ótica discreta) [1].

2.4. SPR baseado em fibra ótica

A importância dos sensores de ressonância de plasmão de superfície baseados em fibra ótica em campos como a Química, a Biologia ou na monitorização do ambiente tem aumentando ao longo dos últimos anos, tendo surgido recentemente novas configurações, técnicas de análise e simulações [2].

A ideia de implementar este tipo de sensores em fibra ótica em vez de configurações do tipo *bulk* permite aproveitar as vantagens da fibra ótica, como: a capacidade de monitorização multiponto, tamanhos reduzidos, flexibilidade mecânica, capacidade de transmitir sinais a longa distância, monitorização em locais de difícil acesso, entre outros, e de manter ou aumentar a eficiência do sensor face à configuração mais tradicional em *bulk*.

Um sensor SPR baseado em fibra ótica, cujo funcionamento é semelhante à configuração de Kretschmann, é observado na figura 2.1 e na figura 2.6. Uma maneira simplista de criar este sensor passa por substituir o prisma por uma fibra ótica onde a bainha foi removida através de um método químico [29]. O objetivo de eliminar ou reduzir a bainha o de fazer com que o campo eletromagnético interatue com maior eficiência com o metal e com o meio externo, permitindo que o campo evanescente consiga propagar-se até ao meio externo com maior intensidade. Neste caso a equação 2.22 pode ser escrita como:

$$k_{sp} = \frac{2\pi}{\lambda} \sqrt{\frac{\epsilon_m(\lambda)\epsilon_{ext}}{\epsilon_m(\lambda) + \epsilon_{ext}}} = \frac{2\pi}{\lambda} n_{core} \sin(\theta) = k_z \quad (2.25)$$

em que n_{core} é o índice de refração do núcleo.

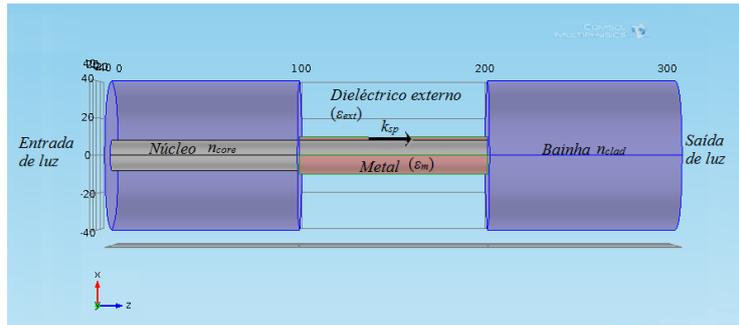


Figura 2.6 Configuração básica de um sensor SPR baseado em fibra ótica com remoção da bainha.

A excitação do plasmão de superfície é produzida pela polarização TM ou seja pela componente paralela à espessura do metal na direção da propagação da luz na fibra ótica, desde que as SPW se encontrem entre o metal e o dielétrico externo (meio a estudar). Este tipo de configurações é muito sensível qualquer tipo de variação nas condições fronteira, como a absorção de moléculas pela superfície do metal a mudança do índice de refração do meio externo.

Nas configurações de Kretschmann e Otto é considerado o ângulo de incidência da luz para a excitação do SPR e como parâmetro de estudo. Na fibra ótica é utilizado o comprimento de onda de ressonância e a intensidade de luz, ou seja, será nesses parâmetros que se poderá obter informação, comparando o sinal que é transmitido com o sinal que é recebido. Tal como é apresentado na figura 2.7, uma pequena variação do índice de refração externo implicará uma variação do comprimento de onda de ressonância do plasmão de superfície.

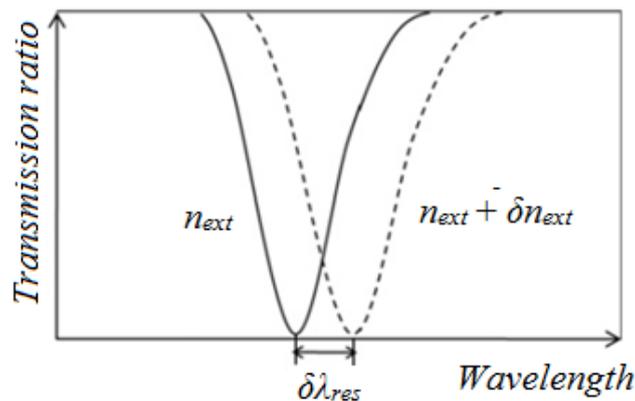


Figura 2.7 Comportamento da transmissão de luz em função do comprimento de onda depois da interação com o SPR [1].

Como se observa na figura 2.7, e a partir da equação 2.25, pode-se concluir que o comprimento de onda, a geometria da fibra, os parâmetros da fibra (como por exemplo o índice de refração da bainha e do núcleo) e as propriedades do metal são parâmetros que afetam as características de acoplamento do campo evanescente na superfície do plasma. Seguidamente são estudadas com mais detalhe algumas das configurações que existem para excitar o SPR em fibras óticas.

2.4.1. Configuração de SPR com remoção total ou parcial da bainha

O primeiro trabalho sensor baseado em SPR em fibra ótica foi estudado por Jorgenson e Yee [30]. Foi utilizado um interrogador de comprimento de onda e uma configuração em fibra multimodo na qual a bainha foi removida, como é observado na figura 2.6. A remoção da bainha foi efetuada através de um procedimento químico, sendo depositada prata de forma simétrica sobre o núcleo. A reflexão interna total ocorre para os raios de propagação de luz que tenham um ângulo maior que o ângulo crítico (sendo estes dependentes da abertura numérica, ou seja, do índice de refração do núcleo e da bainha), até ao ângulo de 90° (colinear com o eixo da fibra), permitindo gerar o campo evanescente que penetra no metal, fazendo com que seja excitado o plasmão de superfície. Este tipo de acoplamento é dependente da configuração e dos parâmetros do metal e da fibra, assim como também é diferente se a fibra ótica é multimodo ou monomodo, já que a transmissão é muito dependente do número de modos que são propagados na fibra. A utilização de fibra monomodo permite obter uma ressonância do plasmão mais estreita devido a que só um modo é propagado na fibra. Ao utilizar-se uma fibra multimodo é possível obter um efeito do SPR maior devido à combinação dos vários modos a propagar-se na fibra, mas obtendo-se uma ressonância mais larga [1].

Neste tipo de configuração conseguem-se ter sensores de comprimento de 1 mm, com capacidade de deteção entre os 1,2 aos 1,4 RIU (*refractive index unit* – RIU), com uma resolução de 5×10^{-5} RIU e na deteção da variação do comprimento de onda um limiar de deteção de 0,5 nm [31]. Em [32] é demonstrado que se pode alterar a zona de funcionamento do sensor para 1 – 1,7 RIU usando, uma camada extra, depois do metal, com um elevado índice de refração e se o núcleo da fibra ótica tiver um elevado índice de refração.

Existem vários estudos sobre este tipo de configuração com a utilização de ouro [33]. A utilização de outros materiais na fibra ótica, mono ou multimodo, e a alteração de outros parâmetros, permitem construir novos sensores [8].

A necessidade de remover a bainha da fibra para aumentar o campo evanescente que interatua com o meio externo é uma necessidade mas também é um problema, pois que como é observado na figura 2.6, só fica o núcleo como suporte da fibra, e este tem um raio de 4 μm (configuração monomodo), o que faz com que o sensor tenha uma estrutura mecânica muito frágil, e dificulta a sua manipulação. Por isso, apareceram novas configurações de sensores baseados em SPR utilizando fibras *side-polished* e *D-type*.

Como é mostrado na figura 2.8 a) e b) estes tipos de configurações são usados para fornecerem uma estrutura mais robusta. Na figura 2.8 a) é apresentada a configuração proposta por *Chiu* [34], na qual onde o sensor de fibra ótica de tipo “D” pode ser modelado como um prisma com forma cilíndrica, revestido com uma película fina de ouro. Neste tipo de configuração só uma parte da fibra é exposta ao meio a estudar. Na figura 2.8 b) é mostrado outro tipo de configuração de fibra ótica designado como de polimento lateral e caracterizada por ter uma remoção parcial ou total da bainha, através de um método químico ou físico, e utilizando uma fibra monomodo. Do mesmo modo que na configuração observada na figura 2.6, nestas duas configurações a onda que é propagada na fibra ótica excita a SPW na interface entre o metal e o meio de detecção sempre e quando satisfaça as condições de propagação.

Dos trabalhos sobre sensores baseados em fibras de tipo “D” têm-se realizado vários estudos de equações e aproximações para realizar as simulações do comportamento da intensidade de transmissão na fibra ótica e do efeito que produz o sensor baseado em SPR, como é mostrado em [9, 21]. No primeiro trabalho referenciado anteriormente, estuda-se o comportamento do sensor em função do ângulo de incidência, θ , e no segundo realiza-se o estudo através do coeficiente de transmissão. Nos sensores de configuração de tipo *side-polished* têm-se realizado vários estudos, como é o caso da utilização de uma camada extra depois do metal com um índice de refração elevado (de modo a alterar o comprimento de onda de funcionamento), e realizam-se também estudos sobre a espessura do metal e da bainha, de maneira de obter-se a eficiência máxima do sensor [7, 35].

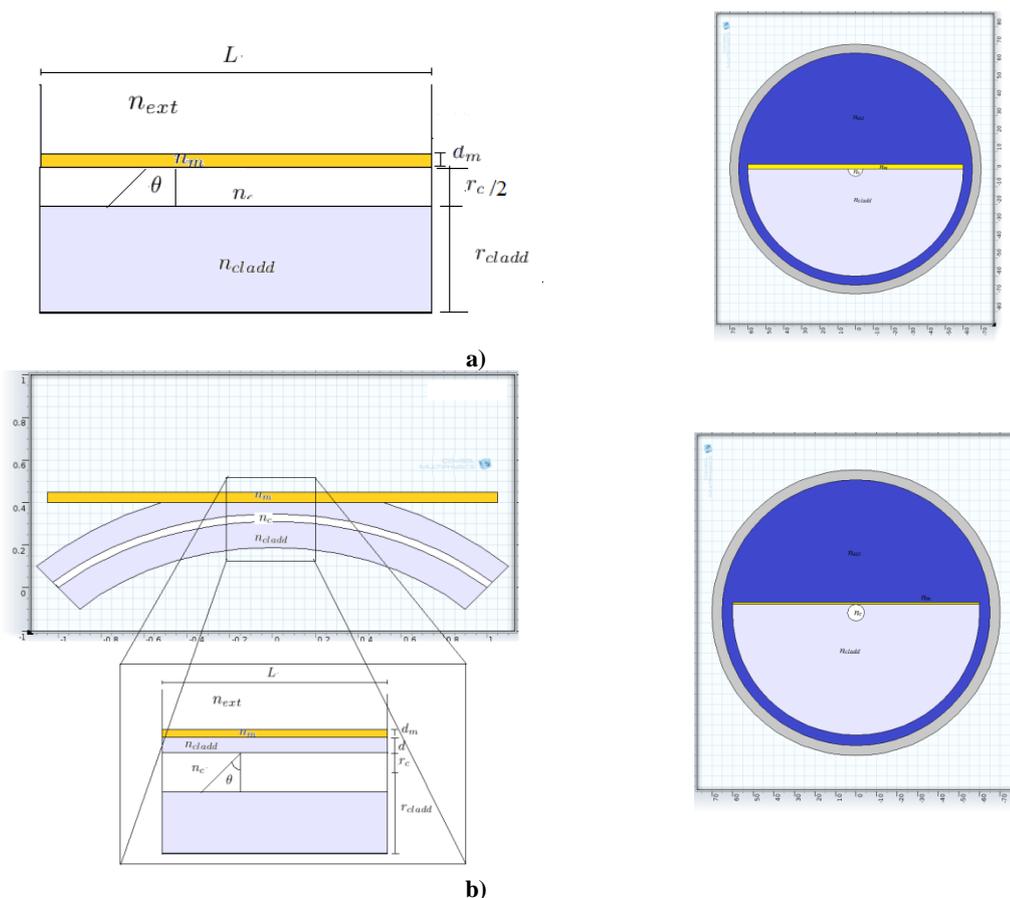


Figura 2.8 Corte transversal e longitudinal do sensor de fibra ótica: a) de tipo “D” e b) de tipo *side-polished*.

Como é observável na figura 2.8 a) e comparando com a figura 2.8 b), existe outra diferença entre as duas configurações. Na primeira, o metal é colocado na fibra ótica no meio do núcleo, ao contrário da segunda onde o metal não é localizado no núcleo. Na configuração proposta por *Chiu* [34] também é colocada uma camada de dióxido de silício (SiO_2), antes da camada do metal, sendo que esta tem um índice de refração menor que o do núcleo, fazendo com que aumente a concentração de luz no núcleo.

Na literatura, os sensores de fibra ótica, baseados em SPR com configuração de tipo “D” e configuração *side-polished*, têm a tendência de ser tratados de forma idêntica, uma vez que na região sensora apresentam a mesma configuração. Apesar da configuração *side-polished* ter um pequena curvatura, que pode afetar a sensibilidade do sensor, os trabalhos que são apresentados na literatura tem uma configuração monomodo (para ter um zona detecção mais estreita do sinal), fazendo com que a luz seja

confinada quase toda no núcleo e só na interface onde o metal se encontra muito perto do núcleo é que existe a excitação da SPW [1].

2.4.2. Configuração de SPR *Tapered*

Existem outros tipos de configuração de sensores em fibra ótica que fomentam a interação do campo evanescente com o meio exterior. Aquele que é abordado nesta subsecção é uma configuração de SPR *Tapered* [36]. Este tipo de configuração é caracterizado por um estreitamento na região de detecção, como é observado na figura 2.9, o que permite aumentar o campo evanescente nesta zona. A excitação da SPW ocorre quando a constante de propagação da onda propagante do plasmão é aproximada ao valor da constante de propagação da zona não revestida da fibra ótica, cumprindo a igualdade da equação 2.25 e gerando uma atenuação (perda) na transmissão. Para que esta condição seja cumprida é preciso combinar tanto a geometria do estreitamento como os materiais que são utilizados [37, 38]. Uma das vantagens deste tipo de configuração cônica é que a intensidade do campo evanescente depende fortemente da geometria da fibra, ao contrário da fibra cilíndrica onde a penetração do campo evanescente é constante em toda a zona de detecção. Além disso, a penetração do campo evanescente e, portanto, o grau de acoplamento da luz com os plasmões de superfície, depende da abertura numérica (*Numerical Aperture* – NA) da fibra, que está relacionada com o limite de aceitação do ângulo de luz à entrada da fibra ótica. Uma vez que esse ângulo é fixo, este tipo de dispositivos podem operar no modo de deslocamento de comprimento de onda ou no modo de atenuação de potência. No modo de deslocamento de comprimento de onda, o espectro de transmissão do plasmão de ressonância muda à medida que o índice de refração exterior do meio dielétrico muda devido à estrutura da fibra. No modo de perda de potência, a potência ótica total transmitida muda conforme muda o plasmão de ressonância devido ao índice de refração exterior.

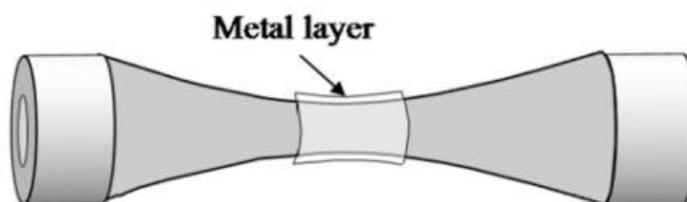


Figura 2.9 Sensor de fibra ótica baseado na tecnologia SPR com configuração *Tapered* [1].

2.4.3. Configuração de SPR *modified fiber end*

Outro tipo de configuração é a mostrada na figura 2.10 a) e b), e consiste na alteração da extremidade do sensor. Na figura 2.10 a) tem-se que o sensor é semelhante ao estudado anteriormente mas no final é colocado um espelho com o intuito de duplicar o efeito do SPR ou de aumentar o campo evanescente no exterior da fibra. O espelho permite uma passagem dupla da luz pela zona sensora [39]. A figura 2.10 b) mostra outra configuração na qual o fim da fibra é terminado de forma cônica [1].



Figura 2.10 Esquemas básicos de sensores de fibra ótica baseados em SPR com a) reflexão no fim da fibra ótica b) forma cônica na ponta da fibra [39].

Para além das configurações explicadas anteriormente, que são as mais importantes ou as que têm mais informação na literatura, existem outros tipos de configurações como a configuração com corte em U [40] e corte em H [41], apresentadas nas figuras 2.11 a) e b), respetivamente, o que indica que existem numerosas possibilidades para gerar o SPR [40, 41].

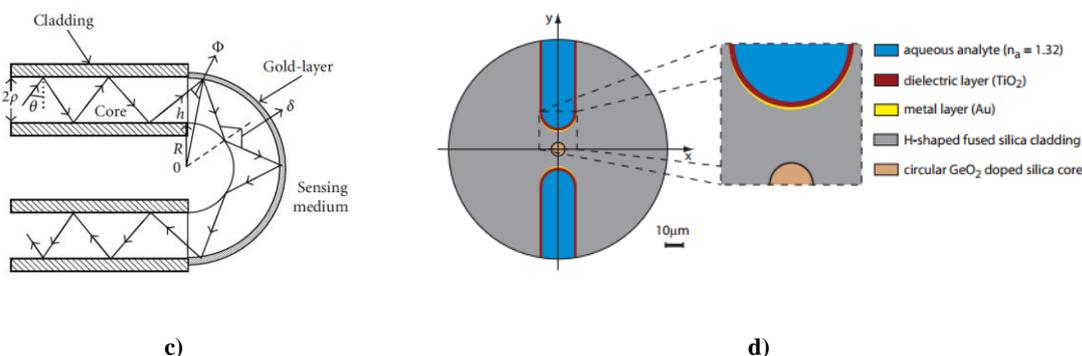


Figura 2.11 Esquemas básicos de sensores de fibra ótica baseados em SPR: a) corte em U [40] b) corte em H [41].

2.4.4. Configuração com redes de período longo

As redes de período longo (*Long-period fibre grating* – LPG) são dispositivos que têm um papel importante no desenvolvimento de sensores de índice de refração. As redes podem ser criadas através da exposição lateral da bainha da fibra à luz, resultante da intersecção entre dois feixes de luz ultravioletas (UV) ou através da utilização de

raios UV que são aplicados sobre uma máscara que gera uma sequência de perturbações periódicas sobre a fibra ótica, especificamente no núcleo da fibra, ou ainda através de descargas de arco elétrico espacialmente controladas [14, 42]. Este tipo de dispositivos também tem sido utilizado para excitar os plasmões de ressonância. Nesse caso os modos de acoplamento da bainha são utilizados com o fim de excitar o plasmão. A excitação da onda de plasmão de superfície é baseada no acoplamento de ressonância que existe entre o modo guiado, que se propaga dentro da fibra guiada (núcleo), e os modos co-propagantes da bainha, permitindo que na interface entre a bainha e o metal seja excitada uma onda de plasmão de superfície. A ideia de utilizar as LPG permite concentrar a luz na bainha, através da configuração dos períodos da rede, fazendo com que a fibra seja muito sensível ao meio externo sem diminuir a sua robustez. Ao utilizar-se uma camada de metal, colocada entre a bainha e o dielétrico externo é possível gerar o SPR. Na figura 2.12 mostra-se o esquema da configuração de uma rede de período longo [1].

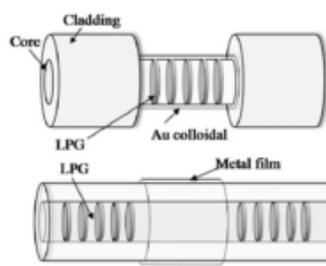


Figura 2.12 Exemplos de sensores de fibra ótica baseados em SPR combinado com a tecnologia de LPG [1].

2.4.5. Configuração com *Tilted fibre Bragg grating*

As redes de Bragg com inclinação (*Tilted Fiber Bragg Gratings* T-FBG) [43] também têm sido muito utilizadas para a gerar SPR. Este tipo de elemento consiste numa fibra ótica monomodo onde é aplicada no núcleo uma rede de Bragg inclinada [43]. A camada de metal é colocada à volta da bainha, de maneira a poder gerar a onda de plasmão de superfície. Quando a componente axial da constante de propagação da luz na bainha coincide com a constante de propagação da onda de plasmão de superfície é gerada uma SPR. Este tipo de acoplamento é altamente sensível à variação do índice de refração do meio externo. Como é observado na figura 2.13, a rede de Bragg inclinada é utilizada para acoplar parte do modo que viaja pelo núcleo a um conjunto de modos contra-propagantes de luz que viajam pela bainha.

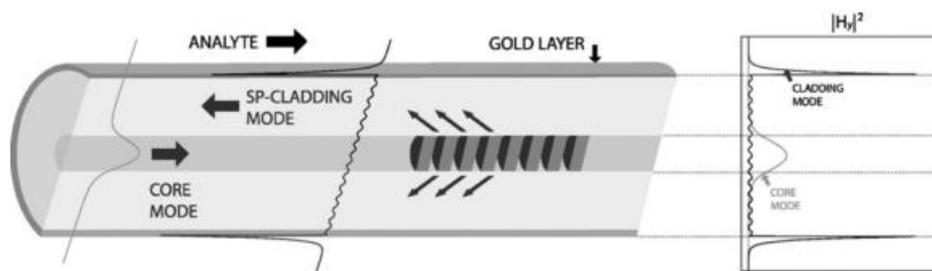


Figura 2.13 Esquema de um sensor de fibra ótica baseado em SPR e utilizando redes inclinadas de Bragg [43].

Ao existir um conjunto de modos contra-propagantes na bainha, isto quer dizer que existe um conjunto de campos evanescentes diferentes de zero, fazendo com que existam campos evanescentes a propagar-se fora da bainha e portanto a propagar-se na película de metal. Quando a componente axial da constante de propagação do modo da bainha é igual à constante de propagação da onda do SPR é possível ocorrer acoplamento na interface, gerando a excitação do SPR.

2.4.6. Configuração baseada em *Photonic Crystal fibres*

Recentemente as fibras óticas microestruturadas (*Photonic Crystal Fibers*) têm sido alvo de vários estudos para a criação de sensores químicos e de deteção biológica com SPR, devido às suas características, que compreendem um conjunto de buracos de ar, ou qualquer outro meio, ao longo do seu comprimento.

Existem dois tipos de fibras microestruturadas: as fibras de cristal fotónico com condução por índice (*index guiding Photonic Crystal Fibres*– PCF) e fibras de banda fotónica proibida (*Photonic BandGap Fibres* – PBF). As primeiras são caracterizadas por utilizarem o princípio do índice de refração da bainha modificado, através dos buracos na bainha, e as segundas pela existência de bandas de energia proibidas, que confinam a luz no núcleo de ar. Na figura 2.14 são mostradas duas configurações típicas.

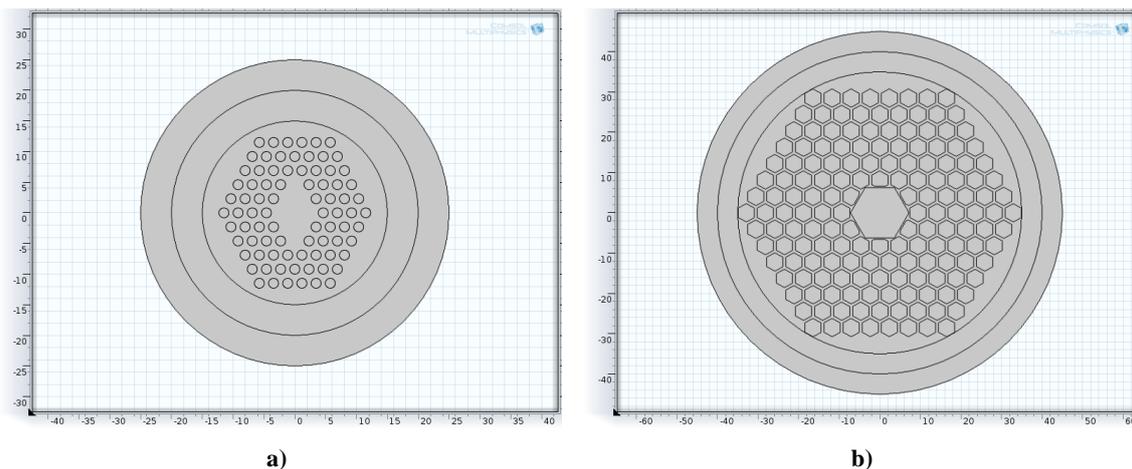


Figura 2.14 Configurações básicas de uma PCF a) *index guiding Photonic Crystal Fibres* b) *Photonic BandGap Fibres*.

A fibra de cristal fotónico é diferente da fibra ótica tradicional pois é construída por um só elemento, uma vez que o núcleo e a bainha não são dopadas. Para realizar o confinamento da luz na fibra no caso de *index guiding* (figura 2.14.a)) é preciso variar o índice de refração, e para isso são colocados buracos de ar na bainha da fibra, o que permite reduzir o índice de refração efetivo dessa zona. No caso das *photonic bandgap* (figura 2.14.b)) o funcionamento é baseado na propagação da luz com um determinado comprimento de onda numa zona da fibra e o seu desvanecimento noutra zona. Este fenómeno ocorre devido à banda proibida de fótons, criada pela estrutura de cristal fotónico da fibra, e permite a propagação da luz numa fibra ótica, através de um mecanismo diferente do mecanismo de reflexão interna total [19].

O efeito de confinamento da luz pode-se controlar através de diferentes parâmetros característicos, como o comprimento de onda, o aumento ou diminuição do número de buracos (que permitem alterar o índice de refração), ou através da forma do conjunto de buracos (de painel, triângulo, círculo, hexágono), posição dos buracos, distribuição periódica ou não periódica, a forma dos buracos, entre outros [19].

As PCFs são particularmente interessantes devido ao facto de apresentarem buracos na sua estrutura o que permite propagar a luz e líquidos no interior da PCF. Assim, é possível colocar uma quantidade de substâncias a monitorar, sejam elas, líquidas ou gasosas, de carácter químico ou biológicos, no núcleo ou perto do núcleo onde é transportada a luz. A aparição de novas tecnologias micro e nano estruturadas permitem colocar materiais dentro dos orifícios das fibras, como é o metal no caso dos

sensores SPR [44]. Por outro lado, é necessário efetuar estudos para determinar a quantidade do material que é colocada na PCF e como este pode afetar o seu funcionamento em função do comprimento de onda da luz. No entanto, a utilização de fibras PCF para este tipo de medidas apresenta a dificuldade de inserção do metal nos buracos, bem como o tempo de resposta do sensor, entre outras dificuldades [45, 46].

2.5. Sensibilidade nas configurações em SPR

A sensibilidade dos dispositivos está relacionada com a variação do comprimento de onda que é produzido por efeito do fenômeno da ressonância do plasmão de superfície, para diferentes índices de refração externo. Os parâmetros de excitação do SPR dependem de vários parâmetros como o comprimento de onda, a espessura do metal, índice de refração, o ângulo de incidência, configuração utilizada, entre outros. A expressão seguinte apresenta a sensibilidade de um sensor de índice de refração, interrogado em função do comprimento de onda [41]:

$$S = \frac{\Delta\lambda}{\Delta n_{ext}} \quad (2.26)$$

Normalmente, este tipo de configuração é caracterizado pela sensibilidade e/ou resolução, representadas em nm/RIU ou RIU, respectivamente. Na tabela 2.4 são apresentadas, de uma forma resumida, as características gerais dos sensores baseados em SPR e também a sua zona de detecção em termos de índice de refração (IR) e comprimento de onda [1].

Tabela 2.4 Características gerais de sensores de fibra ótica baseados em SPR [1].

Configuração	Características	Zona de detecção IR	Comprimento de onda	Sensibilidade/ Resolução	Ref.
Remoção da bainha					
• Metal único	MMF, <i>Au-Ag</i> película nano-partículas	1,342~1,346	400~800 nm	~3000 nm/RIU	[20]
	MMF, <i>Au</i> , superfície irregular	1,3335~1,4018	550~1000 nm	1600~3000 nm/RIU	[47]
	MMF, <i>Au</i>	1,33~1,40	670 nm	$2,5 \times 10^{-4}$ RIU	[33]
	MMF, Parâmetros Analises	1,333 e 1,339	400~900 nm	2266,7~2780,1 nm/RIU	[48]
• Multi-metal	<i>Au, Ag</i> doble camada, <i>Au-Ag</i> película nano-partículas			2500~3000 nm/RIU	[49]
• Multicamadas	MMF, <i>Au</i> , dielétrico multicamada (<i>SiO₂, TiO₂</i>)	1,333 e 1,336 1,001~1,313	450~950 nm	10^{-5} RIU	[50]
Fibra Cônica (Tapered)					
• Sem Bainha	MMF, <i>Au</i> , vários raios	1,333 e 1,335		2700~4900 nm/RIU	[38]
	MMF, <i>Au</i> , 2 raios cónicos	1,333~1,343	600~700 nm	2750~15000nm/RIU	[37]
• Com Bainha	SMF, <i>Au</i> , semicilindro, várias amplitudes	1,440~1,454	400~1700 nm	7×10^{-7} RIU	[51]
Fibra com corte D					
• Monomodo	SMF, Corte no núcleo	1,33~1,40	632,8 nm	8×10^{-5} RIU	[52]
• Multicamadas	SMF, Corte no núcleo, <i>Au</i> , multicamada <i>SiO₂</i>	1,332~1,40	632,8 nm	$2,5 \times 10^{-6}$ RIU (fase)	[21]
	SMF, Corte no núcleo, <i>Au</i> , multicamada <i>SiO₂</i>	1,33~1,40	632,8 nm	$2,5 \times 10^{-5}$ RIU	[9]
	SMF, com bainha, <i>Au</i> , multicamada <i>Ta₂O₅</i>	1,329~1,393	760~940 nm	5×10^{-7} RIU	[7]
	SMF, <i>Au, Al</i> espelho, multicamada <i>Ta₂O₅</i>	1,32~1,42	825 nm	4×10^{-5} RIU	[35]
	• Com Bainha	PMF, alienamento por polarização	1,33~1,339	700~900 nm	4×10^{-6} RIU
Modificação do fim da fibra					
• Ponta de fibra plana	MMF, espelho <i>Ag</i> no fim, <i>Au</i> .	1,333~1,346	400~840 nm	1557 nm/RIU	[39]

2.6. Análise de sensores de fibras óticas baseados em SPR

Existem vários trabalhos onde é analisado o comportamento das ondas eletromagnéticas no metal e o efeito que produzem tanto ao nível da propagação da luz no metal e na interface metal-dielétrico, como também, a forma como a intensidade do campo eletromagnético é alterada na fibra. Nesta secção serão explicados com maior detalhe dois métodos, sendo o primeiro baseado na lei de Fresnel [21], e o segundo o método da matriz para sistemas multicamadas [8]. Outros métodos serão também apresentados.

2.6.1. Cálculo do coeficiente de reflexão e de transmissão utilizado as equações de Fresnel

Utilizando o estudo realizado em [9, 21] pode-se criar um pequeno algoritmo em MatLab que permite obter uma aproximação dos valores finais do sensor baseado em SPR. O estudo normalmente é baseado numa fibra de tipo “D” como é apresentado na figura 2.15.a).

O estudo é feito através de uma aproximação da secção da fibra ótica para uma configuração planar, como é observado na figura 2.15.b), com o qual, e através das equações de Maxwell e das leis de Fresnel, se pode escrever o coeficiente de reflexão da polarização p (paralela à interface metal dielétrico) como é mostrado em seguida:

$$r_{1234} = \frac{r_{12} + r_{234}e^{j2k_m d_m}}{1 + r_{12}r_{234}e^{j2k_m d_m}} \quad (2.27)$$

onde r_{1234} é o coeficiente de reflexão para 4 camadas, k_m e d_m são a constante de propagação e a espessura do metal, respetivamente, e r_{234} é:

$$r_{234} = \frac{r_{23} + r_{34}e^{j2k_{cladd}d_{cladd}}}{1 + r_{23}r_{34}e^{j2k_{cladd}d_{cladd}}} \quad (2.28)$$

onde r_{234} é o coeficiente de reflexão para três camadas, k_{cladd} e d_{cladd} são a constante de propagação e a espessura da bainha, respetivamente. Por último, o coeficiente de reflexão de duas camadas é dado por:

$$r_{ij} = \frac{n_i^2/k_i - n_j^2/k_j}{n_i^2/k_i + n_j^2/k_j} \quad (2.29)$$

onde i e j variam entre 1, 2, 3 e 4, representados como o núcleo, bainha, metal, e dielétrico externo a estudar, respetivamente, para cada uma das interfaces. As constantes de propagação em cada camada são calculadas como:

$$k_i = k_0(n_i^2 - n_c^2 \sin^2 \theta)^{1/2} \quad (2.30)$$

onde $k_0 = 2\pi/\lambda_0$ é a onda numérico que opera no espaço livre e θ é o ângulo de incidência da primeira camada.

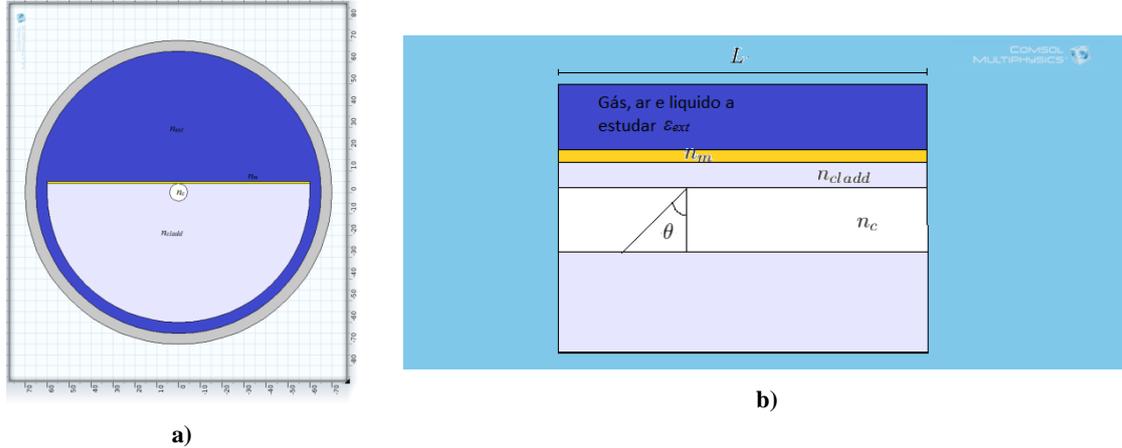


Figura 2.15 Configuração de fibra de tipo “D” de um sensor SPR, a) vista da secção, b) vista longitudinal para 4 camadas.

Os resultados apresentados na literatura [9, 21] são normalmente em função do coeficiente de reflexão, R , ou coeficiente de transmissão, T , que são dados pelas seguintes equações:

$$R = |r_{1234}|^2 \quad (2.31)$$

$$T(\lambda, n_{ext}, d_m) = R^{L/2r_c \tan \theta} \quad (2.32)$$

Note-se que o coeficiente de transmissão é definido como a razão entre a potência ótica de saída, da secção da fibra ótica em análise, pela potência ótica de entrada.

Como é observado na equação 2.32, o coeficiente de transmissão depende do comprimento de onda, do índice de refração externo e da espessura do metal. Por outro lado, e relativamente à propagação da luz na fibra ótica, o coeficiente de transmissão é dependente do comprimento de onda e dos índices de refração do núcleo e da bainha que também são dependentes do comprimento de onda. A relação entre o índice de

refração e o comprimento de onda é dado através da relação de Sellmeier, que pode ser escrita como:

$$n^2(\lambda) = 1 + \sum_{q=1}^3 \frac{B_q \lambda^2}{\lambda^2 - C_q^2} \quad (2.33)$$

onde B_q e C_q são as constantes de Sellmeier, que são valores experimentais dependentes do material [54]. Na tabela 2.5 estão representados os parâmetros da sílica dopada com germânio, para o núcleo, e da sílica dopada com flúor, para a bainha.

Tabela 2.5 Constantes de Sellmeier para a sílica pura, sílica dopada com germânio e sílica dopada com flúor [54].

Constantes de Sellmeier	Sílica	Dopada com germânio 4%	Dopada com flúor 1%
B_1	0,6968	0,6867	0,6911
C_1	0,06907	0,07268	0,06840
B_2	0,4082	0,4348	0,4079
C_2	0,1157	0,1151	0,1162
B_3	0,8908	0,8966	0,8975
C_3	9,901	10,00	9,896

Para calcular o índice de refração do metal, é utilizada a equação de Drude, como é mostrado na equação 2.15, e utilizam-se as constantes da tabela 2.2, sendo o índice de refração do metal dado pela equação seguinte:

$$n_m(\lambda) + jk_m(\lambda) = \sqrt{\varepsilon_m(\lambda)} \quad (2.34)$$

Além dos valores do índice de refração do metal, núcleo e bainha, em algumas configurações são realizados estudos onde é utilizada uma camada extra de dielétrico. Esta camada é usada para alterar a gama de operação do sensor ou a zona de excitação da SPW, como é mostrado em [50] que utiliza o dióxido de titânio (TiO_2) ou na referência [7] que utiliza o pentóxido de tântalo (Ta_2O_5). As equações que relacionam o índice de refração com o comprimento de onda para esses dielétricos são [7, 50]:

$$n_{TiO_2} = \sqrt{5,913 + \frac{0,2441}{\lambda^2 - 0,0843}} \quad (2.35)$$

$$n_{Ta_2O_5} = 1,878 + 178,9 \times 10^{-4}/\lambda^2 + 52,7 \times 10^{-5}/\lambda^4 \quad (2.36)$$

2.6.2. Cálculo do coeficiente de reflexão e de transmissão utilizando o método das matrizes para sistemas multicamadas.

Do mesmo modo que no método anterior, este método procura encontrar o módulo do coeficiente de reflexão com polarização p . O método é normalmente utilizado em configurações de SPR que têm várias camadas no sistema, como é mostrado na figura 2.16. Além disso permite realizar cálculos simples, precisos e não contempla aproximações [8].

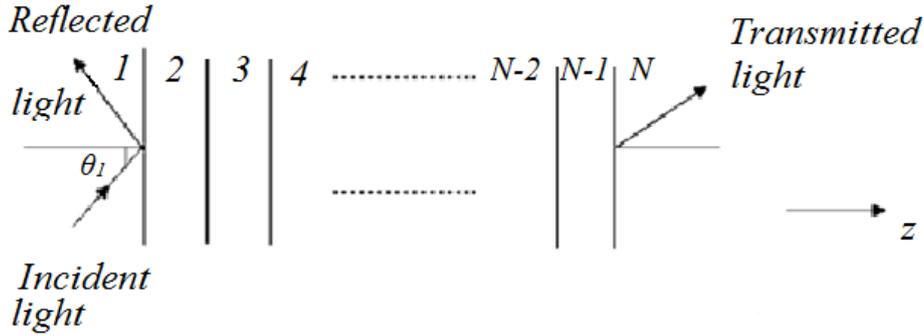


Figura 2.16 Modelo para o cálculo do coeficiente de reflexão com multicamadas [8].

O método consiste no estudo de uma configuração, como é observado na figura 2.16, onde as camadas são colocadas na direção do eixo z . Para cada camada é definida uma espessura, d_n , um índice de refração, n_n , e as constantes de permitividade e permeabilidade, ϵ_n , μ_n , respectivamente. A análise do campo eletromagnético é baseada nas reflexões da luz para cada camada, e utiliza as equações de Maxwell, às quais se aplicam as condições de fronteira, para cada uma das interfaces entre duas camadas. Nestas condições fronteira é imposto que a amplitude do campo eletromagnético para um modo harmónico com frequência ω . Os campos nessas camadas consecutivas podem ser relacionadas por:

$$\begin{bmatrix} E_1 \\ H_1 \end{bmatrix} = \mathbf{M} \times \begin{bmatrix} E_{N-1} \\ H_{N-1} \end{bmatrix} \quad (2.37)$$

onde E_n e H_n são o campo elétrico e magnético, respectivamente, e n representa o índice de cada camada (desde a primeira, 1, até à última camada menos 1 (N-1)). \mathbf{M} é a matriz de transferência que é definida como:

$$\mathbf{M} = \begin{bmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{bmatrix} = \prod_{n=2}^{N-1} \mathbf{M}_n = \prod_{n=2}^{N-1} \left(\begin{bmatrix} \cos \delta_n & (-i \sin \delta_n) / n_n \\ -i n_n \sin \delta_n & \cos \delta_n \end{bmatrix} \right) \quad (2.38)$$

onde δ_n é a fase introduzida em cada camada n , e que é dada por:

$$\delta_n = \frac{2\pi}{\lambda} n_n \cos \theta_n (z_n - z_{n-1}) = \frac{2\pi d_n}{\lambda} (\varepsilon_n - n_1^2 \sin^2 \theta_1)^{1/2} \quad (2.39)$$

onde n_n , ε_n e θ_n é o índice de refração, constante dielétrica relativa e ângulo de incidência para cada camada n , respetivamente, d_n é a espessura de cada uma das camadas ao longo do eixo z ($z_n - z_{n-1}$), θ_1 e n_1 é o ângulo de incidência e o índice de refração da primeira camada, respetivamente e λ é o comprimento de onda da luz que se propaga no sistema.

O parâmetro n_n^p é a admitância ótica e é definido em função da polarização. Como só existe excitação para a polarização p (ondas TM) nos sensores SPR é utilizada a seguinte equação:

$$n_n^p = \left(\frac{\mu_n}{\varepsilon_n}\right)^{1/2} \cos(\theta_n) = \frac{(\varepsilon_n - n_1^2 \sin^2 \theta_1)^{1/2}}{\varepsilon_n} \quad (2.40)$$

Por último, a amplitude do coeficiente de reflexão, r , neste sistema com múltiplas camadas é definida através do coeficiente de reflexão de Fresnel escrito em função de uma onda incidente na polarização p , dada pela seguinte equação:

$$r_p = \frac{(M_{11} + M_{12}n_N)n_0 - (M_{21} + M_{22}n_N)}{(M_{11} + M_{12}n_N)n_0 + (M_{21} + M_{22}n_N)} \quad (2.41)$$

O coeficiente de reflexão, R_p , com uma polarização p é escrito como:

$$R_p = |r_p|^2 \quad (2.42)$$

Finalmente para comparar com outros artigos estudados na literatura é utilizado o coeficiente de transmissão que chega ao final da zona sensora, como é mostrado na equação 2.32 [8].

2.6.3. Método de expansão e propagação

O Método de expansão e propagação (*Method expansion and propagation* – MEP) é um método mais complexo que o anterior e consiste principalmente em calcular a distribuição do campo elétrico ao longo do guia de onda do sensor. O MEP é o método normalmente utilizado para a análise de fibras óticas do tipo *side-polished* [7, 53]. Devido a essa configuração apresentar uma curvatura, divide-se a fibra em secções

ao longo da curvatura para se calcular a intensidade do campo para cada uma das secções e obter uma melhor aproximação da realidade, tal como é observado na figura 2.17. O método é explicado em [55].

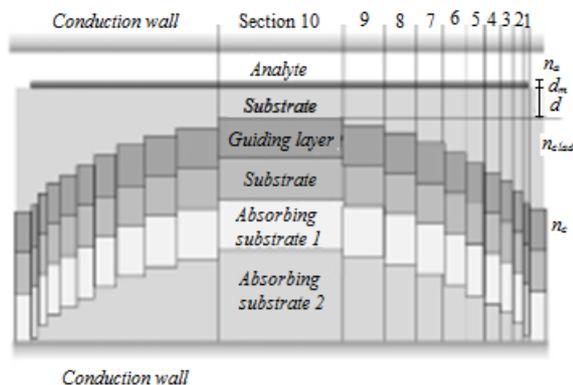


Figura 2.17 Estrutura equivalente de um guia de onda planar para a análise de um sensor SPR baseado em fibra ótica utilizado o MEP [53].

As camadas de absorção de substratos são utilizadas de modo a evitar as reflexões que são produzidas nessa direção. Existem outros trabalhos que também utilizam uma *Perfect Matched Layer* (PML) com o mesmo propósito [16]. No capítulo seguinte esta camada será objeto de explicação no âmbito da utilização do COMSOL Multiphysics [55].

2.6.4. Análise rigoroso do acoplamento de ondas

A análise rigoroso do acoplamento de ondas (*Rigorous coupled wave analysis – RCWA*) é utilizado em sensores SPR, podendo ser usado para analisar o que se passa numa placa metálica fina contínua, ou com uma estrutura fina não contínua, como é representado na figura 2.18. Este método permite aumentar a eficiência dos cálculos, melhorando a fiabilidade dos resultados em comparação com os algoritmos que permitem apenas considerar uma placa metálica contínua.

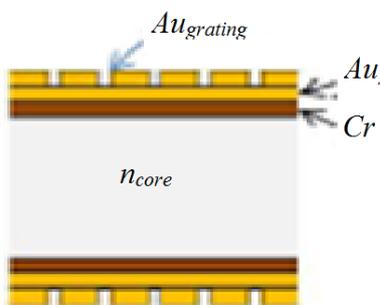


Figura 2.18 Sensor SPR com estrutura não contínua da camada de metal [56].

Ao estudar-se uma configuração de sensores deste tipo é preciso ter atenção que o método MEP não é muito eficiente (devido à quantidade de secções que são feitas ao longo da fibra, uma para cada degrau), fazendo com que o tempo de cálculo seja elevado [56].

2.6.5. Métodos computacionais

Com a aparição de novas tecnologias de micro- e nano- estruturas, os algoritmos explicados anteriormente, bem como os métodos anteriores não são boas aproximações pois não tomam em conta as complexidades das estruturas. Por isso são necessários algoritmos mais elaborados, capazes de implementar métodos numéricos para resolver as limitações dos algoritmos anteriores. Existem vários estudos sobre a aplicação de métodos numéricos poderosos para o estudo de sensores baseados em SPR, como por exemplo, o de diferenças finitas no domínio do tempo (*finite-difference time domain* – FDTD) [16] e o método dos elementos finitos (*finite element method* – FEM) [41]. Além de existirem vários estudos na literatura, também existem programas comerciais baseados nos dois métodos, como é SPR Nanolithography Simulation [57], e o COMSOL Multiphysics [58], entre outros.

A vantagem de se utilizarem métodos numéricos de análise é que estes permitirem resolver os problemas onde é importante a estrutura, quando este é micro- ou nano- estruturada. Nestes casos não se pode utilizar o método planar, o qual não é uma boa aproximação. Por outro lado, os métodos numéricos de análise possibilitam realizar estudos da intensidade dos campos elétricos e magnéticos em toda a estrutura, ter um ambiente gráfico, simulações em 3D, entre outras vantagens. A desvantagem deste tipo de sistema é o elevado consumo de memória de computação, o que leva a um tempo de processamento elevado.

Entre os dois tipos de métodos computacionais utilizados, o FDTD consiste na resolução de equações diferenciais parciais no domínio do tempo, sendo um método mais fácil de entender e mais utilizado para resolver problemas básicos. Por exemplo, para estruturas simples, o FDTD é mais fácil de implementar que o FEM. No entanto, o FEM procura uma solução aproximada das equações diferenciais parciais (*partial differential equations* – PDE) através da transformação da PDE numa equação equivalente que se possa resolver com um método mais básico como é o FDTD. A

resolução das PDE é baseada na construção de sub-elementos dentro da estrutura a estudar [16, 41]. Nessa estrutura, os cálculos das equações dos campos são representados discretamente num sistema de equações algébrico e são resolvidas pelos seus valores próprios. O FEM é mais utilizado quando se pretende variar a resolução em qualquer ponto do comprimento do objeto a estudar ou quando as PDE são muito complexas para resolver com outro método. O FEM foi escolhido como ferramenta para realizar o estudo porque, apesar de parecer um método de análise mais complexo, também permite resolver problemas variados na construção de novas configurações de sensores de fibra ótica baseadas em SPR.

2.7. Tipos de camadas

Existem vários estudos sobre a quantidade de camadas e materiais que são utilizados para realizar sensores em fibra ótica baseados em SPR. Nas configurações usuais de três ou quatro camadas (núcleo-bainha-metal-dielétrico externo, onde a bainha é por vezes eliminada) e também é observado que existem muitos estudos de sensores de SPR que usam o ouro e prata como metal para gerar o SPR.

A condição para que exista excitação do SPR é dada pela equação 2.25 que se pode escrever em função do índice de refração do dielétrico externo como:

$$k_{sp} = \frac{2\pi}{\lambda} \sqrt{\frac{\varepsilon_m(\lambda)n_{ext}^2}{\varepsilon_m(\lambda) + n_{ext}^2}} \quad (2.43)$$

onde n_{ext} é o índice de refração do dielétrico externo e ε_m é a constante dielétrica do metal que se pode separar na sua parte real e imaginária ($\varepsilon_m = \varepsilon'_m + j\varepsilon''_m$). A partir da equação 2.43 pode-se concluir que a condição para que exista a excitação da SPW é dada por:

$$\varepsilon'_m < -n_{ext}^2 \quad (2.44)$$

A condição anterior é verificada para metais como o ouro, que é o metal preferido para se construir este tipo de sensores.

Em 2007 Sharma *et al.* publicaram um trabalho onde foi realizado o estudo do comportamento de vários metais e a combinação dos mesmos [8]. Foi demonstrado que o ouro tem uma alta variação do comprimento de onda de ressonância, em resposta às mudanças do índice de refração externo e é quimicamente estável. Isto deve-se ao facto

do ouro ter uma constante dielétrica de metal, com uma parte real elevada, em comparação com a prata, além da vantagem que o ouro não oxida. Relativamente à prata, também existem vários trabalhos nos quais é demonstrado que ela tem uma curva de ressonância mais estreita, o que permite obter uma melhor resolução no sensor baseado em SPR, devido à parte imaginária da constante dielétrica do metal. Como a prata tem um valor da parte imaginária da constante dielétrica superior ao ouro é melhor, mas a parte real é menor podendo a condição da equação 2.44 não ser cumprida.

No trabalho apresentado em [8] também foi estudada a possibilidade de se utilizar outro tipo de materiais, como o alumínio, *Al*, e o cobre, *Cu*, mas que apresentam piores resultados que com o ouro ou prata, sendo que o alumínio é o que revela pior sensibilidade. Também foi estudada a combinação de materiais como é o caso de *Ag-Au* e *Cu-Au* que apresentaram melhor sensibilidade e menor sinal ruído para uma primeira camada é inferior à segunda. Outra configuração como, *Au-Al*, revela melhor sensibilidade e melhor relação sinal ruído (*Signal-to-noise ratio* – SNR) do que a camada apenas em ouro. Este estudo indicou que por isso existem várias combinações de metais que permitem obter uma melhor SNR e uma melhor sensibilidade ao índice de refração externo.

Também existem outros estudos com a utilização de uma camada extra de dielétrico, como *SiO₂*, *Ta₂O₅* e *TiO₂*, que são propostos em [7, 50], e onde é demonstrado que se pode alterar a zona de operação do sensor, mas que ao mesmo tempo, o aumento desta camada de dielétrico, diminui a sensibilidade.

3. COMSOL Multiphysics

Neste capítulo é descrito o COMSOL Multiphysics como ferramenta para a análise de problemas físicos, em particular para a resolução de problemas óticos associados à propagação de luz através de uma fibra ótica. Também são explicadas as configurações básicas utilizadas para o estudo dos SPR em fibra ótica e as ferramentas fornecidas pelo COMSOL para a análise dos resultados.

3.1. Modelos do COMSOL Multiphysics

A utilização do COMSOL Multiphysics permite uma manipulação mais simples das equações das derivadas parciais (PDE), através de modelos e programas onde se encontram implementadas as diferentes equações físicas e onde os utilizadores, através de uma interface, podem configurar e realizar as simulações pretendidas que são resolvidas através do FEM [58].

O COMSOL é uma ferramenta de simulação muito útil uma vez que combina vários processos físicos como a pressão, os movimentos dos fluidos, a teoria eletromagnética entre outros, sendo que em cada pacote existem diferentes condições fronteira, estudos, e equações, que permitem obter maior informação sobre o comportamento de uma determinada estrutura.

Alguns dos modelos físicos (*Physics Models*), como se pode ver na figura 3.1: apresentados pelo *COMSOL Multiphysics* são;

- ***AC/DC Module***: destinado ao estudo de eletromagnetismo em baixa frequência, como:
 - Eletrostática
 - Corrente elétrica
 - Campos magnéticos e elétricos
 - Circuitos elétricos
- ***Acoustics Module***: como o nome o indica refere-se ao estudo das ondas sonoras.
- ***Chemical Species Transport Module***: Permite observar e estudar os movimentos de componentes químicos.

- **Electrochemistry Module:** Refere-se ao estudo de componentes, como são as baterias, ou qualquer outro elemento que permita gerar energia elétrica a partir de uma reação química.
- **Heat Transfer Module:** Estudo da transferência de calor dos objetos, sólidos, líquidos e também permite estudar o efeito de Joule.
- **RF Module:** Módulo que permite estudar a rádio frequência, compreendendo parâmetros físicos para o estudo de campos magnéticos e elétricos em alta frequência, utilizando as equações de Maxwell.
- **Mathematics Module:** Neste módulo são apresentadas as PDE gerais, como a de *Laplace*, *Poisson*, onda, *Helmholtz*, entre outras, permitindo gerar um modelo físico mais personalizado, onde se podem definir as leis da Física para as propriedades de um material, as condições fronteira e as condições iniciais.

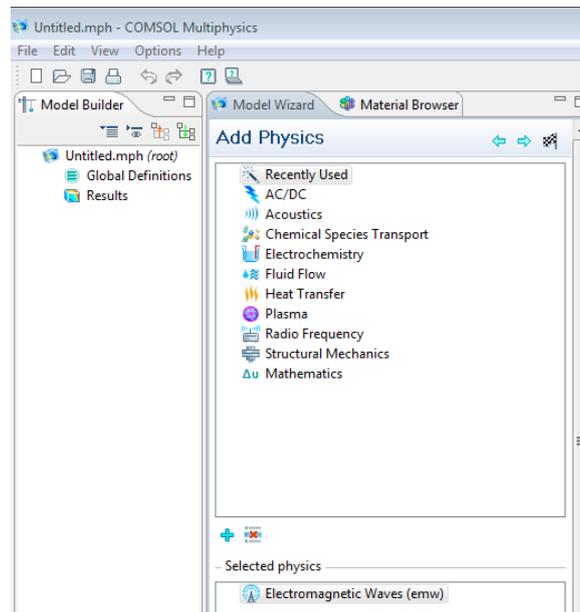


Figura 3.1 Módulos fornecidos pelo COMSOL Multiphysics.

O módulo que foi utilizado neste trabalho foi o módulo de rádio frequência.

3.2. Interface do COMSOL Multiphysics

Nesta secção pretende-se mostrar o funcionamento do programa, em particular no estudo dos campos eletromagnéticos em fibras óticas, com as janelas que são mostradas, os parâmetros físicos utilizados, os resultados apresentados, entre outros parâmetros.

O COMSOL Multiphysics é iniciado com o *Model Wizard*, o que nos permite escolher três parâmetros.

- **Dimensão do espaço:** Que possibilita a escolha das dimensões do objeto que se vai analisar. O COMSOL permite escolher entre zero e três dimensões para se realizar o estudo.
- **Modelo físico (*Physics*):** Como é observado na figura 3.1 pode-se escolher um dos módulos para o estudo físico do comportamento do objeto, neste caso foi utilizado o módulo de rádio frequência, em particular das ondas eletromagnéticas. No entanto, também se pode adicionar outro módulo como é, por exemplo, o da transferência de calor, permitindo ao mesmo tempo estudar como o objeto é afetado pelo efeito do aquecimento e pela onda eletromagnética.
- **Parâmetros de estudo (*Study*):** neste passo são escolhidos os estudos que se vão realizar sobre o objeto. O estudo depende dos parâmetros físicos escolhidos anteriormente e das equações matemáticas aplicadas. Na tabela 3.1 são mostrados alguns dos estudos existentes no COMSOL Multiphysics.

Neste trabalho estudou-se a componente física de ondas eletromagnéticas (*electromagnetic wave*). O estudo foi realizado a 2D, devido ao elevado tempo de processamento necessário para se utilizar o 3D. A simulação realizada foi a de análise de modos (*analyses modes*), que permite obter os modos que se propagam na fibra, sabendo o comprimento de onda da luz que se propaga na fibra ótica a estudar e qual o valor do índice de refração onde é propagada a luz.

Ao escolhem-se a dimensão, os parâmetros físicos e as simulações que se pretendem realizar, é mostrado o interface final onde serão construídos os elementos a simular, com os seus respetivos parâmetros de estudo, sendo possível, de imediato, observar o resultado, tal como é apresentado na figura 3.2.

Tabela 3.1 Parâmetros de estudo fornecidos pelo COMSOL Multiphysics.

TIPO DE ESTUDO	IDENTIFICADOR	DESCRIÇÃO
<i>AC Impedance Stationary e AC Impedance Time Dependent</i>		É uma técnica baseada na análise da corrente elétrica em resposta a pequenas variações do potencial elétrico, utilizada no estudo de baterias ou células eletroquímicas.
<i>Boundary Mode Analysis</i>		Análise de modo de fronteira. Permite estudar e combinar as condições fronteiras, por exemplo, de uma seção transversal de um guia de onda, com um estudo no domínio da frequência para a geometria completa. É utilizado para a determinação da constante de propagação que é possível para ondas perpendiculares e dos modos de fronteira. A equação que permite o estudo é: $E(r, t) = Re(E(r)e^{j\omega t - \alpha z}).$
<i>Eigenfrequency</i>		Similar ao estudo <i>Eigenvalue</i> (valores próprios) mas calcula as frequências próprias.
<i>Eigenvalue</i>		Este estudo utiliza uma formulação para calcular valores próprios ou vetores próprios utilizando um conjunto de equações.
<i>Empty Study</i>		Estudo vazio que inicialmente não tem nenhuma etapa de estudo.
<i>Frequency Domain</i>		Para o estudo no domínio das frequências.
<i>Frequency-Domain Modal</i>		Igual à análise anterior para os modos.
<i>Frequency Domain, Linearized</i>		Análise de um modelo no domínio da frequência dos desvios de um ponto de linearização.
<i>Frequency-Stationary</i>		Utilizado nas ondas eletromagnéticas e permite estudar a solução harmônica no tempo dos campos magnéticos.
<i>Frequency-Transient</i>		Utilizados nas ondas eletromagnéticas e permite estudar os harmônicos associados aos campos magnéticos
<i>Mode Analysis</i>		Calcula os modos de uma onda eletromagnética ou acústica mediante a determinação dos valores próprios.
<i>Stationary</i>		É realizado o estudo para uma situação estacionária no tempo, o que implica que as PDE em ordem ao tempo sejam iguais a 0.
<i>Time Dependent</i>		Como o nome indica é para a simulação de fenômenos dependentes do tempo ou transitórios.
<i>Time-Dependent Modal</i>		É utilizado para o estudo de problemas dependentes do tempo de uma onda que utiliza uma solução modal, o que implica a implementação de valores próprios em frequência para a resolução do estudo.

Como é apresentado na figura 3.2, o COMSOL Multiphysics é constituído por cinco janelas, sendo: a janela de construção do modelo, de configuração, de gráficos, de resultados e de ajuda.

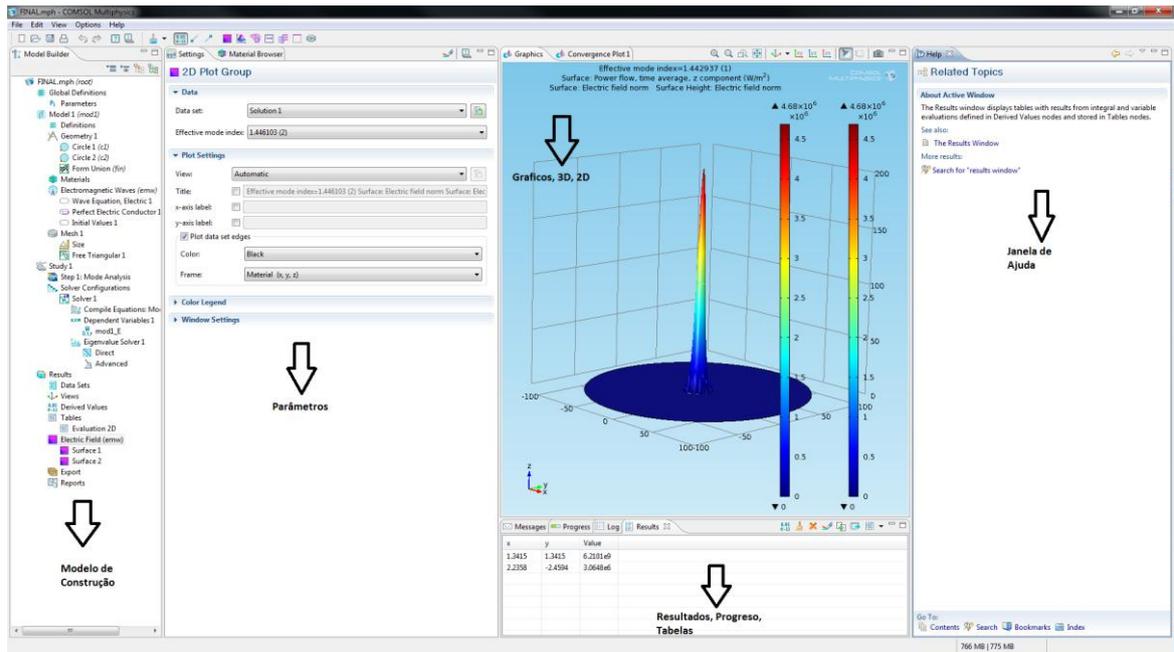


Figura 3.2 Interface do COMSOL Multiphysics.

A janela de construção do modelo (*Model Builder Window*) é a janela que permite configurar os modelos, os quais são representados em forma de árvore. Nos ramos principais aparecem os parâmetros de construção, de estudo, definições globais, resultados e depois nos ramos secundários surgem outras características que também se podem configurar, facilitando, desta maneira, o estudo completo do modelo.

Nas definições globais, é onde se podem definir as constantes, variáveis ou funções que serão utilizadas durante a simulação e que serão definidas pelo utilizador. No anexo B são apresentadas as variáveis e parâmetros usados neste estudo. As definições destas variáveis podem ser feitas também acrescentando a sua unidade, colocando esta entre parêntesis retos (como por exemplo, micrómetro é escrito [um]), e desta forma permitir ter resultados no valor e na unidade correta. Na geometria também é definida a unidade a utilizar, o que permite definir os parâmetros com ou sem unidade.

O modelo (*Model*): é onde se realiza a construção do modelo. É composto por cinco componentes principais:

- **Definições** (\equiv): onde são realizadas as configurações dos eixos a utilizar. Nele são definidos parâmetros como os valores máximos e mínimos dos eixos, da grelha (*grid*), se o estudo é para se efetuar em coordenadas cartesianas, cilíndricas ou esféricas, entre outros parâmetros.

- **Geometria** (

3.3. Radio frequência e ondas eletromagnéticas (*Radio frequency and electromagnetic waves*,)

O componente físico principal nesta simulação é a análise em rádio frequência (RF), fornecida pelo COMSOL Multiphysics, mas podem-se combinar outros componentes físicos de maneira a tornar o estudo mais real.

O pacote de RF fornecido pelo COMSOL Multiphysics permite o estudo de dois tipos de ondas: ondas eletromagnéticas transitórias (*Transient Electromagnetic Waves*) e ondas eletromagnéticas (*Electromagnetic Waves*). Neste trabalho, foram utilizados os elementos denominados apenas de ondas eletromagnéticas. Os elementos são utilizados para resolver problemas referentes a campos eletromagnéticos em regime estacionário de equação da onda, que só são validos para meios de transmissão lineares. Os parâmetros de estudo que são permitidos, para este caso, são:

- **Frequency Domain**: usado para a simulação de uma frequência ou de um conjunto de frequências.
- **Eigenfrequency**: é utilizado para procurar as frequências de ressonância e os seus valores próprios.

- **Mode analysis:** consiste no estudo das ondas transversais nos guias de ondas e linhas de transmissão sendo usado para determinar os modos de propagação permitidos. É só aplicado em estudos a duas dimensões.
- **Boundary mode analysis:** é semelhante ao *Mode analysis* mas é aplicado para condição fronteira e é utilizado nas simulações em 3D.

Na figura 3.3 são apresentados os diferentes parâmetros que permitem configurar o COMSOL Multiphysics e que corresponde a segunda janela de interface. Em seguida estes parâmetros são explicados em detalhe.

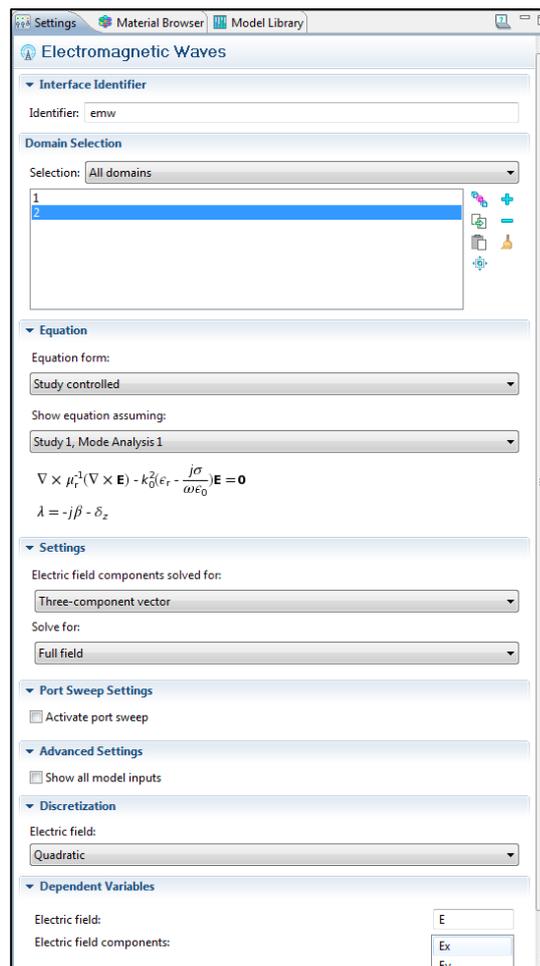


Figura 3.3 Interface de configuração da simulação das ondas eletromagnéticas.

Identificador (*Identifier*): idêntico a variáveis ou funções que são definidas noutras linguagens de computação, como Java ou C. É preciso definir um identificador (ID) para o componente físico, para se poder distinguir de outros componentes físicos que estejam definidos. Como o estudo físico escolhido foi o *Electromagnetic Waves*, o programa coloca como identificador “emw” de forma automática. Este identificador é

utilizado para fazer a chamada de um conjunto de variáveis referidas a ondas eletromagnéticas, que são mostradas no anexo B, uma vez que pode existir um conjunto de parâmetros físicos a funcionar simultaneamente. O ID permite saber que elemento físico é estudado e onde o programa tem que procurar as pertinentes variáveis e equações. De maneira geral para procurar as variáveis é utilizado o *identificador.variavel*. Por exemplo, para se saber o valor da constante de propagação (k) é utilizado “*emw.beta*”. No anexo B encontram-se descritas mais variáveis definidas no estudo físico das ondas eletromagnéticas.

Seleção de Domínio (*Domain Selection*): aqui podem-se escolher os domínios (as estruturas que compõem a secção da fibra a estudar) e elementos, onde vão ser aplicados os parâmetros de estudo.

Parâmetros (*Settings*): para duas dimensões, este são as componentes do campo elétrico e que podem resolver-se das seguintes maneiras:

- ***Three-component vector*:** é usado para determinar as três componentes do campo elétrico E . Foi utilizado neste trabalho.
- ***Out-of-plane vector*:** usado para determinar a componente campo vetorial elétrico perpendicular do ao plano de modelização, assumindo que não há campo elétrico no plano de modelização.
- ***In-plane vector*:** usado para determinar as componentes do vetor campo elétrico no plano de modelização, assumindo que não há campo elétrico perpendicular ao plano.

Equação (*Equation*): nesta parcela pode-se observar a equação ou as equações que regem o sistema. A equação a aplicar é dependente do estudo que é realizado, como é, a *Frequency Domain, mode analysis*, ou *boundary analysis*. Neste caso, a equação a estudar é baseada nas equações de Maxwell (equações 2.3-2.5), sendo as soluções que descrevem os campos estritamente monocromáticos da forma:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega)e^{-j\omega t} \quad (3.1)$$

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega)e^{-j\omega t} \quad (3.2)$$

onde ω é a frequência angular da luz. Esta representação do campo tem uma componente real e imaginária, onde a componente real corresponde aos campos físicos [59].

Num meio linear, isotrópico e não magnético são cumpridas as seguintes relações:

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}, t) = \varepsilon_0 \varepsilon_r \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) e^{-j\omega t} \quad (3.3)$$

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = \mu_0 \mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega) e^{-j\omega t} \quad (3.4)$$

onde ε_0 , e μ_0 são a permissividade e permeabilidade no vácuo, respetivamente, e ε_r representa o valor relativo da permissividade do material a estudar. Estas quantidades são geralmente expressa em coordenadas espaciais (x, y, z) . A partir da equação 2.3 e usando a equações 2.4, 3.1 e 3.3, obtém-se a equação de onda do campo elétrico em função das componentes de Fourier, que é a mesma que utiliza o COMSOL para realizar as simulações [59]:

$$\nabla \times (\nabla \times E(r, \omega) - k_0^2 [\tilde{\varepsilon}_r(r, \omega)] E(r, \omega)) = 0 \quad (3.5)$$

mas também é escrita, usando as equações 2.5, 2.9, 3.2 e 3.4, na expressão para se obterem os campos magnéticos

$$\nabla \times [\tilde{\varepsilon}_r(r, \omega)]^{-1} \nabla \times H(r, \omega) - k_0^2 H(r, \omega) = 0 \quad (3.6)$$

onde $k_0 = \omega c^{-1}$ é a onda numérico que opera no espaço livre e $c = 1/\sqrt{\varepsilon_0 \mu_0}$ é a velocidade da luz. O termo $\tilde{\varepsilon}_r(r, \omega) = \varepsilon_r(r, \omega) - j\sigma(r, \omega)/\omega\varepsilon_0$ representa a parte complexa da permissividade relativa que é dependente dos materiais que compõem a estrutura a estudar e $\sigma(r, \omega)$ representa a condutividade do material. No caso da fibra ótica convencional a permissividade é sempre real, mas neste trabalho é utilizado uma película metálica que gera uma parte imaginaria na permissividade.

Na fibra ótica, a dependência na coordenada espacial ao longo do eixo z obtém-se utilizando o método de separação de variáveis, ficando:

$$E_i(r, \omega) = E_i(r_{\perp}, \omega) e^{-j\omega k_i z} \quad (3.7)$$

$$H_i(r, \omega) = H_i(r_{\perp}, \omega) e^{-j\omega k_i z} \quad (3.8)$$

onde k_i é a constante de propagação para cada modo de propagação i , e r_{\perp} é o vetor de posição no plano perpendicular ao eixo da fibra ótica.

Port Sweep settings: permite ativar a função de *port sweep settings*, o qual possibilita a utilização de impedância ou de admitância para realizar o estudo de, por exemplo, linhas de transmissão.

Discretization: é o processo que transforma um sinal contínuo num sinal discreto. Pode ser um sinal de tipo linear, quadrático ou cúbico.

Variáveis dependentes (Dependent Variables): são as variáveis que definem o campo elétrico e os seus componentes. Pode-se alterar o nome do campo correspondente, mas os nomes dos campos e das variáveis devem ser únicos dentro do modelo.

Como pode ser observado na figura 3.4, os parâmetros são divididos em submenus, tais como: parâmetros de domínio, parâmetros para as condições fronteiras, pares, pontos e parâmetros globais (permitindo definir funções ou variáveis) que se podem acrescentar para realizar a simulação. A seguir, são explicados de forma breve os parâmetros utilizados.

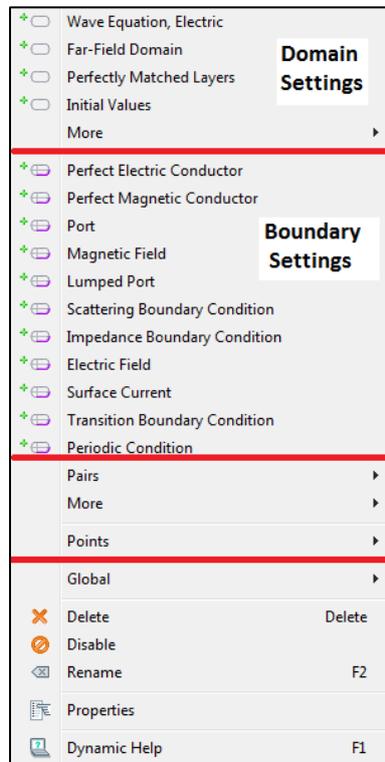


Figura 3.4 Características das ondas eletromagnéticas a estudar no COMSOL Multiphysics.

3.3.1. Módulo: *Wave equation, Electric*

Na escolha do modelo de estudo de ondas eletromagnéticas, a equação de onda é definida por defeito, a qual é baseada na equação 3.5. Esta equação permite simular situações onde o problema é o tempo harmónico ou a frequência própria (*eigenfrequency*).

Outra forma de escrever a equação 3.5 baseia-se no facto de a permitividade complexa relativa do material, $\tilde{\epsilon}_r$, estar relacionada com o índice de refração complexo, \tilde{n} , através de $\tilde{\epsilon}_r = \tilde{n}^2$. Assim, obtém-se que:

$$\nabla \times (\nabla \times E) - k_0^2 \tilde{n}^2 E = 0 \quad (3.9)$$

No COMSOL Multiphysics os parâmetros *de Boundary Domain* têm uma interface, como foi explicado anteriormente, para as ondas eletromagnéticas, apresentando os seguintes parâmetros:

Displacement field: campo de deslocamento, onde os modelos de estudo que caracterizam o fluxo do campo elétrico são definidos através de: permeabilidade relativa (μ_r), índice de refração complexo (\tilde{n}), perda tangencial, perda do dielétrico. Neste trabalho, foi escolhido o estudo através do índice de refração complexo uma vez que através do modelo de Drude podem-se descrever a constante dielétrica dos metais em reais e imaginários e, ao mesmo tempo, o índice de refração complexos.

Magnetic field: permite o estudo da relação entre a permeabilidade relativa e as perdas do campo magnético.

Conduction current: normalmente a condutividade elétrica é dada por σ (unidade no SI S/m) e é definida pelo material de que é feito o objeto. Também se pode definir, ou escolher, a resistividade linear, sendo que a condutividade é definida através de uma referência de temperatura T_{ref} (SI K), coeficiente de variação de resistência em função da temperatura α , (SI 1/K), e de uma referência de resistividade ρ_0 (SI $\Omega.m$).

3.3.2. *Perfectly Matched Layer (PML)*

O *software* COMSOL Multiphysics realiza cálculos através do método de elementos finitos, permitindo resolver problemas de análise de ondas eletromagnéticas. Uma desvantagem desta técnica é que para a aplicação na fibra ótica é necessário que as equações de Maxwell sejam resolvidas como uma equação finita, logo é necessário definir uma geometria equivalente que seja finita para determinar as características de

propagação. Para resolver esta dificuldade, utilizam-se as PML, que são capas absorventes especialmente estudadas para absorver ondas eletromagnéticas sem produzir reflexão.

No COMSOL, o módulo RF fornece outros dois métodos para resolver este problema: o *scattering boundary* (limite de espalhamento) e o *port boundary* (limite da porta), como é observado na figura 3.4. O primeiro é uma condição de dispersão de primeira ordem, absorvendo a condição de contorno para uma onda plana, cilíndrica ou esférica, enquanto a segunda é um condição perfeita para absorver os modos gerais de uma forma conhecida, na qual é preciso fornecer o modo correto de funcionamento e a constante de propagação. Os sistemas anteriores são utilizados quando é conhecido o valor do modo e da constante de propagação de uma antena ou fibra, mas quando se fala de um conjunto de variáveis, devido a muitos efeitos de dispersão e de problemas da antena ou da fibra (como por exemplo na PCF), é preciso utilizar outro método como é o PML.

Existem outras condições fronteiras, como é o caso do condutor elétrico perfeito, $n \times E = 0$, que é uma condição especial do campo elétrico que se estabelece como limite da componente tangencial do campo elétrico a zero. É utilizada para modelizar as perdas que existem numa superfície de metal.

3.4. Materiais (*Materials* 🌐)

Na equação de onda do campo elétrico é definido que o modelo de campo elétrico de deslocamento utiliza o índice de refração complexo, o que implica que quando é realizado o estudo dos materiais são requeridos os parâmetros de índice de refração real, n , e imaginário, k . Como é mostrado na figura 3.5 é preciso colocar valores para o índice refração real e imaginário para o funcionamento da simulação.

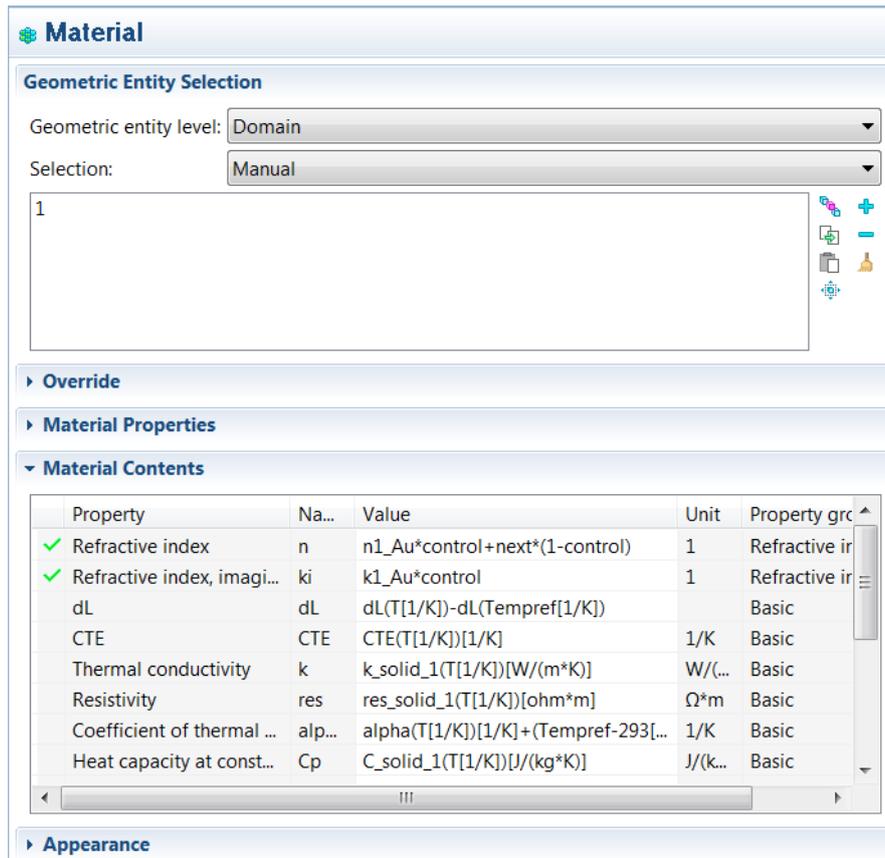


Figura 3.5 Parâmetros característicos do ouro.

Para os dielétricos, o índice de refração real é substituído pelas constantes de Sellmeier e o índice de refração imaginário é igualado a zero. Para os metais é utilizado o modelo de Drude para determinar os índices de refração real e imaginário. A parte imaginária é devida ao facto de que os metais não tem condutividade nula, ao contrário dos dielétricos. Na figura 3.5 é apresentada a configuração do ouro, onde se observam os vários parâmetros relativos ao ouro e que são fornecidos pelo COMSOL. Para a simulação neste trabalho, apenas são utilizados os dois primeiros parâmetros (índice de refração real e imaginários).

3.5. Grelha (*Mesh*)

Como é conhecido, o FEM consiste na definição de elementos finitos os quais são aplicados os algoritmos que permitem resolver ou aproximar as equações PDE. A definição da grelha, nomeadamente as dimensões, tamanhos fixos ou variáveis ao longo da estrutura a estudar, esta interferem no desempenho da simulação, quer do ponto de vista da solução, quer do ponto de vista da velocidade de processamento.

O COMSOL permite escolher entre duas geometrias para realizar o estudo: triangular e retangular em 2D e *Tetrahedral* e *Hexahedral* em 3D. Este trabalho foi realizado em 2D e escolheu-se como elemento a estudar, a forma triangular. Pela literatura conclui-se que esta forma é mais eficiente para criar elementos mais pequenos perto de curvaturas e de zonas onde existem mudanças bruscas de parâmetros (como por exemplo variação de índice de refração). O COMSOL permite ter um conjunto de algoritmos que ajuda a construir a grelha, como é observado na figura 3.6, e permite escolher a qualidade entre grelha extremamente fina ou grelha extremamente grossa.

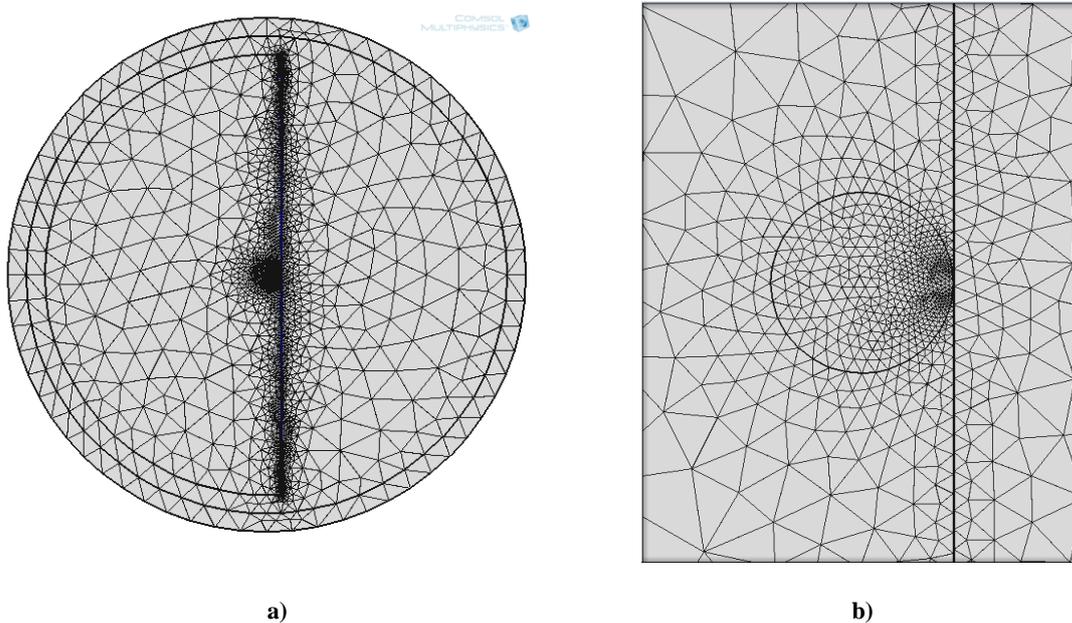


Figura 3.6 Exemplo do dimensionamento da grelha; a) fibra de tipo “D” b) detalhe do núcleo.

O COMSOL permite também alterar o dimensionamento da grelha de forma manual através dos parâmetros da grelha, tais como:

Tamanho máximo do elemento: parâmetro importante uma vez que para realizar o estudo da propagação da onda, num meio guiado, o tamanho do elemento do estudo tem que ser pelo menos 10 vezes inferior ao comprimento de onda de propagação da luz [60].

- **Tamanho mínimo do elemento:** este parâmetro é só alterado quando existem estruturas muito pequenas ou com muitas curvaturas e podem ter elementos muito pequenos. No entanto, pode aumentar o tempo de processamento de forma assinalável.

- **Taxa de crescimentos dos elementos:** este parâmetro define como é que os valores dos elementos (curvatura ou corte) são aumentados até se chegar à estrutura onde os elementos são maiores. Por exemplo, se é colocado o valor 1,50 implica que a estrutura em cada camada aumenta 50% relativamente à anterior.
- **Resolução de curvatura:** permite alterar a resolução de curvatura, ou seja, aumentar o número de elementos conforme a curvatura seja mais pequena ou diminuir o número de elementos conforme o valor da curvatura seja maior.
- **Resolução das regiões estreitas:** campo onde se pode alterar o número de camadas que são criadas nas zonas estreitas. Quando o valor é inferior a um, a grelha usada apresenta elementos anisotrópicos nesta região.

3.6. Estudo ou Simulação (*Study*)

Aqui é realizada a computação da simulação para se encontrarem os valores próprios da estrutura que é estudada. Neste campo é guardada a informação de tudo que é realizado no projeto, como a grelha criada, a geometria, os parâmetros físicos a estudar, materiais, entre outros.

Nesta área também se encontra a configuração da solução onde são definidos alguns parâmetros, tais como:

- **Variáveis dependentes:** onde se tem informação de como a solução é implementada, como, por exemplo, se cada nova solução é inicializada em zero ou é utilizada uma equação para inicializar, entre outras possibilidades.
- **Valores próprios:** Aqui é definido o tipo de estudo realizado (ver tabela 3.1), que para o caso de se usar o estudo *Mode Analysis*, apresenta parâmetros, tais como: o número de modos que são estudados, a máxima tolerância de erro ou parâmetro de convergência ou índice de refração efetivo. A procura das soluções dos valores próprios do sistema pode ser feita através dos seguintes métodos:
 - Direto: que utiliza o algoritmo como são o MUMPS (*MUltifrontal Massively Parallel sparse direct Solver*), PARDISO, ou SPOOLES para resolver o sistema linear. Estes sistemas lineares são do tipo $Ax=B$ e o programa usa a fatorização em matrizes L e U (*Lower-Upper*), que é a fatorização de uma matriz como o produto de uma matriz triangular

inferior com uma superior, aplicada na matriz A para encontrar as soluções de x . É utilizado um algoritmo de pré ordenamento de forma a reduzir o número de elementos diferentes de zeros nas matrizes L e U. Todos os solucionadores anteriores permitem utilizar o paralelismo de memória partilhada (exemplo de computadores com *multicores*). O MUMPS e o SPOOLES são utilizados quando o COMSOL é executado em modo distribuído (por exemplo, usando *clusters*). O MUMPS e o PARDISO têm uma opção que permite guardar a informação das matrizes L e U no disco rígido e deixar a memória interna livre para outros cálculos, o que faz aumentar o tempo de execução. Neste trabalho foi utilizado o MUMPS.

- Iterativo: resolução do problema através de um conjunto de iterações, sendo possíveis vários métodos. Este método é utilizado nas simulações 3D uma vez que diminui o tempo de processamento.

Neste trabalho, os parâmetros anteriores são colocados por *default* pelo COMSOL.

Na simulação é possível acrescentar outro bloco conhecido como varrimento paramétrico (*Parametric Sweep*) que permite escolher um parâmetro ou vários que depois são variados de acordo com as necessidades. A figura 3.7 apresenta um exemplo da configuração do parâmetro de varrimento, na qual a variável *control* pode ter os valores de 1 ou 0 correspondendo à existência ou não de metal, respetivamente (0 – não existe metal, 1 – existe metal).

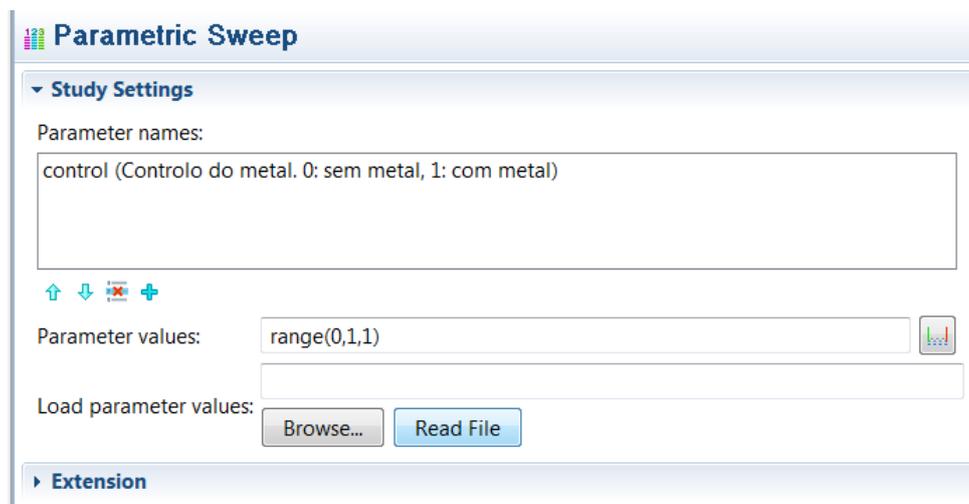


Figura 3.7 Configuração do parâmetro de varrimento.

Neste trabalho foi utilizado o modo de *Mode Analysis* no qual se podem escolher ou alterar vários parâmetros do estudo, como é observado na figura 3.8. Os parâmetros são:

- **Números de modos:** neste campo é definido o número de modos que são procurados no guia de onda (fibra ótica).
- **Procura de modos em redor:** parâmetro que assinala o meio onde viajam os modos. Por exemplo, numa fibra ótica é definido o valor do índice de refração do núcleo, uma vez que será o meio onde a luz irá viajar. Na figura 3.8 é colocada a equação de Sellmeier neste parâmetro. Na simulação de propagação de luz nas fibras PCF no COMSOL há que ter cuidado pelo facto do núcleo e da bainha serem definidos com o mesmo material (sem dopagem, ao contrário de uma fibra convencional), o que pode trazer propagação de luz fora do núcleo. Para resolver este problema pode diminuir-se o tamanho da bainha ou otimizar o número de elementos de maneira a que o COMSOL considere o núcleo como zona onde é propagada a luz.
- **Transformação:** parâmetro que indica o valor em que pode ser expressados os resultados dos valores próprios. Como é observado na figura 3.8, é escolhido o índice de refração efetivo, mas pode-se escolher este parâmetro para retornar o número de onda (*wave number*).
- **Frequência de análise dos modos:** neste parâmetro é definida a frequência que é propagada no interior do guia de onda.

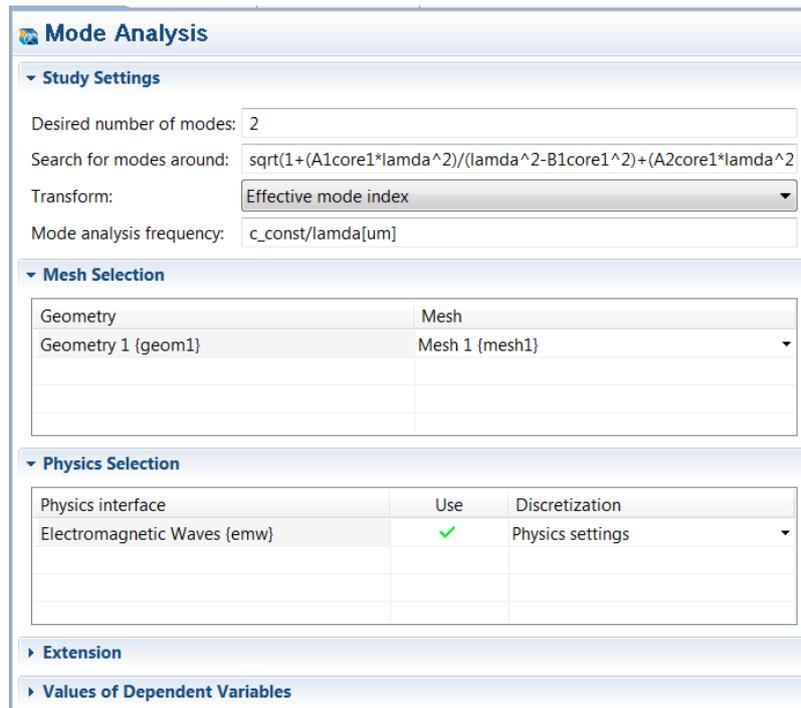


Figura 3.8 Parâmetros e configuração do estudo baseado na análise de modos.

3.7. Resultados (Results)

O COMSOL permite mostrar os resultados através de uma variedade de gráficos, entre os quais se tem 1D, 2D, 3D e polar, e nos quais se podem realizar cortes para observar o campo elétrico, magnético, em cada uma das componentes ou em amplitude (ex: *electric field norm*), potência, energia, frequência angular, frequência angular complexa, atenuação, índice de refração eficaz (n_{eff}), entre outros (ver anexo B), que são medidos globalmente ou que podem ser medidos num ponto particular da estrutura. É possível gerar tabelas onde são guardados os resultados, para trabalhos futuros no COMSOL ou que possam ser exportados para ser trabalhados noutros programas. As soluções são representadas com diferentes cores, dimensões, entre outras opções, facilitando a visualização, como, por exemplo, indicando através de setas a direção de polarização do campo. Por último, é possível realizar animações das várias soluções para se observar melhor o comportamento conforme um parâmetro vai mudando. Na figura 3.9 apresenta-se um resultado onde são mostrados vários parâmetros.

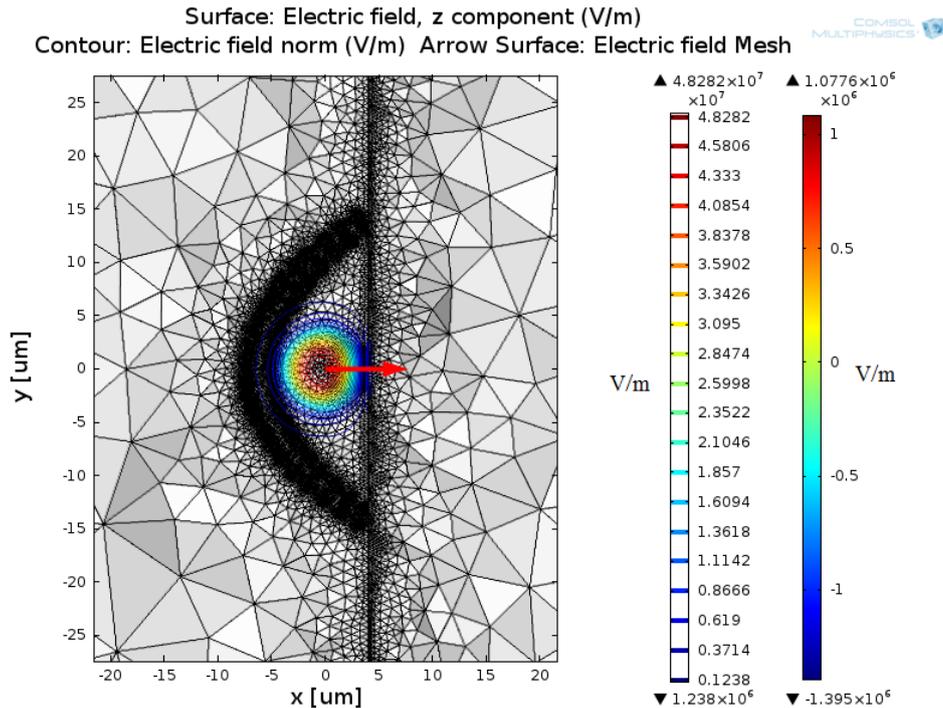


Figura 3.9 Resultados da simulação do COMSOL de uma fibra tipo “D”, com buracos ao redor do núcleo e com geração de SPR, onde é mostrada a amplitude do campo elétrico (*contour*) e da componente z do campo elétrico (*surface*) em V/m, o dimensionamento da grelha utilizada (cinzento) e a direção do modo TE (seta a vermelho no centro).

Em resumo, o COMSOL Multiphysics é uma ferramenta que permite realizar vários estudos para diferentes modelos físicos, o que permite obter resultados mais completos. A utilização de um ambiente gráfico permite facilitar a criação de novas configurações com resultados bastante exatos e precisos. O preço a pagar é o tempo de processamento elevado. O COMSOL apresenta também uma quantidade de variáveis ou equações definidas para cada modelo físico, o que permite determinar o campo elétrico, magnético, índice de refração, comprimento de onda, índice de refração eficaz, constante de propagação, entre outros, como é mostrado no anexo B.

A facilidade de mostrar os resultados através de gráficos em 1D, 2D e 3D permite observar e analisar parâmetros como a variação da intensidade do campo elétrico e magnético, entre outros, e assim obter a maior quantidade de informação possível.

4. Procedimento e análise de resultados

A fase mais importante no desenvolvimento de uma aplicação informática é a sua validação. Neste capítulo serão mostrados os resultados obtidos com o COMSOL Multiphysics, versão 4.2a, para o estudo dos modos de propagação em diferentes fibras e também para o desempenho como sensor de índice de refração baseado em SPR. Em seguida estes resultados são comparados com os resultados obtidos através de aproximações feitas às expressões matemáticas baseadas nas equações de Fresnel e pelos conhecimentos teóricos do comportamento da luz na fibra ótica, permitindo assim a validação da ferramenta desenvolvida.

4.1. Modos de propagação de uma fibra mono e multimodo

Numa primeira aproximação do bom funcionamento do COMSOL Multiphysics realizou-se o estudo dos modos numa fibra mono e multimodo, para verificar o comportamento básico de propagação da luz na fibra.

Neste tipo de análise foi utilizado o estudo de *Mode Analysis*, que foi descrito no capítulo anterior, sendo o índice refração efetivo o parâmetro a estudar. Assim, foram procurados os vários modos que são propagados em duas fibras, como é mostrado na figura 4.1, sendo que na figura 4.1a) está representada uma fibra monomodo e na figura 4.1b) é mostrada uma fibra multimodo.

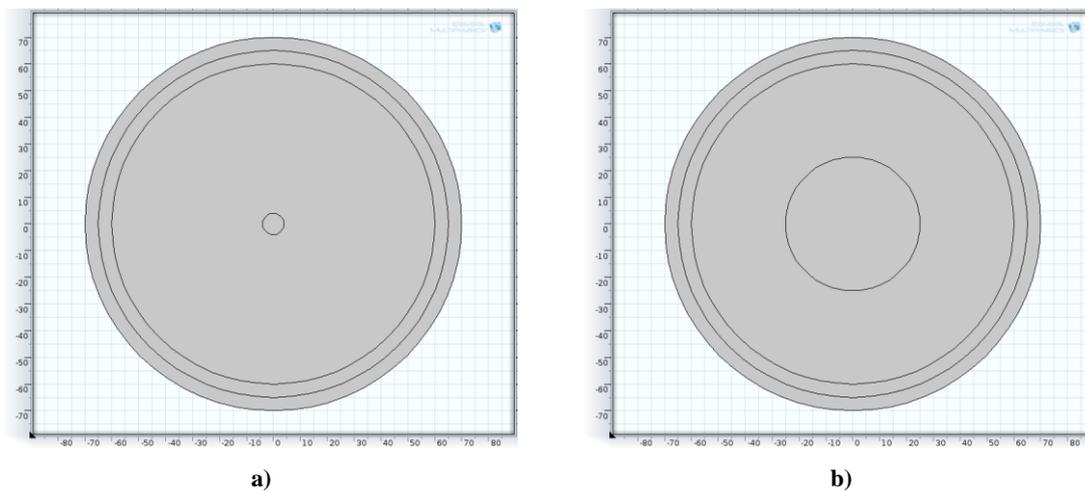


Figura 4.1 Representação do modelo de fibra ótica convencional implementado no COMSOL: a) monomodo b) multimodo.

Os materiais utilizados foram a sílica dopada com germânio no núcleo ($n_c = 1,4443$), a sílica dopada com flúor na bainha ($n_{clad} = 1,4378$), e o ar ($n_{ext} = 1$), nas duas camadas mais externas (1ª camada - meio a estudar e 2ª camada - PML) o que dá uma abertura numérica de $NA = 0,13$. Foi utilizada uma PML na camada mais externa para evitar reflexões. O núcleo da fibra monomodo tem um raio de $4 \mu\text{m}$ e na multimodo o raio é de $25 \mu\text{m}$, valores que são típicos para estes tipos de fibra. O comprimento de onda de funcionamento utilizado foi de 1550 nm . Com os parâmetros anteriores e utilizando a equação 2.9 resultam valores de frequência normalizada de $V = 2,23246$ e $V = 13,952890$, para a fibra monomodo e multimodo, respetivamente. Estes valores são calculados no COMSOL através da seguinte equação:

$$k_0 * a * \sqrt{(n_c^2 - n_{clad}^2)} = k * a * \frac{\sqrt{(n_c^2 - n_{clad}^2)}}{n_{eff}} \quad (4.1)$$

onde, k_0 é a onda numérico que opera no espaço livre, k é a constante de propagação, n_{eff} é o índice de refração efetivo, a é o raio do núcleo e n_c e n_{clad} são os índices de refração do núcleo e da bainha, respetivamente. É realizada a computação da análise de modos, para pelo menos 10 modos (demora cerca de $\sim 30\text{s}$) e os resultados são mostrados num gráfico em 2D e 1D.

Na figura 4.2 apresentam-se os resultados da componente z e da amplitude do campo elétrico para a fibra monomodo. Neste caso é observado que existem várias possibilidades de apresentar os resultados: o modo fundamental propagando-se na fibra (figura 4.2.a)), que também pode ser apresentado no modo TM (figura 4.2.b)) e no modo TE (figura 4.2.c)) e por último, o conjunto dos modos é mostrado na figura 4.2.d).

Como é observado na figura 4.2.d), o modo fundamental ou os modos TM e TE são propagados no núcleo da fibra, existindo um pequeno campo evanescente a ser propagado na bainha. Os restantes modos têm uma intensidade do campo elétrico baixa no núcleo e logo uma elevada intensidade na bainha, o que não corresponde à realidade. Pela literatura sabe-se que o índice refração efetivo, n_{eff} , pode tomar valores entre o índice do núcleo e da bainha ($n_{clad} < n_{eff} < n_{core}$), pelo que se pode concluir que modos com índice de refração efetivo fora desse intervalo são soluções erradas, como é observado na figura 4.2.d). O que implica que, tal como é de esperar num método computacional, é preciso estudar as soluções obtidas pelo COMSOL [54].

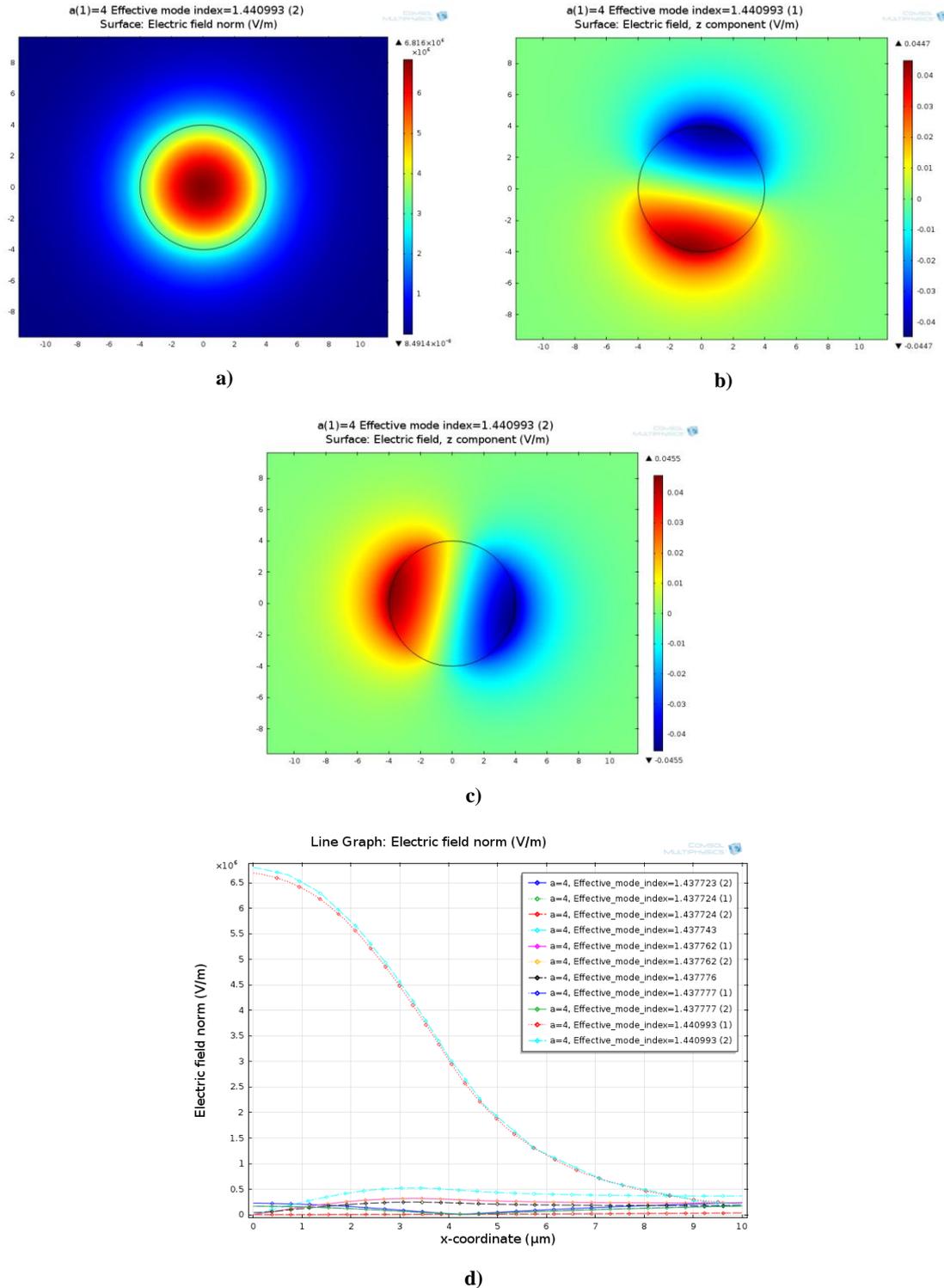


Figura 4.2 Modos da fibra ótica monomodo: a) o modo fundamental propagando-se na fibra b) modo TM, c) modo TE e d) modos propagados na fibra num gráfico 1D.

Realizando o mesmo estudo para uma fibra multimodo, determina-se um conjunto de modos próprios de propagação da fibra, como é mostrado na figura 4.3. Este conjunto engloba o modo LP_{11} (figura 4.3.a)), o modo LP_{31} (figura 4.3.b)), o modo

LP₂₂ (figura 4.3.c)) e o modo LP₂₁ (figura 4.3.d)) e, conjunto dos modos, são mostrados na figura 4.3.e). Como é observado na figura 4.3.e), os vários modos propagam-se na fibra sem campo evanescente elevado na bainha.

Também é observado que o índice de refração do meio externo, n_{ext} , não afeta significativamente a estrutura dos modos, devido à separação que existe entre a bainha e o meio externo e como a ideia deste trabalho é conseguir aumentar o campo evanescente que atua sobre o meio externo para poder criar sensores de índice de refração externo. Daqui decore a necessidade de utilizar novas estruturas, as quais geram uma forte dependência dos modos de propagação da luz nas propriedades óticas do meio externo (n_{ext}).

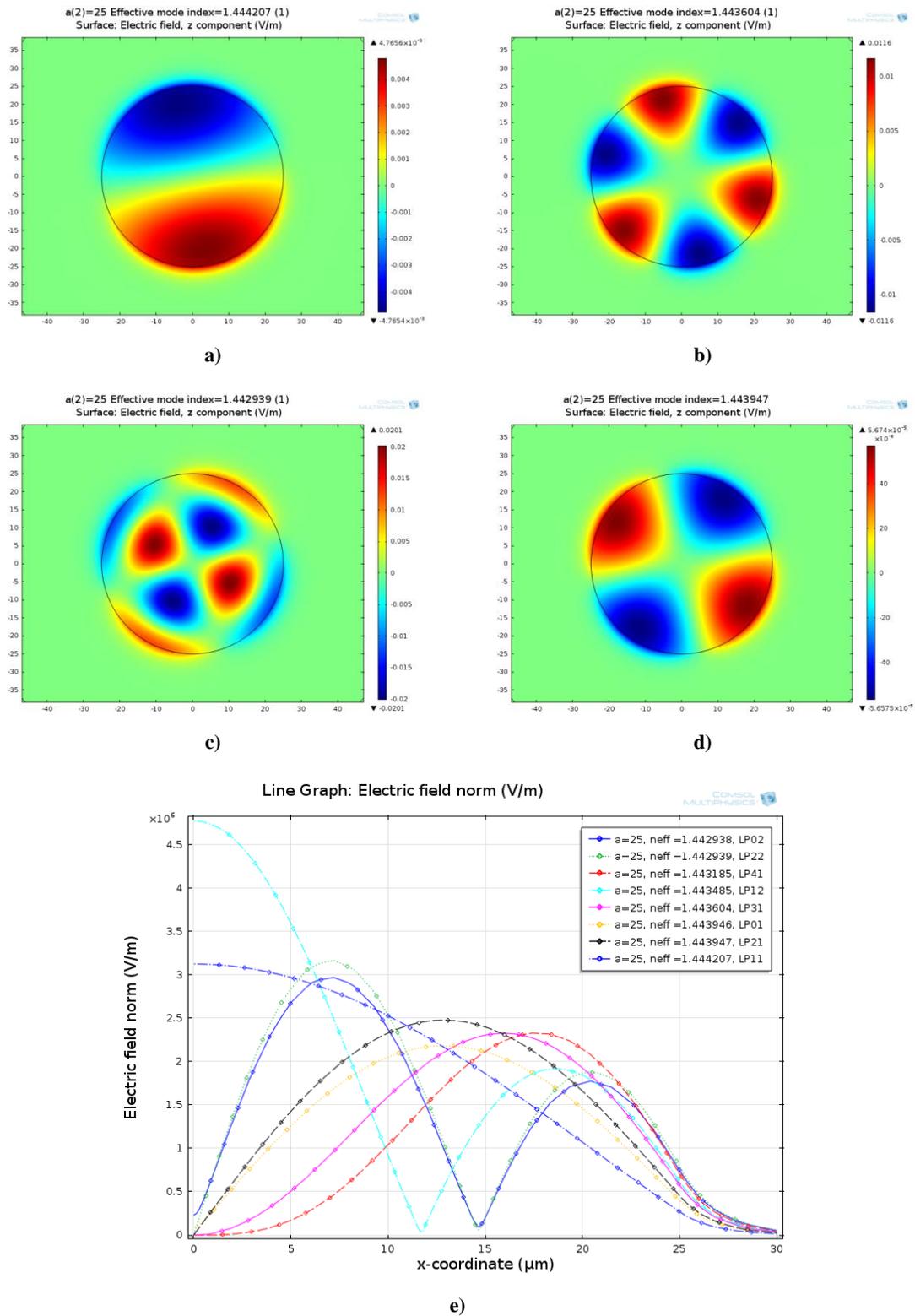


Figura 4.3 Modos da fibra ótica multimodo: a) o modo LP₁₁; b) modo LP₃₁; c) modo LP₂₂; d) modo LP₂₁ e e) modos propagados na fibra num gráfico 1D.

4.2. Modos de propagação de uma *index guiding* PCF

Para realizar o estudo da propagação da luz numa fibra de cristal fotônico no COMSOL é utilizada uma configuração como é mostrada na figura 4.4.a). Neste tipo de configuração pode ocorrer um problema no cálculo dos modos de propagação, devido à escolha menos adequada do parâmetro de procura dos modos, permitindo que o programa encontre soluções erradas. Nesta situação, a luz é propagada na bainha e não no centro do núcleo. Uma solução encontrada para evitar esse erro passa por reduzir o tamanho da bainha até aos extremos dos buracos, fazendo com que o COMSOL encontre modos de propagação no centro da fibra ótica.

Outro problema neste tipo de configuração é a escolha da grelha dos elementos finitos que são aplicados na estrutura. Para calcular corretamente o campo na região dos buracos é necessário que as grelhas dos elementos finitos nesta região sejam mais reduzidos, o que aumenta a complexidade computacional, além de fornecer soluções para o campo que não correspondem à situação real, mas aos artificios dos cálculos.

A qualidade e validade dos resultados numéricos é fortemente dependente da grelha de elementos finitos utilizada. A sua escolha depende do equilíbrio de dois fatores:

1. Redução do erro numérico devido a arredondamentos e respetiva propagação durante o cálculo, que é obtida para grelhas com menos elementos (logo elementos maiores) o que reduz o número de cálculos a fazer durante as simulações;
2. Redução do erro metodológico associado ao método dos elementos finitos, que é obtida usando uma maior amostragem do campo, o que exige grelhas com mais elementos. No entanto, há desvantagens em escolher grelhas com muitos elementos pois tal aumenta a complexidade das simulações, exigindo mais recursos computacionais e tornando os tempos de cálculo muito mais longos.

O equilíbrio entre estas duas fontes de erro (numérico e metodológico) é conseguido escolhendo grelhas onde há uma amostragem mais densa do campo (logo com elementos finitos de menor dimensão) nas zonas onde o campo tem maiores variações e baixando a amostragem nas zonas onde o campo é aproximadamente constante ou nulo. Esta adequação da grelha ao dispositivo a estudar é feita por

tentativas sucessivas, que procuram adequar a grelha à distribuição do campo obtido nas tentativas anteriores até se obter uma convergência dos resultados. Note-se que, por estas razões, as grelhas adequadas para um *design* do dispositivo não o são necessariamente ideais para outra configuração, quer de geometria, quer de materiais e índices de refração. A estrutura da malha utilizada é mostrada na figura 4.4.b).

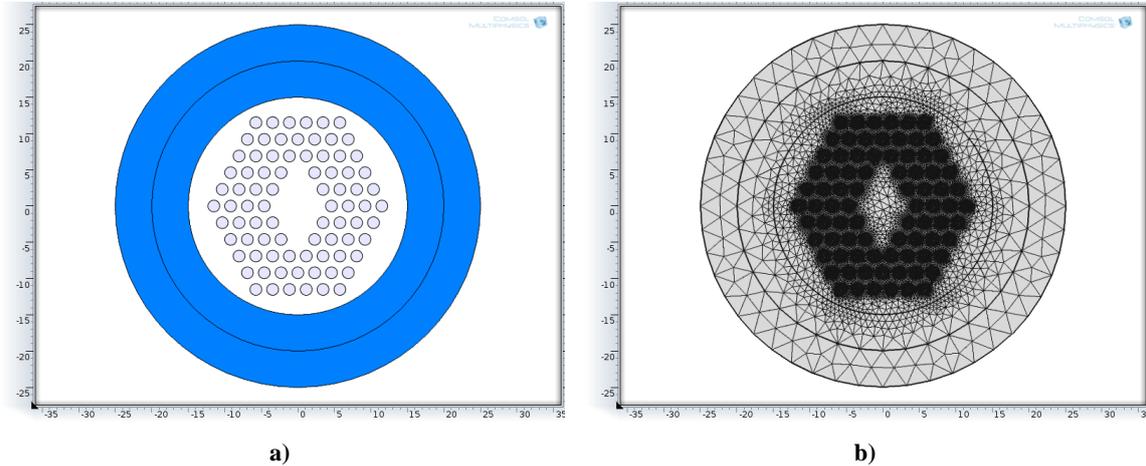


Figura 4.4 a) Estrutura básica de uma PCF b) malha utilizada para o estudo dos elementos finitos.

A configuração da PCF utilizada é a mostrada na figura 4.4.a) sendo que a distância entre os buracos é $\Lambda = 2,3 \mu m$ e o diâmetro dos buracos de ar é $d_{hole} = 1,61 \mu m$, que corresponde às configurações básicas deste tipo de fibra [61].

A análise dos modos para um comprimento de onda de 1550 nm e índice de refração para o vidro constituinte da bainha de $n_{clad} = 1,442$, obtido através das equações de Sellmeier, produz o resultado representado na figura 4.5.

Tal como numa fibra monomodo, a luz é propagada no centro da fibra independentemente do índice de refração do meio externo. Por outro lado, devido aos buracos serem colocados de forma assimétrica, é gerada uma pequena birrefringência entre a propagação da luz nos eixos x e y . A birrefringência é conhecida como a diferença que existe entre o índice de refração efetivo ao longo do eixo rápido, neste caso o y (n_y), e o índice de refração efetivo ao longo do eixo lento, eixo x (n_x), e é definida em [62] como:

$$\beta = |n_y - n_x| \quad (4.2)$$

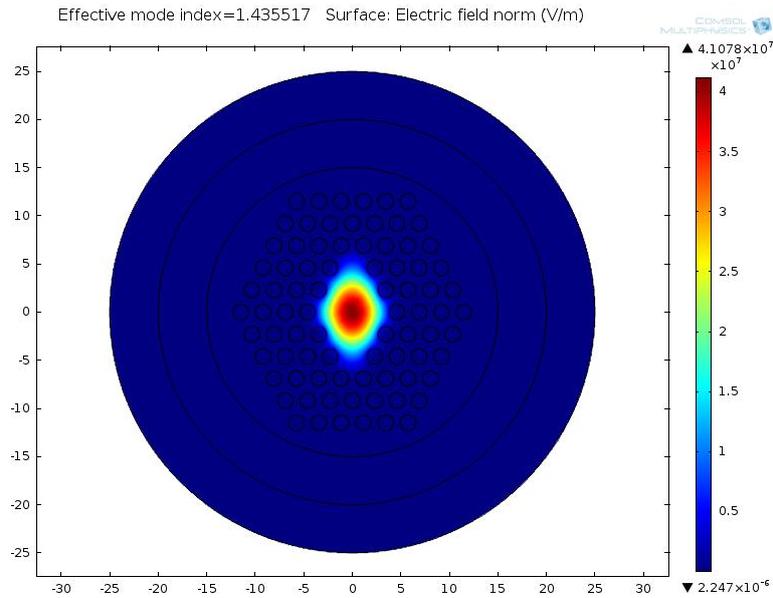


Figura 4.5 Resultado da computação da análise dos modos no COMSOL Multiphysics para uma fibra PCF.

Aplicando a equação 4.2, para os resultados obtidos da simulação do COMSOL para o índice de refração efetivo do eixo rápido e lento, obtém-se um valor de birrefringência de $\beta = 1,38 \times 10^{-4}$, que é um valor pequeno em comparação ao obtido em [63]. Nesta referência é realizado o estudo das PCF para se obter uma elevada birrefringência, aumentando a assimetria entre os buracos da PCF.

Para um sensor ser capaz de detetar alterações do índice de refração do meio externo é preciso alterar a estrutura da fibra de forma que os parâmetros de transmissão mudem conforme a alteração do meio externo. Para isso, uma opção seria colocar o meio de análise dentro dos buracos da PCF, ou então tão próximo quando possível da zona de propagação da luz na fibra. Uma solução para este objetivo é apresentada na secção seguinte.

4.3. Modos de propagação de uma fibra de tipo “D”

Para resolver o problema da interação do meio externo com a luz que viaja no núcleo, é utilizada uma fibra de tipo “D”, como uma primeira aproximação. De facto, existem vários trabalhos de sensores de índice de refração com fibras de tipo “D” e nos quais é observado que a intensidade do campo elétrico é afetada pelo meio externo [29].

A simulação da propagação da luz numa fibra de tipo “D” é baseada no mesmo método utilizado nas fibras monomodo, mas considerando o perfil da secção da fibra representado na figura 4.6.

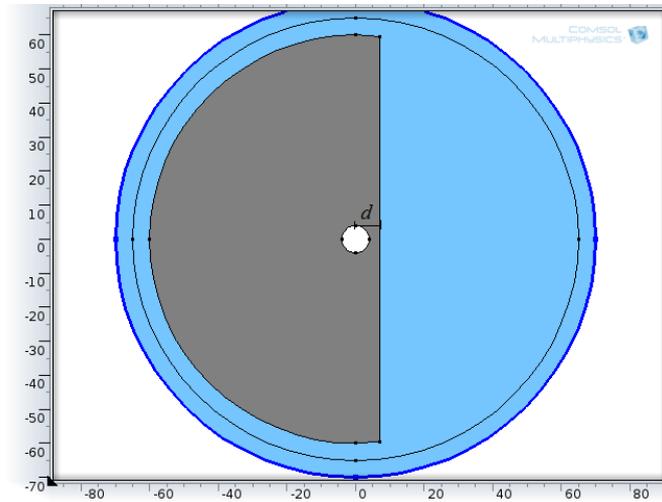


Figura 4.6 Configuração de uma fibra de tipo “D” convencional.

Considerando que o meio externo só tem valores de índice de refração inferiores ao valor máximo do índice de refração na bainha, a luz é fortemente concentrada no núcleo, logo obtêm-se dois modos de propagação (TE e TM), correspondentes à quebra de simetria da fibra e ao levantamento da degenerescência associada à polarização da luz. A simulação é feita usando os parâmetros da fibra monomodo e é definida uma distância de $d = 5 \mu\text{m}$.

Os resultados obtidos são representados na figura 4.7, onde existe uma componente E_z que é propagada ao longo do eixo x (figura 4.7.a)) e outra componente E_z que é propagada ao longo do eixo y (figura 4.7.b)).

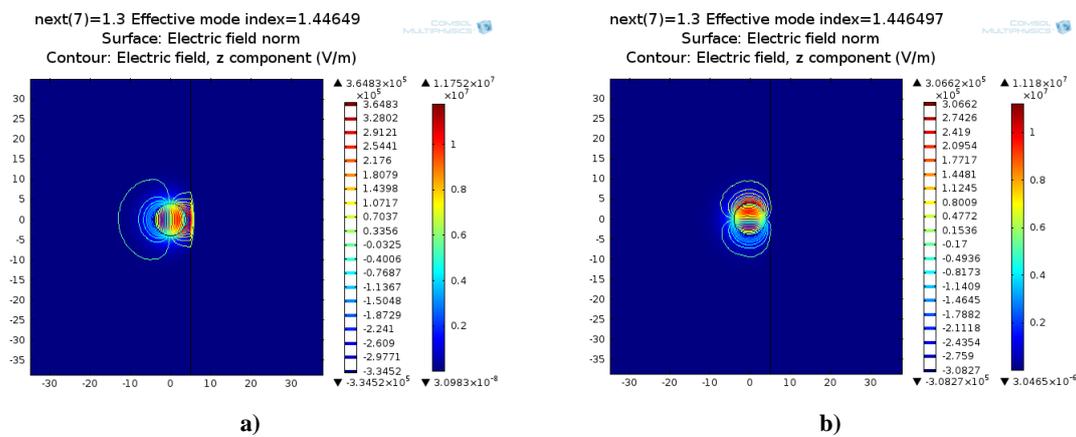


Figura 4.7 Campo elétrico no eixo z , a) polarização x e b) polarização y .

Uma forma de comparar a fibra de tipo “D” com uma fibra convencional é analisar o valor do campo elétrico ao longo do eixo dos x , originando os resultados representados na figura 4.8. Nela pode observar-se que o campo elétrico, na fibra de tipo “D”, é fortemente atenuado se vier da polarização y (linha “azul claro”), mas o campo elétrico da fibra de tipo “D” é maior do que da fibra monomodo se vier polarização do x (linha “vermelha” em comparação com a linha “verde”). Também é possível observar que a atenuação é maior na fibra de tipo “D” que na fibra monomodo. Da figura 4.8 pode concluir-se que é aumentada a intensidade do campo elétrico E_z na região perto do corte e que vai ser dependente do índice de refração externo (n_{ext}).

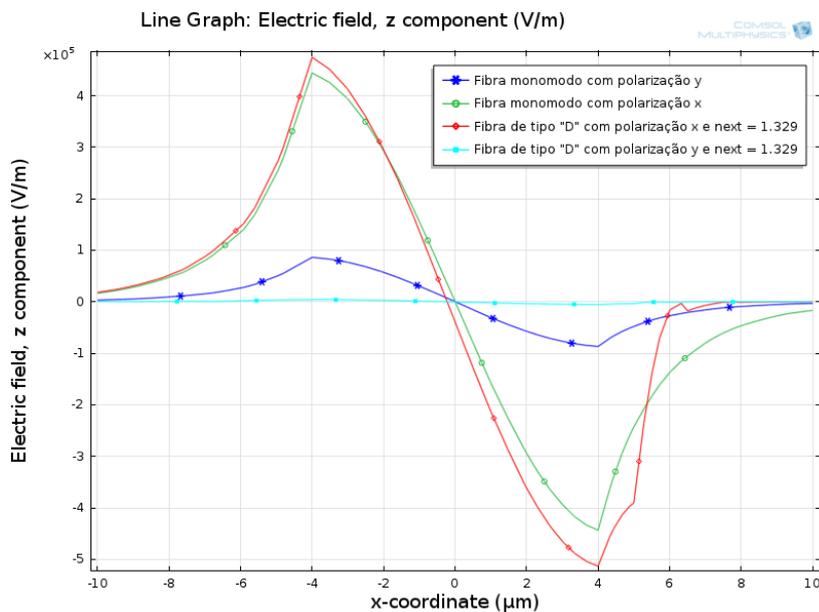


Figura 4.8 Intensidade do campo elétrico na direção z ao longo do eixo x .

Outro método que permite comparar a sensibilidade das fibras, recorre ao estudo da birrefringência na fibra. Da equação 4.2 podem-se obter os valores de birrefringência da fibra monomodo e da fibra de tipo “D”. A fibra monomodo ideal tem um valor de birrefringência nulo, visto que o índice de refração na fibra é o mesmo para todas as polarizações. Por outro lado, a fibra de tipo “D” para os resultados obtidos da simulação do COMSOL para o índice de refração efetivo do eixo rápido e lento, obtém-se um valor de birrefringência de $\beta = 5 \times 10^{-6}$. Comparando com o valor da birrefringência obtido na fibra PCF é baixo, o que indica que a assimetria gerada entre as duas polarizações por uma fibra PCF é maior que na fibra de tipo “D”, mas é preciso destacar que na fibra de tipo “D” a variação da birrefringência é dependente também do

parâmetro externo, n_{ext} , como é observado na figura 4.10 que mostra os vários valores de índice de refração efetivo que ao mesmo tempo influencia a birrefringência.

A seguir foi feito um estudo do impacto do índice de refração externo nos modos de propagação da fibra, fazendo variar o valor do n_{ext} , desde 1 até 1,40 com um passo de 0,05. A figura 4.9 apresenta os valores do índice de refração externo testados, os quais são claramente visíveis a partir do corte em “D” da fibra que acontece aos 5 μm . Na figura 4.9 verifica-se que a transição entre um índice de refração e outro não é imediata, e é causada pelo tamanho da grelha dos elementos finitos utilizada.

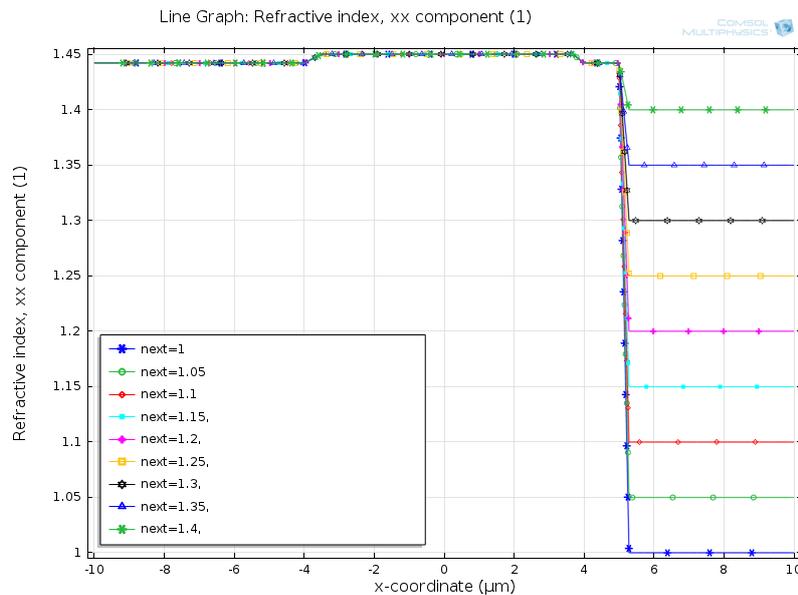


Figura 4.9 Variação do índice de refração em função da coordenada espacial x da fibra de tipo “D” e do índice de refração externo, sendo que o núcleo tem um raio de 4 μm a distância do centro do núcleo ao corte em “D” é de 5 μm .

Realizando o estudo do campo elétrico em função do índice de refração externo obtêm-se os resultados da figura 4.10, que permite concluir que a componente z do campo elétrico depende fortemente do índice de refração externo.

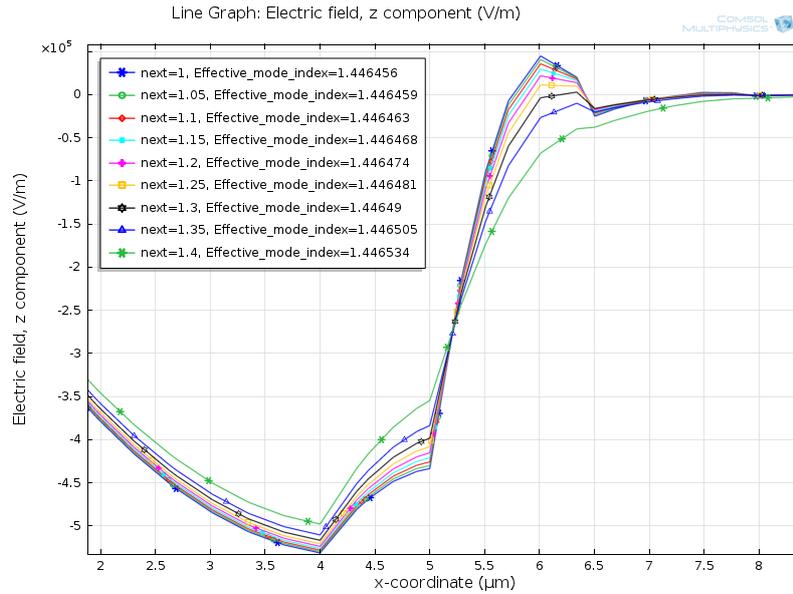


Figura 4.10 Intensidade do campo elétrico na componente z em função da coordenada espacial x para vários índices de refração externos, sendo que o núcleo tem um raio de $4 \mu\text{m}$ e que a distância do centro do núcleo ao corte em “D” é de $5 \mu\text{m}$.

Em termos de utilização desta fibra tipo “D” como sensor de índice de refração, pode-se observar que o campo elétrico no interior da fibra vai-se alterando à medida que se altera o índice de refração externo. A extremidade plana da fibra de tipo “D” está na coordenada x a $5 \mu\text{m}$ do centro.

4.4. Análise de um sensor de índice de refração de fibra ótica de tipo “D” baseado em SPR

Nesta secção foi utilizado o COMSOL e um algoritmo baseado na lei de Fresnel, implementado em MatLab (ver anexo C), para realizar o estudo do comportamento do SPR e poder comparar ambos os resultados. Para uma comparação mais completa foi também utilizado o artigo [7] onde é realizado um estudo completo do comportamento sobre vários parâmetros importantes na configuração de um sensor de índice de refração de fibra ótica de tipo “D” baseado em SPR.

Com base nos resultados da simulação fornecidos pelo COMSOL, pode-se obter o índice de refração efetivo, n_{eff} , e depois pode-se obter o coeficiente de transmissão T em função do comprimento de onda λ , do índice de refração externo de n_{ext} e da espessura do metal, d_m , de acordo com a expressão:

$$T(\lambda, n_{ext}, d_m) = e^{-2\text{imag}(n_{eff}(\lambda, n_{ext}, d_m))k_0L} \quad (4.3)$$

Aplicando as equações 2.32 e 4.3, é possível obter os resultados por dois métodos diferentes, como é mostrado na figura 4.11, onde é observada a variação do coeficiente de transmissão e do comprimento de onda para diferentes espessuras da película de ouro. O comportamento dos dois métodos é semelhante, apresentando uma pequena diferença entre os valores dos coeficientes de transmissão e no comprimento de onda de ressonância. Essas diferenças são atribuídas ao facto dos algoritmos baseados nas equações de Fresnel considera-se apenas ondas planares num arranjo simétrico. Por outro lado, quando se usa o FEM, consideramos a fibra de tipo “D” como um guia de onda sem simetria cilíndrica, sendo possível modelar as regiões óticas heterogêneas com uma resolução do tamanho do elemento, retornando um resultado mais preciso.

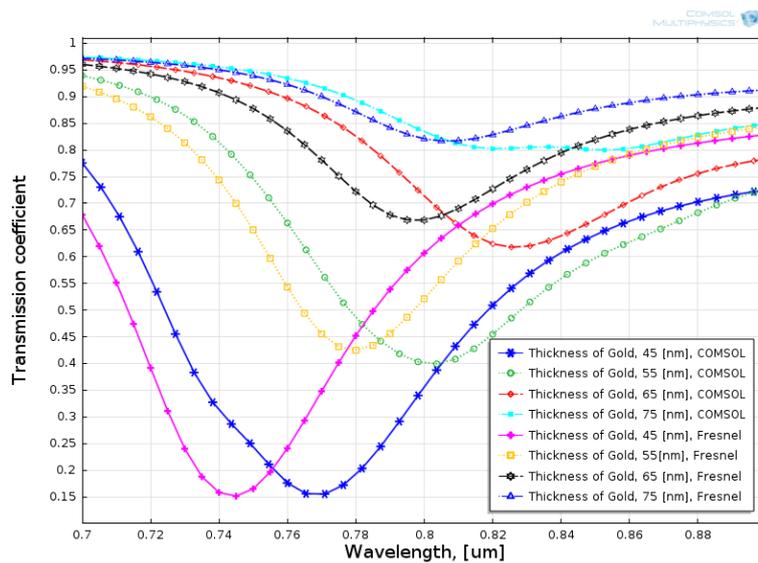


Figura 4.11 Coeficiente de transmissão, T , em função do comprimento de onda para várias espessuras da camada metálica (Ouro - Au), $d = 4,5 \mu\text{m}$, $L = 1 \text{ mm}$, $n_{ext} = 1,3943$ e $\theta = 88,85^\circ$.

Em termos de resultados, no que diz respeito à espessura do metal, o valor ideal para uma camada de ouro estará entre 55 e 65 nm, pois ao utilizar-se uma espessura do metal mais pequena, o coeficiente de transmissão passa ser baixo ($T \approx 0$), a intensidade de luz que é detetada, no fim da fibra, é baixa, fazendo com que o sensor não consiga operar a elevadas distâncias e para uma espessura do metal muito elevado o coeficiente de transmissão passa a ser muito elevado ($T \approx 1$), fazendo com que a luz chegue ao fim da fibra com uma intensidade assinalável, mas sem gerar o SPR ou não ser suficiente para ser utilizado como um sensor do índice de refração externo.

A figura 4.11 apresenta os resultados no caso em que o metal aplicado na fibra é ouro, mas podiam-se considerar outros materiais (por exemplo a prata) como é mostrado na figura 4.12. Esta figura permite concluir que o ouro permite uma melhor interação com o meio externo do que a prata (verificando-se que a existência de uma parte real elevada da constante dielétrica permite uma melhor interação com o meio externo). A prata tem, por sua vez, uma largura espectral de ressonância de operação, para o sensor, mais estreita do que ouro (verificando-se que a existência de uma parte imaginária elevada da constante dielétrica permite uma ressonância mais nítida). O cobre e o alumínio não são muito bons para sensores do tipo SPR, mas combinados com outros metais com melhor sensibilidade (como é a prata e ouro) resultam num sensor semelhante ou melhor ao que seria obtido usando apenas ouro [8].

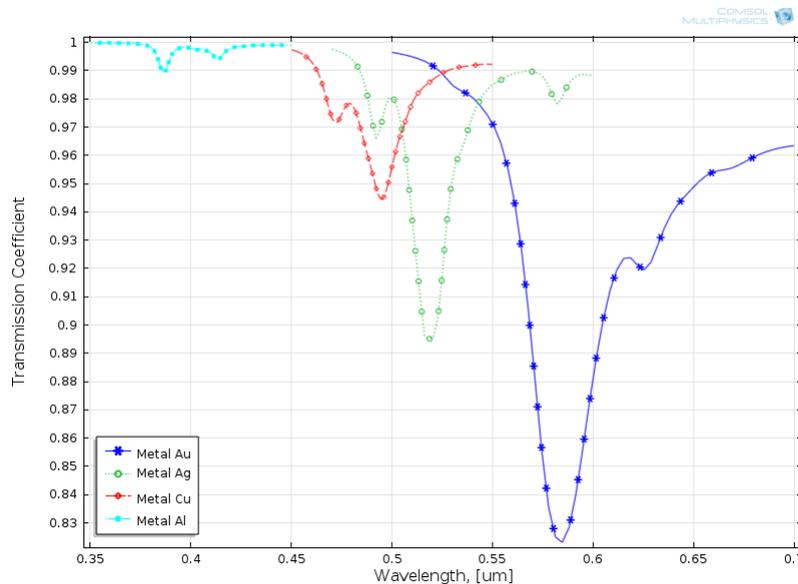


Figura 4.12 Coeficiente de transmissão, T , em função do comprimento de onda para vários metais, com $d_m = 50$ nm, $d = 4,5$ μm, $L = 1$ mm e $n_{ext} = 1,343$.

Utilizando os resultados obtidos com o COMSOL, é possível otimizar a sensibilidade, o coeficiente de transmissão, o comprimento de onda de operação, a zona de deteção do índice de refração externo do sensor, para uma configuração da fibra ótica de tipo “D” para criar sensores baseados em SPR. Para diminuir o coeficiente de transmissão e, conseqüentemente, aumentar a sensibilidade ao meio externo, d , a distância do núcleo ao metal, pode ser diminuída, tal como é mostrado na figura 4.13.

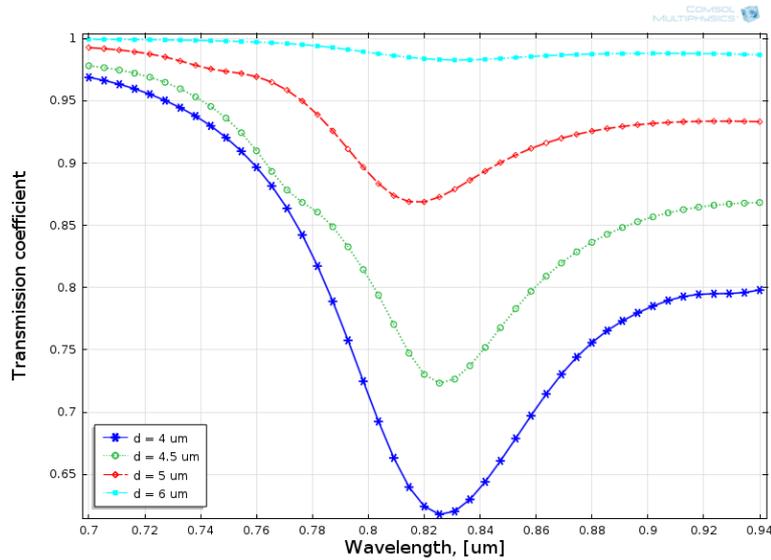


Figura 4.13 Coeficiente de transmissão, T , em função do comprimento de onda para várias distâncias do núcleo ao metal (ouro com espessura de 65 nm), $L = 1$ mm, $n_{ext} = 1,3943$.

A partir das figuras 4.11 e 4.13 é possível concluir que se pode criar um sensor que funciona para um comprimento de onda de operação perto de 820 nm, para uma espessura de metal de 65 nm (Au).

No caso de ser necessário um outro comprimento de onda, uma solução possível é a aplicação de uma camada adicional de um dielétrico com um elevado índice de refração, como é o pentóxido de tântalo (Ta_2O_5) [1, 7].

Os resultados da simulação podem ser observados na figura 4.14.a). Comparando com os resultados apresentados no artigo [7] e com a simulação realizada no MatLab utilizando o algoritmo baseado na lei de Fresnel verifica-se em ambos, que para diferentes espessuras de Ta_2O_5 , o coeficiente de transmissão do sensor não é alterado significativamente. No entanto, o comprimento de onda, onde ocorre a atenuação, é alterado, o que implica que é possível sintonizar o comprimento de onda de funcionamento e de ressonância do sensor. Além disso, o aumento do índice de refração da camada externa (usando, por exemplo, o TiO_2) permite obter, um deslocamento maior do comprimento de onda de ressonância do sensor (figura 4.14.b)). Por outro lado, baixando o índice de refração (usando, por exemplo, o SiO_2) tem-se um deslocamento menor que os anteriores (figura 4.14.c)), o que indica que pode-se construir um sensor de fibra ótica de tipo “D” baseado em SPR, fixo e depois acrescentado uma camada externa pode-se alterar a zona de funcionamento do sensor e o coeficiente de transmissão, como é observado na figura 4.13 e figura 4.14,

respetivamente. O sensor pode ir desde os 620 nm (configuração de fibra ótica de tipo “D” convencional baseado em SPR) até aos 1200 nm. A perda que se irá verificar está dependente do índice de refração externo e da espessura da camada mais externa.

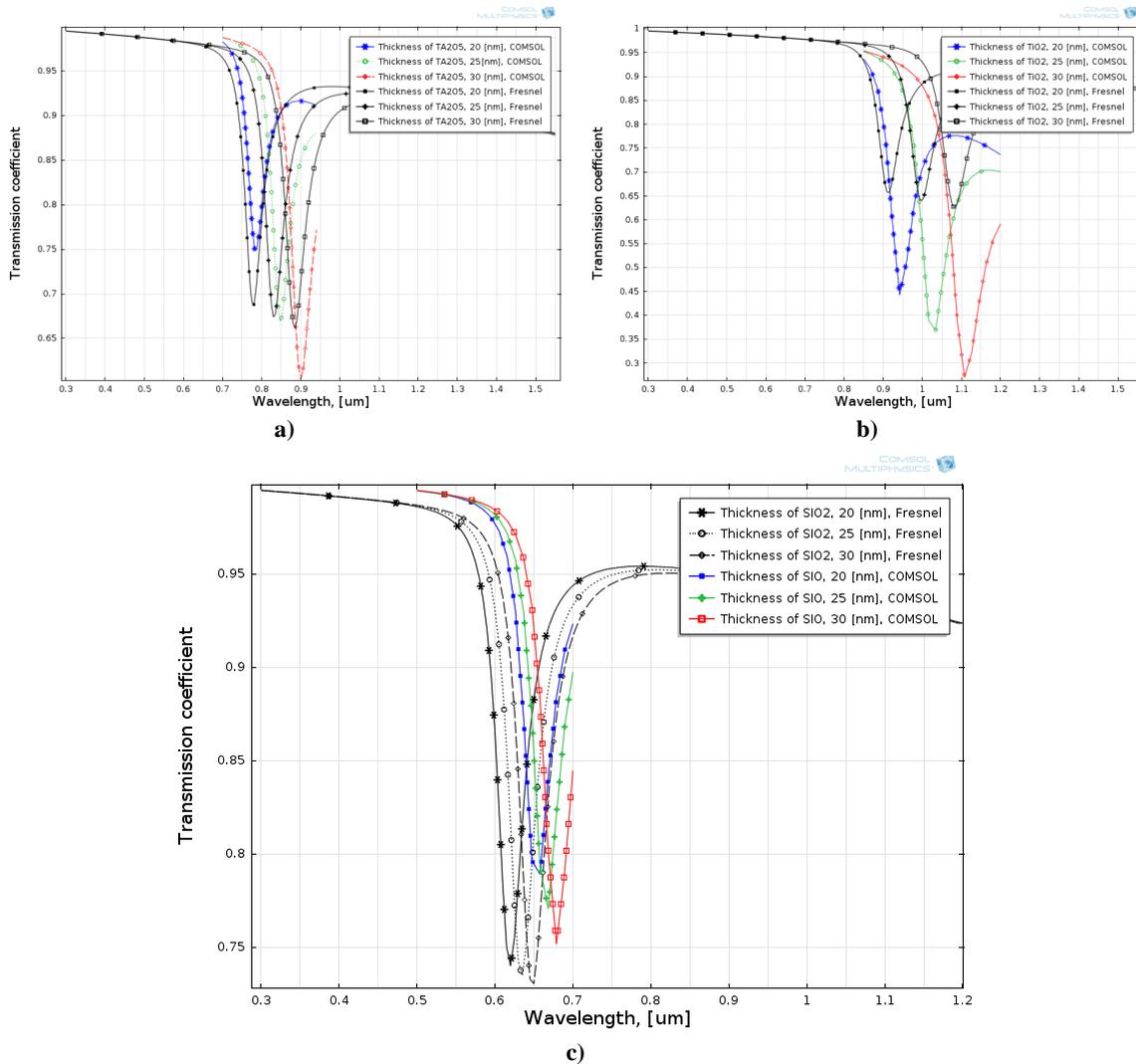


Figura 4.14 Coeficiente de transmissão, T , em função do comprimento de onda para várias espessuras de: a) Ta_2O_5 , b) TiO_2 c) SiO_2 , com $L = 1$ mm, $n_{ext} = 1,329$, $d = 4$ μm , $d_m = 65$ nm e $\theta = 88,85^\circ$.

A partir da figura 4.14 foi construída a tabela 4.1 onde são mostrados os valores dos comprimentos de onda de ressonância em função das espessuras para cada um dos diferentes dielétricos. Note-se que, quanto maior a espessura utilizada, maior é o deslocamento da zona de operação do sensor. Da tabela 4.1 pode-se concluir que é possível deslocar o comprimento de onda de ressonância do SPR utilizando 1 nm de espessura de um material com elevado índice de refração, resultando em valores de

deslocamento do comprimento de onda de cerca de 10 nm por cada nm da espessura para o Ta_2O_5 , 20 nm por nm para o TiO_2 e 2 nm por nm para o SiO_2 .

Tabela 4.1 Alteração dos comprimentos de onda de ressonância em função da composição e espessura da camada de dielétrico.

Espessura do dielétrico (nm)	Comprimento de onda de ressonância (nm)		
	Ta_2O_5	TiO_2	SiO_2
20	787	942,1	657,9
25	847	1034,2	668,4
30	902	1107,8	678,9

A partir da figura 4.14 foi construída também a tabela 4.2 onde é mostrada a diferença entre o resultado obtido pela aplicação das equações de Fresnel, utilizando o MatLab, e o resultado do COMSOL através do estudo da variação do coeficiente de transmissão em função do comprimento de onda. Como pode ser observado na tabela 4.2, os dois métodos têm uma diferença de cerca de 30 nm. Os resultados anteriores têm uma boa aproximação aos resultados experimentais obtidos em [53] e observa-se que os resultados obtidos com o COMSOL Multiphysics são melhores que utilizando o método MEP utilizado na referência [53]. Nessa configuração é utilizada uma fibra ótica monomodo de tipo “D” (diâmetro do núcleo de 4,2 μm , bainha de 125 μm e distância do corte a partir do centro da fibra é de 4,2 μm), com abertura numérica de 0,13. Nessa fibra são implementados duas camadas metálicas, sendo que a primeira é de crômio, com espessura de 2 nm, seguida de uma camada de ouro de 55 nm; e depois uma camada do dielétrico de 17 nm. Esta configuração apresenta uma sensibilidade de 3200 nm/RIU.

Tabela 4.2 Comparação entre os comprimentos de onda de ressonância para os dois métodos (Fresnel e FEM, obtidos através do MatLab e COMSOL, respectivamente).

Dielétrico	Comprimento de onda de ressonância (nm)		Variação (nm)
	Fresnel	FEM	
Ta_2O_5	885	902	17
TiO_2	915	942	27
SiO_2	650	678	28

Na figura 4.15 apresenta-se o gráfico do coeficiente de transmissão para diferentes índices de refração externo (1,33 até 1,40), um dielétrico com espessura de 19

nm, para uma espessura do metal de 65 nm, o comprimento do sensor de 1 mm e a distância do centro da fibra ao corte em “D” de 4 μm.

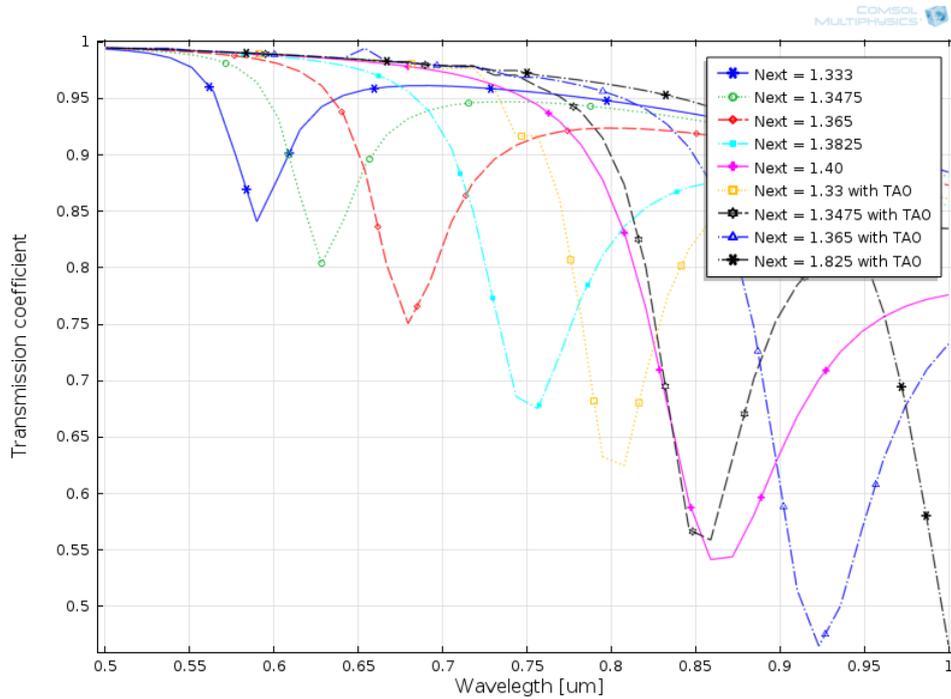


Figura 4.15 Coeficiente de transmissão, T , em função do comprimento de onda para vários índice de refração do meio externo (n_{ext}), com e sem $Ta_2O_5 = 19$ nm, $L = 1$ mm, $d_m = 65$ nm e $d = 4$ μm.

No sentido de testar a eficiência do sensor foi calculada a sua sensibilidade (equação 2.26) em função da variação do índice de refração do meio externo. A tabela 4.3, apresenta os comprimentos de onda e a sensibilidade, respetivamente, onde a sensibilidade é calculada utilizando a equação 2.26.

Tabela 4.3 Sensibilidade do sensor com e sem Ta_2O_5 .

Índice de refração (RIU)	Comprimento de onda de ressonância (nm)		Sensibilidade (nm/RIU)	
	Sem Ta_2O_5	Com Ta_2O_5	Sem Ta_2O_5	Com Ta_2O_5
1,3475	628,2	859,0	2925,7	3662,9
1,3670	688,5	929,7	4246,2	6804,3
1,3830	756,4		5130,0	
1,3900	792,3	1086,2		

Da tabela 4.3 e da figura 4.15 pode-se observar que existe uma variação do coeficiente de transmissão e do comprimento de onda. A sensibilidade para ambos os métodos, com aplicação da camada de Ta_2O_5 (COMSOL e MatLab) é quase igual, e é perto de 3150 nm/RIU (para uma zona de deteção do índice de refração externa entre

1,34 e 1,36) e também é comprovado pelo método MEP [7]. Por outro lado, a variação do índice de refração em função do comprimento de onda não é linear.

Os resultados anteriores têm uma boa aproximação aos resultados experimentais obtidos em [53] e observa-se que os resultados obtidos com o COMSOL Multiphysics são melhores que utilizando o método MEP utilizado na referência [53]. Nessa configuração é utilizada uma fibra ótica monomodo de tipo “D” (diâmetro do núcleo de 4,2 μm , bainha de 125 μm e distância do corte a partir do centro da fibra é de 4,2 μm), com abertura numérica de 0,13. Nessa fibra são implementados duas camadas metálicas, sendo que a primeira é de cromo, com espessura de 2 nm, seguida de uma camada de ouro de 55 nm; e depois uma camada do dielétrico de 17 nm. Esta configuração apresenta uma sensibilidade de 3200 nm/RIU.

Em resumo, comparando os dois métodos de estudo, conclui-se que ambos permitem o estudo do comportamento de sensores de fibra ótica de tipo “D” baseados em SPR para medição do índice de refração externo. As duas simulações, uma com o método FEM, através do COMSOL, e outra com equações de Fresnel, utilizando o MatLab, apresentam resultados semelhantes. A interface gráfica de simulação COMSOL facilita o trabalho, não tendo necessidade de desenvolver formulações complexas. Além disso, tem a capacidade de modelar regiões óticas heterogêneas com uma resolução do tamanho das células e permite a análise de outros parâmetros, como a intensidade do campo magnético e elétrico em vários pontos da estrutura. O COMSOL com o seu ambiente gráfico permite fornecer resultados mais precisos e realistas do que as abordagens tradicionais, embora à custa de um maior tempo de cálculo.

Foi possível demonstrar também que, utilizando o COMSOL, pode-se melhorar o desempenho de um sensor de fibra ótica de índice de refração, baseado em SPR de tipo “D”, sendo que as características dos materiais das camadas, em termos de tipo e espessura, podem ser otimizadas. Assim, é viável o controlo e otimização do comprimento de onda de ressonância, da largura espectral da ressonância, entre outros parâmetros do sensor, alterando as características das camadas (metálicas e dielétricas).

5. Novas configurações de fibras óticas para sensores

Neste capítulo são apresentadas novas configurações para criar sensores de índice de refração, utilizando os resultados obtidos no capítulo anterior de maneira de otimizar o funcionamento do sensor. Assim, é utilizado no estudo uma fibra de tipo “D” convencional e outra de tipo “D” baseada em PCF, um comprimento de onda de $\lambda = 820 \text{ nm}$ (valor usado para comparar com a fibra de tipo “D” convencional), uma distância do centro ao metal $d = 4,5 \mu\text{m}$, uma espessura do metal de $d_m = 65 \text{ nm}$. O metal utilizado é o ouro, a distância entre os buracos da PCF é $\Lambda = 2,3 \mu\text{m}$, o diâmetro dos buracos de ar da PCF é $d_{hole} = 1,61 \mu\text{m}$, o diâmetro do núcleo é $a = 4 \mu\text{m}$, entre outros parâmetros mencionados anteriormente.

5.1. Análise comparativa de uma fibra ótica de tipo “D” convencional com uma fibra PCF de tipo “D”.

Como foi mostrado anteriormente, a PCF convencional pode apresentar uma elevada birrefringência, mas que não é alterada em função do meio externo. Como solução é aplicado um corte à fibra ótica, como é mostrado na figura 5.1. A figura 5.1 mostra a intensidade da amplitude do campo elétrico numa secção da fibra. É considerado que os buracos cortados são fechados tendo um índice de refração igual ao do ar.

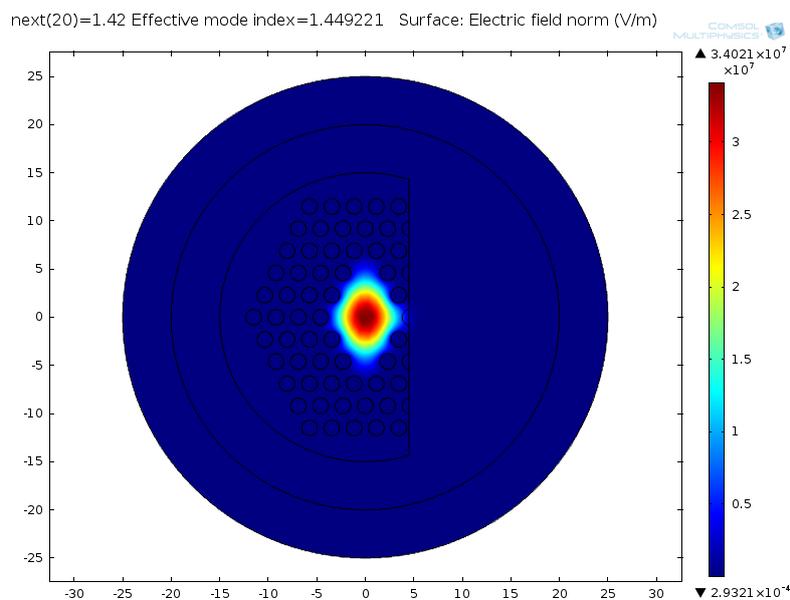


Figura 5.1 Intensidade do campo elétrico de uma secção da fibra PCF de tipo “D” para um $n_{ext} = 1,42$.

Realizando um estudo mais completo desta nova configuração sensora em fibra ótica, o índice de refração do meio externo foi variado desde 1,33 até 1,42, como é apresentado na figura 5.2. Esta figura apresenta os resultados da intensidade do campo elétrico absoluto em função da distância ao centro da fibra, para a PCF de tipo “D” e outra da fibra de tipo “D” convencional, usando a mesma quantidade de elementos finitos. Para um maior valor do índice de refração no meio externo, maior é a intensidade do campo elétrico que vai para fora da fibra.

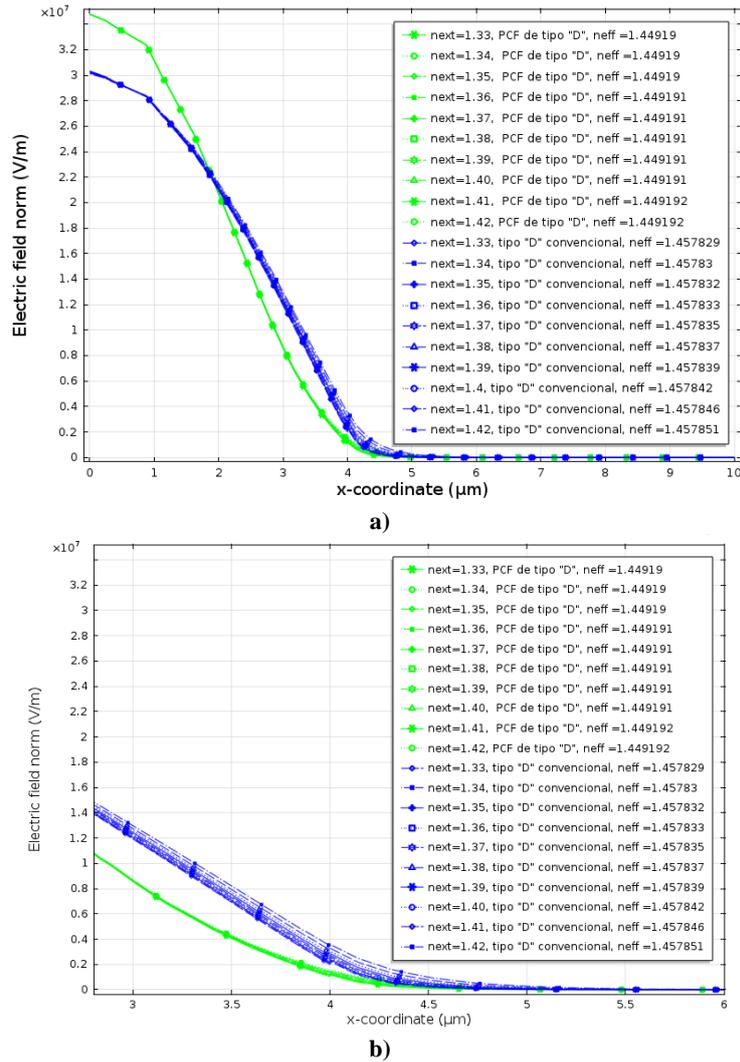


Figura 5.2 Intensidade do campo elétrico absoluto em função da distância do centro da fibra (eixo x) comparando a PCF de tipo “D” e a fibra de tipo “D” convencional, para vários índices de refração: a) todo o estudo; b) zona ampliada onde é feito o corte (3 - 6 μm).

Da figura 5.2.a) observa-se que para a mesma estrutura e para mesmo número de elementos, a intensidade do campo elétrico no centro da fibra é maior para o caso da PCF de tipo “D”. Realizando um estudo mais ampliado na zona de corte (figura 5.2.b))

tem-se que o campo evanescente é menor na nova configuração fazendo com que pouco campo elétrico penetre no meio externo. Isto indica que para criar sensores SPR com esta configuração (PCF de tipo “D”) a placa metálica deve ficar o mais perto possível do núcleo da fibra.

A birrefringência de cada uma das configurações é apresentada na tabela 5.1, onde é observado que na nova configuração (fibra PCF) a birrefringência é dez vezes maior que na fibra de tipo “D” convencional.

Tabela 5.1 Índice de refração eficaz e birrefringência de cada uma das configurações.

n_{ext}	PCF de tipo “D”			Fibra de tipo “D” convencional,		
	n_{eff_x}	n_{eff_y}	β	n_{eff_x}	n_{eff_y}	β
1,33	1,449190	1,449213	$2,29605 \times 10^{-05}$	1,457829	1,457833	$4,00789 \times 10^{-06}$
1,34	1,449190	1,449213	$2,29330 \times 10^{-05}$	1,457830	1,457834	$3,80004 \times 10^{-06}$
1,35	1,449190	1,449213	$2,29057 \times 10^{-05}$	1,457832	1,457835	$3,58238 \times 10^{-06}$
1,36	1,449191	1,449213	$2,28787 \times 10^{-05}$	1,457833	1,457837	$3,35362 \times 10^{-06}$
1,37	1,449191	1,449214	$2,28522 \times 10^{-05}$	1,457835	1,457838	$3,11214 \times 10^{-06}$
1,38	1,449191	1,449214	$2,28266 \times 10^{-05}$	1,457837	1,457840	$2,85584 \times 10^{-06}$
1,39	1,449191	1,449214	$2,28025 \times 10^{-05}$	1,457839	1,457842	$2,58198 \times 10^{-06}$
1,4	1,449191	1,449214	$2,27810 \times 10^{-05}$	1,457842	1,457845	$2,28680 \times 10^{-06}$
1,41	1,449192	1,449215	$2,27637 \times 10^{-05}$	1,457846	1,457848	$1,96491 \times 10^{-06}$
1,42	1,449192	1,449215	$2,27542 \times 10^{-05}$	1,457851	1,457852	$1,60813 \times 10^{-06}$

A PCF de tipo “D” utilizada não apresenta um campo evanescente elevado a propagar-se no meio a analisar, mas podem existir outros tipos de configurações de PCF onde, por exemplo, se possa alterar a distância entre buracos, os diâmetros dos buracos, o posicionamento dos buracos ou a simetria entre os buracos, para que se possa aumentar o campo evanescente, em relação à fibra de tipo “D”. Relativamente à birrefringência, já é um valor elevado que pode ser utilizado para a elaboração de outro tipo de sensores.

5.2. Comportamento de uma PCF de tipo “D” para sensor de índice de refração baseado em SPR

Nesta parte do trabalho, testou-se uma nova configuração de PCF de tipo “D” para criar um sensor de índice de refração baseado em SPR. Esta configuração integra várias tecnologias no sentido de otimizar os seus resultados. Para isso é preciso realizar um conjunto de estudos, entre os quais, a variação da espessura do metal, a variação da distância do corte da fibra, e a variação do índice de refração do meio externo.

Variando a espessura do metal entre os 45 e 145 nm (figura 5.3) o coeficiente de transmissão é muito mais alto do que quando é utilizado uma fibra de tipo “D”

convencional (figura 4.11). Este resultado é o esperado devido a que a PCF de tipo “D” tem um menor campo elétrico a interagir com o meio externo (figura 5.2) e este não é um bom indicador para um sensor de campo evanescente. A nova configuração do sensor tem um comportamento contrário ao da configuração baseada em fibra de tipo “D” convencional, devido ao que é observado na figura 5.3. O aumento da espessura do metal implica um deslocamento à esquerda do coeficiente de transmissão em relação ao comprimento de onda com o metal mais fino. Para valores de espessura do ouro maiores que 105 nm não é observada variação no comprimento de onda e a variação de intensidade do campo elétrico externo à fibra é muito pequena. Assim, e nesta configuração, deve-se utilizar uma espessura inferior a 105 nm para testar o desempenho como sensor.

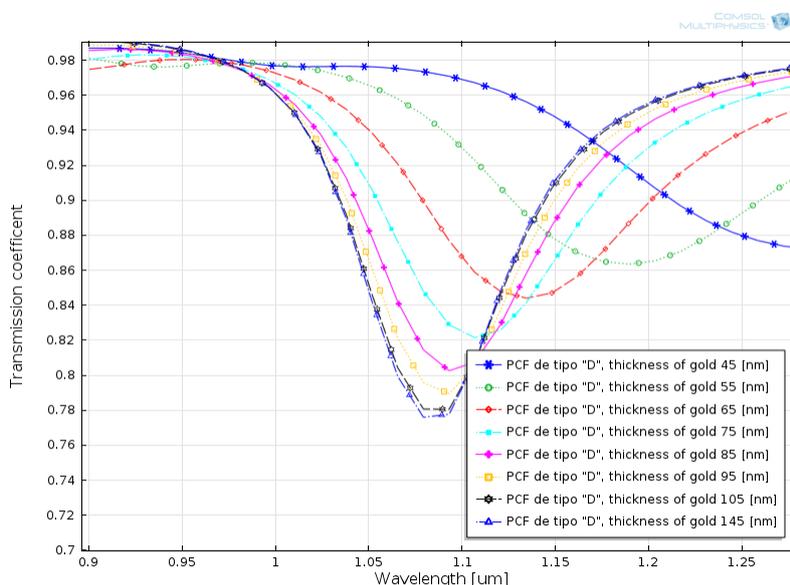


Figura 5.3 Coeficiente de transmissão, T , de uma PCF de tipo “D” em função do comprimento de onda para várias espessuras da camada metálica (Au), $d = 4,5 \mu\text{m}$, $L = 1 \text{ mm}$ e $n_{ext} = 1,3943$.

Em seguida foi feito o estudo da variação do índice de refração do meio externo para valores, entre 1,33 e 1,40 para determinar a sensibilidade do sensor. Na figura 5.4 são mostrados os resultados do estudo, onde se nota que o sensor é pouco sensível ao índice de refração externo quando é interrogado em comprimento de onda.

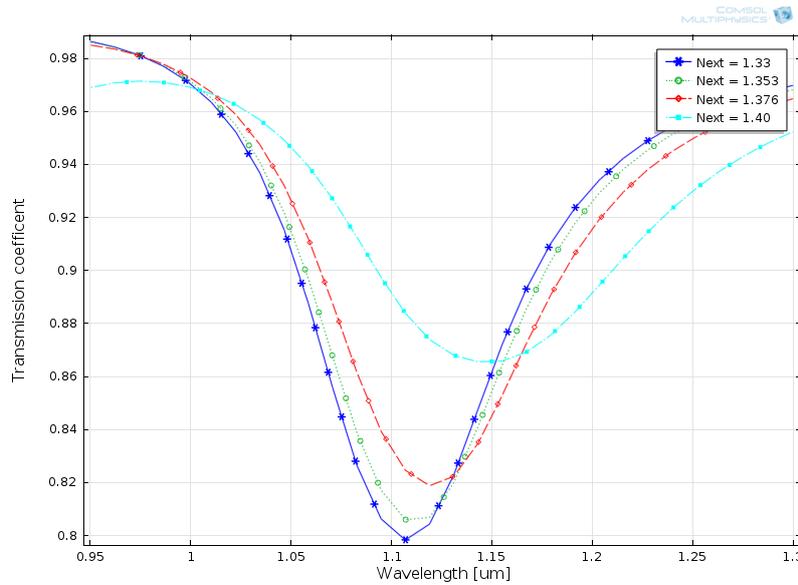


Figura 5.4 Coeficiente de transmissão, T , de uma PCF de tipo “D” em função do comprimento de onda para vários índices de refração externo (n_{ext}), $d = 4,5 \mu\text{m}$, $L = 1 \text{ mm}$ e $d_m = 65 \text{ nm}$.

Na tabela 5.2 é mostrada a variação do comprimento de onda para cada índice de refração e que é muito inferior à calculada nas configurações anteriores. Uma variação de 1,377 a 1,40 no índice de refração apresenta uma sensibilidade de 1050 nm/RIU que é muito inferior ao resultado obtido na configuração com uma fibra de tipo “D” convencional (3150 nm/RIU).

Tabela 5.2 Sensibilidade do sensor PCF de tipo “D” baseado em SPR.

Índice de refração externo, n_{ext}	Comprimento de onda de ressonância (nm)	Sensibilidade (nm/RIU)
1,330	1106,9	260,90
1,353	1112,9	265,20
1,377	1119,0	1047,8
1,400	1143,1	

Neste tipo de fibra tem-se então uma menor sensibilidade em função do comprimento de onda e um elevado coeficiente de transmissão, mas pode-se trabalhar em valores de comprimentos de onda superiores ao da configuração anterior sem a utilização de uma camada extra de dielétrico.

5.3. Novas propostas com fibras óticas de tipo “D”

Na configuração de PCF de tipo “D” a intensidade do campo evanescente é inferior à da configuração com fibra de tipo “D” convencional, por isso, são propostas três novas configurações, nas quais o objetivo principal é fazer com que o campo

elétrico seja “obrigado” a propagar-se em direção perpendicular ao corte da fibra, como se de uma antena direcional se tratasse.

A primeira hipótese é utilizar uma fibra de tipo “D” convencional na qual são acrescentados dois segmentos de retas preenchidas com ar, como é observado na figura 5.5. A confluência dos segmentos de reta encontra-se a uma distância p ($p = 9 \mu\text{m}$) do centro do núcleo, d é a distância entre o núcleo e o meio externo e a espessura das retas é $Dr = 2 \mu\text{m}$, com um ângulo de 60° com respeito ao eixo x . Os outros valores são os utilizados anteriormente. Como se compreende esta é uma vantagem da simulação, uma vez que seria impossível construir uma fibra como a que é agora apresentada, porém este modelo é útil para testar o conceito.

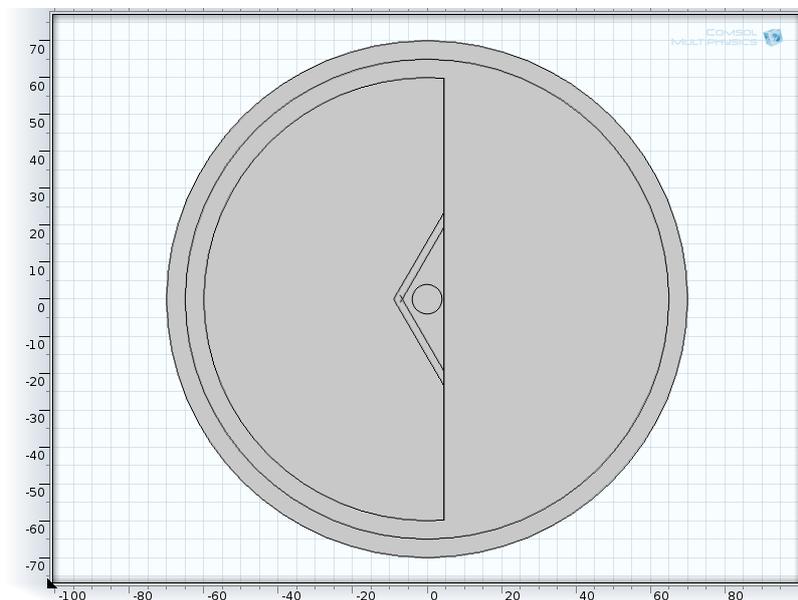


Figura 5.5 Primeira configuração para aumentar o campo elétrico no meio externo onde $p = 9 \mu\text{m}$, $d = 4 \mu\text{m}$, a espessura das retas é $Dr = 2 \mu\text{m}$ e o ângulo de 60° com respeito ao eixo x .

A segunda hipótese é utilizar uma fibra de tipo “D” convencional à qual é acrescentado um conjunto de buracos de ar em linha reta, os quais são passíveis de implementar (devido à semelhança com a construção normal de uma PCF), como é observado na figura 5.6. Os buracos de ar em linha reta apresentam um diâmetro de $1,4 \mu\text{m}$, estão à mesma distância p do núcleo que no caso anterior e o seu alinhamento faz um ângulo de 60° em relação ao eixo x . Os outros valores são iguais aos anteriores.

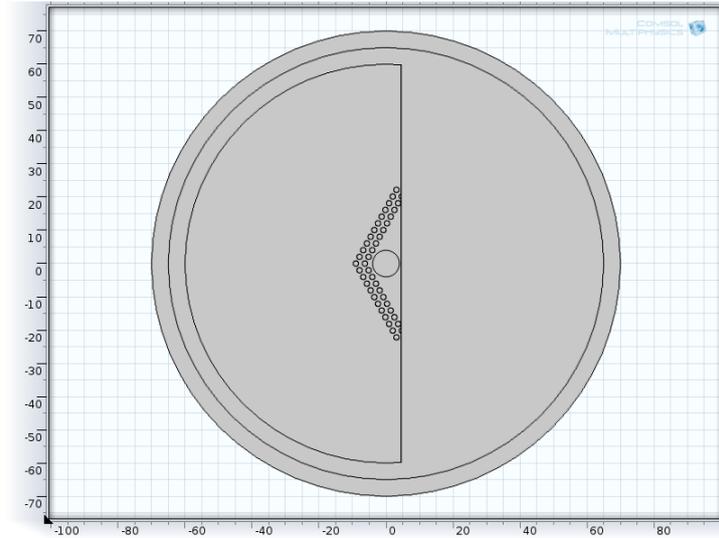


Figura 5.6 Segunda configuração para aumentar o campo elétrico no meio externo onde $p = 9 \mu\text{m}$, $d = 4 \mu\text{m}$, o diâmetro dos buracos é de $1,4 \mu\text{m}$ e o ângulo de 60° com respeito ao eixo x .

A terceira hipótese é utilizar uma fibra de tipo “D” convencional à qual é acrescentado um conjunto de buracos posicionados em forma de parábola, como é observado na figura 5.7. A parábola é escrita em função das coordenadas polares através da seguinte equação:

$$r_{1i} = l / (1 - \cos(\theta_{1i})) \quad (5.1)$$

onde l é duas vezes a distância que existe entre o foco, p , e o centro da núcleo, θ é o ângulo que existe entre cada buraco e o centro do núcleo face ao anterior conjunto (buraco-centro do núcleo), e i é o número de buracos por camadas. Os pontos (x, y) de cada elemento são dados através das seguintes equações:

$$x_i = r_i * \cos(\theta_i) \quad (5.2)$$

$$y_i = r_i * \sin(\theta_i) \quad (5.3)$$

Como é observado na figura 5.7, a fibra é constituída por duas camadas de parábolas com buracos sendo a distância entre uma camada e a outra é h (definida pelo utilizador). A primeira parábola pode definir-se através da equação 5.1 e a segunda parábola é dada por:

$$r_{2i} = (l + 2 * h) / (1 - \cos(\theta_{2i})) \quad (5.4)$$

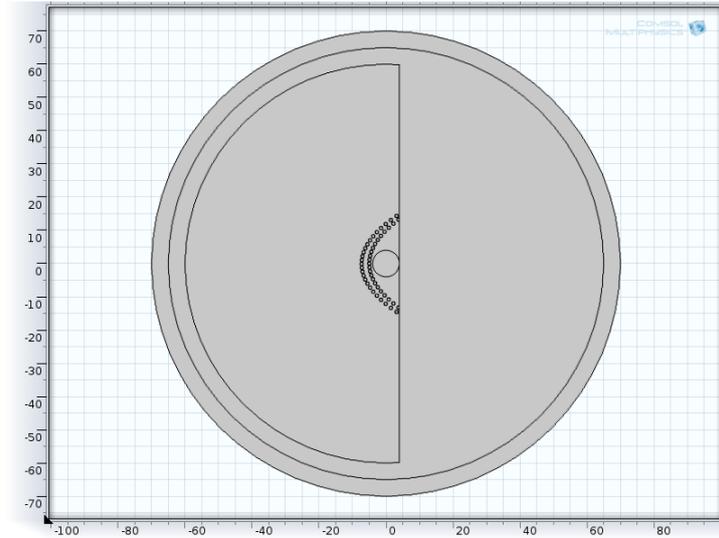


Figura 5.7 Terceira configuração para aumentar o campo elétrico no meio externo com $p = 9 \mu\text{m}$, $h = 2,3 \mu\text{m}$ e $d = 4 \mu\text{m}$.

Por último é definida a variação do ângulo (Δ_{1i} , Δ_{2i}) e o ângulo que existe entre cada buraco da mesma camada (θ_{1i} , θ_{2i}) como:

$$\Delta_{1i} = \Delta_{11} * r_{11}/r_{1(i-1)} \quad (5.5)$$

$$\Delta_{2i} = \Delta_{21} * r_{21}/r_{2(i-1)} \quad (5.6)$$

$$\theta_{1i} = \theta_{1(i-1)} + \Delta_{1i} \quad (5.7)$$

$$\theta_{2i} = \theta_{2(i-1)} + \Delta_{2i} \quad (5.8)$$

Os resultados dos campos elétricos absolutos das três configurações propostas, são mostrados na figura 5.8. Comparando cada configuração proposta com uma fibra tipo “D” convencional com idêntico *mesh*, observa-se que as novas configurações têm uma maior intensidade do campo elétrico e ao mesmo tempo existe um campo evanescente com maior intensidade.

Comparando a birrefringência para as três configurações, para um índice de refração externo de 1,3934, tem-se uma birrefringência de:

- $\beta = 5,2 \times 10^{-5}$ para a parábola;
- $\beta = 2,4 \times 10^{-5}$ para as linhas retas;
- $\beta = 2,4 \times 10^{-5}$ para as linhas retas com buracos;
- $\beta = 1,4 \times 10^{-5}$ para a fibra de tipo “D” convencional.

Dos valores da birrefringência pode concluir-se que utilizar linhas retas completas ou com buracos não altera significativamente a birrefringência, sendo que a birrefringência é maior na configuração com parábolas que em qualquer outra.

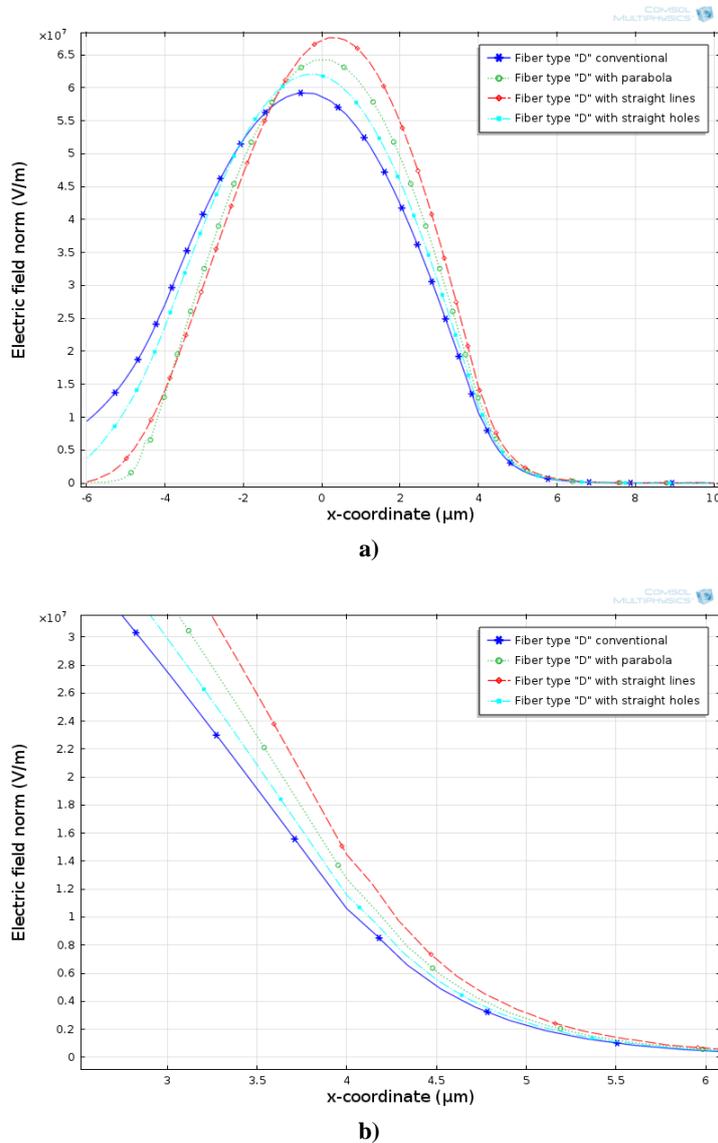


Figura 5.8 Intensidade do campo elétrico ao longo do eixo x , com e sem linhas retas preenchidas, parábolas e buracos com ar com $Dr = 2 \mu\text{m}$, $p = 9 \mu\text{m}$, $h = 2,3 \mu\text{m}$ e $d = 4 \mu\text{m}$, a) todo o estudo, b) zona onde é feito o corte ampliada.

5.4. Novas propostas com fibras óticas de tipo "D" aplicando SPR

Para produzir o SPR é aplicada uma camada fina de metal a seguir ao corte da fibra ótica de tipo "D" em cada uma das configurações anteriores, para realizar o estudo

da variação da espessura do metal, do índice de refração externo, entre outros parâmetros.

Foi realizado o estudo do coeficiente de transmissão em função do comprimento de onda para uma espessura do metal entre 45 nm e 65 nm. Na figura 5.9 são representados os resultados. Como é observado na figura, tem-se que a intensidade do campo evanescente é maior para a fibra de tipo “D” com linhas retas (primeira hipótese) que para qualquer outra configuração. É importante referir que a primeira estrutura não é passível de ser implementada experimentalmente, mas permite relevar o trabalho de simulação, ao possibilitar o estudo do conceito em termos teóricos. Para as configurações com os buracos em linha reta ou em parábola a intensidade do campo evanescente observada é muito semelhante, apesar de na configuração em parábola ser ligeiramente superior, o que indica que neste tipo de estruturas o confinamento da luz é muito semelhante. É observado que a zona de excitação do plasmão de superfície é muito próxima para os dois casos com buracos, e que só a configuração com linhas retas tem um pequeno deslocamento.

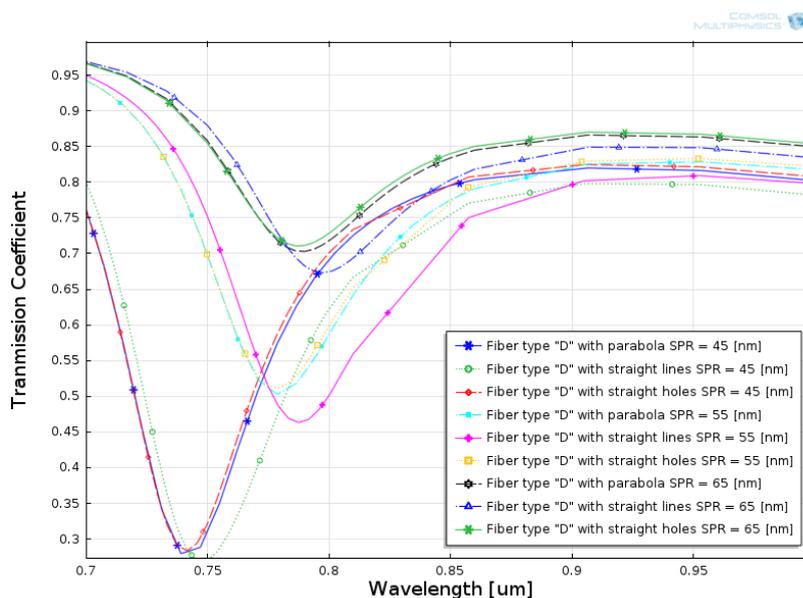


Figura 5.9 Coeficiente de transmissão, T , em função do comprimento de onda para várias espessuras da camada metálica (Ouro - Au), para as três configurações propostas, $d = 4,5 \mu\text{m}$, $L = 1 \text{ mm}$ e $n_{ext} = 1,3943$.

A melhor espessura do metal para o funcionamento do sensor seria entre 55 nm a 65 nm devido a que não interessa ter um coeficiente de transmissão muito elevado ou muito baixo.

Na figura 5.8 foi observado que a configuração com linhas retas tem um campo elétrico maior (é verdade sempre e quando o número de elementos sejam iguais entre cada configuração). Na figura 5.9 é observado que a configuração com linhas retas tem o melhor resultado em termos do coeficiente de transmissão, uma vez que apresenta a maior intensidade do campo elétrico no meio externo.

Na figura 5.10 foi comparado o desempenho do sensor em fibra ótica de tipo “D” convencional com a configuração da fibra ótica de tipo “D” com linhas retas, ambos baseados em SPR. Observando a figura 5.10 tem-se que a nova configuração, com uma espessura do metal de 55 nm, tem um comprimento de onda de ressonância semelhante ao da configuração convencional, com uma espessura do metal de 65 nm.

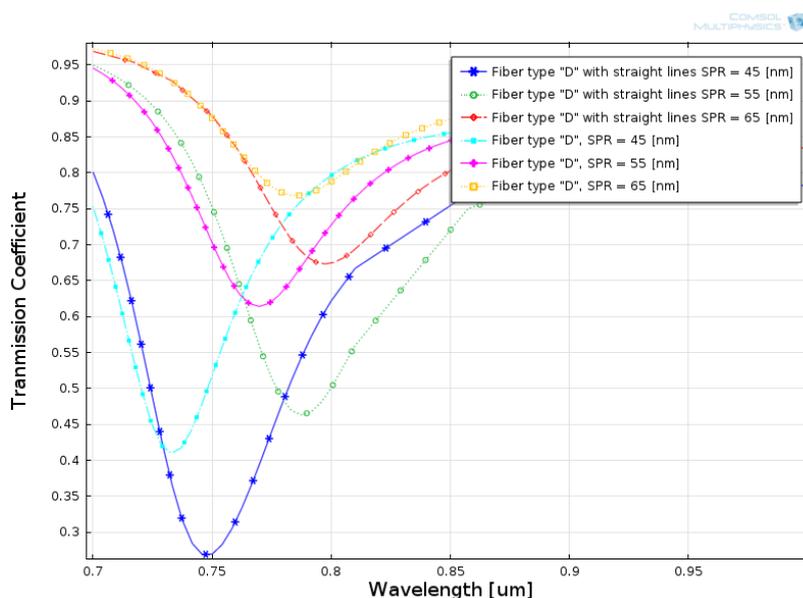


Figura 5.10 Coeficiente de transmissão, T , em função do comprimento de onda para várias espessuras da camada metálica (Ouro - Au), para a fibra ótica de tipo “D” convencional e com linhas retas, $d = 4,5 \mu\text{m}$, $L = 1 \text{ mm}$ e $n_{ext} = 1,3943$.

Por último o índice de refração do meio externo foi variado desde 1,33 até 1,39, como é apresentado na figura 5.11.

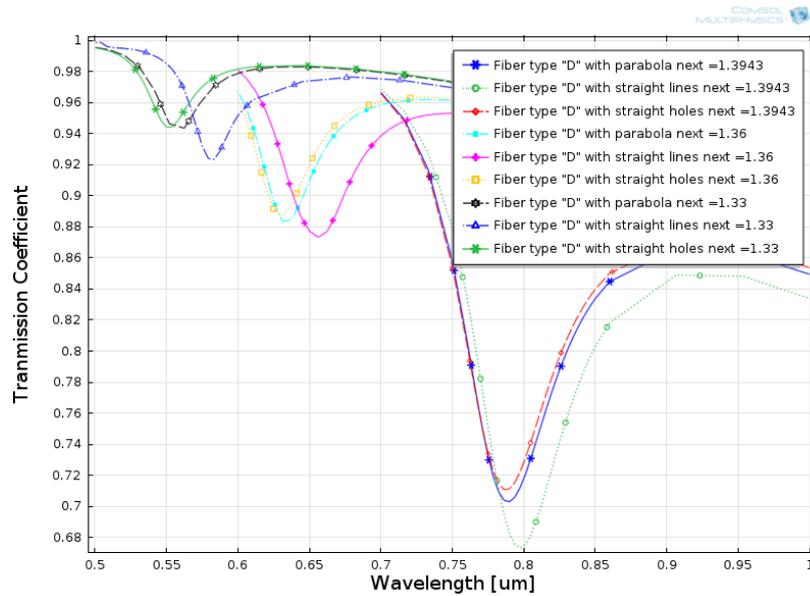


Figura 5.11 Coeficiente de transmissão, T , em função do comprimento de onda para vários índices de refração externo, n_{ext} , para as três configurações propostas, $d_m = 65$ nm, $d = 4,5$ μ m e $L = 1$ mm.

A partir da figura 5.11 foi construída a tabela 5.3 onde é mostrado o comprimento de onda de ressonância e a sensibilidade das três configurações propostas. A fibra ótica de tipo “D” convencional tem uma sensibilidade de 4100 nm/RIU para uma zona de detecção entre 1,36 e 1,39, e, como observado na tabela 5.3, qualquer uma das novas configurações tem melhor sensibilidade.

Tabela 5.3 Comprimento de onda e sensibilidade das três configurações de fibra óticas propostas.

n_{ext}	Comprimento de onda de ressonância (nm)			Sensibilidade (nm/RIU)		
	Linha reta	Linha reta com buraco	Parábola	Linha reta	Linha reta com buraco	Parábola
1,33	583,3	550,0	562,5	2433,3	2710,0	2293,3
1,36	656,3	631,3	631,3	4227,5	4640,7	4751,5
1,39	797,5	786,3	790,0			

Refira que as novas configurações foram pensadas com o intuito de aumentar a intensidade de luz no centro da fibra, implementando uma estrutura do tipo antena direcional só de um lado, fazendo com que o campo evanescente para a análise do índice de refração do meio externo fosse superior. Os resultados permitem obter maior campo evanescente na zona sensora apresentando uma maior sensibilidade (superior a 4200 nm/RIU). Em resumo, observa-se que alterando a configuração da fibra ótica pode-se otimizar os parâmetros de funcionamento do sensor.

6. Conclusões e perspectivas de trabalhos futuros

Este trabalho contemplou o estudo do comportamento da fibra ótica de tipo “D” convencional e em fibras PCF, nas quais foram realizadas as seguintes análises: propagação dos modos, birrefringência, intensidade do campo elétrico, entre outros. Esses estudos permitiram verificar através da teoria e dos resultados experimentais encontrados na literatura, que o COMSOL Multiphysics é uma ferramenta que permite estudar o comportamento da luz nas fibras óticas para a sua utilização em sensores com estruturas complexas.

Um parâmetro muito importante na utilização do COMSOL Multiphysics é a grelha (*mesh*) ou a quantidade de elementos finitos que são definidos na estrutura. Estes elementos não podem ser muito pequenos porque aumentam os erros numéricos mas, por outro lado, também não podem ser de tamanhos demasiado elevados porque aumentam os erros metodológicos, podendo não calcular corretamente os parâmetros importantes do estudo. Este parâmetro é, também, responsável pelo tempo de processamento e pela precisão dos resultados obtidos, sendo, por isso, necessária a existência de um compromisso para estes dois fatores.

Neste trabalho foi analisado o comportamento dos sensores de fibra ótica baseados em SPR, tendo-se estudado a condição de excitação das SPW para várias configurações. A excitação ocorre para comprimentos de ondas que satisfazem a condição que permite criar a SPW, gerando, assim, picos de atenuação na intensidade da transmissão de luz destes dispositivos, os quais podem ser alterados em amplitude e em comprimento de onda pela variação do índice de refração do meio externo em análise.

Através do estudo da birrefringência nas fibras de tipo “D” e nas fibras PCF, verificou-se que esta última pode apresentar uma melhor birrefringência, o que pode ser interessante para outro tipo de sensores. Comparando os resultados obtidos usando o COMSOL Multiphysics com os resultados experimentais que aparecem na literatura, foi observado que os resultados obtidos no COMSOL apresentam um valor inferior relativamente à birrefringência.

Neste trabalho foram também estudadas as equações de Fresnel, muito utilizadas na literatura, como modelo para realizar o estudo dos sensores de fibra ótica baseados

em SPR. A utilização das equações de Fresnel em MatLab constitui um método bastante simples, rápido e permite obter boas aproximações. No entanto, não permitem o estudo de estruturas mais complexas. Também neste trabalho, foi implementado outro modelo de estudo que é utilizado para a análise dos fenómenos do SPR nas fibras óticas, o método dos elementos finitos (FEM). Este método é o método utilizado pelo COMSOL Multiphysics. No entanto, é mais complexo e lento que o anterior baseado em equações de Fresnel.

Ao realizar-se a comparação entre os resultados das duas simulações o resultado é relativamente próximo entre os dois modelos e comparando-os com o método MEP, que é apresentado na literatura, os resultados são próximos. No entanto, existe uma diferença no comprimento de onda da ressonância entre os dois métodos (FEM e Fresnel), de cerca de 30 nm. Retira-se que os resultados obtidos no COMSOL Multiphysics (ver figura 4.15) são mais próximos dos resultados experimentais obtidos em [7] e em [53].

Também foi possível demonstrar a utilização do COMSOL para melhorar o desempenho de um sensor de índice de refração baseado em SPR usando uma fibra de tipo “D”, em que as características das camadas de material, em termos de tipo e espessura foram otimizadas.

Neste trabalho verificaram-se ainda as seguintes conclusões:

- O deslocamento do comprimento de onda e a alteração do coeficiente de transmissão conforme é aumentada ou diminuída a espessura do metal;
- O aumento do coeficiente de transmissão conforme é aumentada a distância do núcleo ao corte da fibra ótica de tipo “D”;
- O ouro apresenta-se como o melhor metal para excitação do SPR seguido da prata, cobre e alumínio;
- O comportamento da sensibilidade do sensor não é linear;
- A utilização de um dielétrico de elevado índice de refração permite deslocar o comprimento de onda para valores superiores sem aumentar muito o coeficiente de transmissão;
- A sensibilidade é aumentada ao utilizar-se um dielétrico de elevado índice de refração.

Ao comparar estas conclusões com algum dos trabalhos onde são realizadas implementações experimentais, conclui-se que, normalmente, o coeficiente de transmissão não é idêntico, devido a que só é estudada uma secção da fibra, mas em termos de comprimento de onda conseguiu-se uma boa aproximação, bem como em termos de sensibilidade.

Foi testada uma configuração da fibra ótica PCF de tipo “D” de forma a tentar melhorar as suas características. Em relação ao campo evanescente não existe aumento da intensidade no meio externo, mas a birrefringência é aumentada com este tipo de configuração, verificando-se que as configurações assimétricas são uma boa opção para o aumento da birrefringência numa fibra ótica.

Por último, utilizando uma nova configuração de PCF de tipo “D”, e combinando com tecnologia baseada em SPR, foi criado um novo tipo de sensor de índice de refração o qual, comparado com um sensor criado em fibra ótica de tipo “D” convencional, observa-se que:

- A birrefringência é dez vezes superior;
- Existe pouca variação do comprimento de onda de ressonância do plasmão de superfície em função do índice de refração externo;
- A intensidade do campo elétrico é inferior na zona do sensor;
- A sensibilidade é inferior a 1020 nm/RIU;
- Aumentando a espessura do metal, ocorre um deslocamento para valores menores do comprimento de onda de ressonância do plasmão de superfície, semelhante ao observado em [16].

Como foi observado nos resultados, a PCF de tipo “D” com uma placa metálica não é uma boa solução para a construção de um sensor de fibra ótica baseado em SPR, mas não quer dizer que não exista uma outra configuração de PCF que permita um melhor resultado.

As novas propostas apresentadas neste trabalho combinam a configuração da fibra ótica de tipo “D” convencional e a tecnologia de SPR, e permitem obter soluções com:

- Birrefringência superior;
- Elevada variação do comprimento de onda de ressonância do plasmão de superfície em função do índice de refração externo;

- Intensidade do campo elétrico elevada na zona do sensor;
- Sensibilidade superior aos 4000 nm/RIU.

Em resumo, neste trabalho foram avaliados os modelos teóricos existentes para caracterização de sensores em fibra ótica baseados em SPR, bem como a utilização do COMSOL Multiphysics como uma nova ferramenta de estudo. Concluiu-se, também, que o modelo de equações de Fresnel ou a matriz de transferência para múltiplas camadas apresentam pouca utilização de recursos de computação e uma precisão aceitável. A utilização do COMSOL Multiphysics apresenta um tempo de processamento maior, mas permite uma variedade muito superior de configurações e de tipos de fibra que podem ser estudados. A interface gráfica do COMSOL Multiphysics facilita o trabalho de simulação, uma vez que não necessita de desenvolver formulações complexas. Além disso, tem a capacidade de modelar regiões óticas não homogêneas, com diferentes tamanhos dos elementos e permite a análise de outros parâmetros, tais como a intensidade do campo elétrico em toda a estrutura.

Como trabalho futuro sugere-se a implementação experimental das novas configurações de sensores de fibras óticas, apresentados neste trabalho, para efetuar uma validação dos resultados de simulação agora apresentados.

Bibliografia

- [1] B. Lee, S. Roh and J. Park, "Current status of micro- and nano-structured optical fiber sensors," *Optical Fiber technology*, vol. 15, pp. 209-221, 2009.
- [2] S. Roh, T. Chung and B. Lee, "Overview of the characteristics of micro- and nano-structured surface plasmon," *Sensors*, vol. 11, no. 2, pp. 1565-1588, 2011.
- [3] B. Liedberg, C. Nylander and I. Lunstrom, "Surface plasmon resonance for gas detection and biosensing," *Sensors and Actuators*, vol. 4, pp. 299-304, 1983.
- [4] B. Liedberg, C. Nylander and I. Lundström, "Biosensing with surface plasmon resonance, how it all started," *Biosensors & bioelectronics*, vol. 10, pp. i - ix, 1995.
- [5] R.C. Jorgenson and S.S. Yee, "A fiber-optic chemical sensor based on surface plasmon resonance," *Sensors and Actuators B: Chemical*, vol. 12, pp. 213-220, 1993.
- [6] K. Balaa, M. Kanso, S. Cuenot, T. Louarn and G. Minea, "Experimental realization and numerical simulation of wavelength-modulated fibre optic sensor based on surface plasmon resonance," *Sensors and Actuators B: Chemical*, vol. 126, pp. 198-203, 2007.
- [7] R. Slavik, J. Homola, J. Ctyroky and E. Brynda, "Novel spectral fiber optic sensor based on surface plasmon resonance," *Sensors and Actuators B: Chemical*, vol. 74, pp. 106-111, 2001.
- [8] K. Sharma and B. D. Gupta, "On the performance of different bimetallic combinations in surface plasmon resonance based fiber optic sensors," *Journal of Applied Physics*, vol. 101, no. 9, pp. 093-111, 2007.
- [9] M. H. Chiu, C. H. Shih and M. H. Chi, "Optimum sensitivity of single-mode D-type optical fiber sensor in the intensity measurement," *Sensors and Actuators B: Chemical*, vol. 123, pp. 1120-1124, 2007.
- [10] T. Allsop, R. Neal, S. Rehman, D. Webb, D. Mapps and I. Bennion, "Characterization of infrared surface plasmon resonances generated from a fiber-optical sensor utilizing tilted Bragg gratings," *Journal of the Optical Society of America B*, vol. 25, pp. 481-490, 2008.

- [11] G. Nemova and R. Kashyap, "Theoretical model of a planar integrated refractive index sensor based on surface plasmon polariton excitation with a long period grating," *Journal of the Optical Society of America B*, vol. 24, pp. 2696-2701, 2007.
- [12] M. Hautakorpi, M. Mattinen and H. Ludvigsen, "Surface-plasmon-resonance sensor based on three-hole microstructured optical fiber," *Optics Express*, vol. 16, pp. 8427-8432, 2008.
- [13] B. Gauvreau, A. Hassani, M. F. Fehri, A. Kabashin and M. Skorobogatiy, "Photonic bandgap fiber-based surface plasmon resonance sensors," *Optics Express*, vol. 15, pp. 11413-11426, 2007.
- [14] E. Anemogiannis, E. N. Glytsis and T. K. Gaylord, "Transmission characteristics of long-period fiber gratings having arbitrary azimuthal/radial refractive index variations," *Journal of Lightwave Technology*, vol. 21, pp. 218-228, 2003.
- [15] J. Jung and M. Kim, "Optimal design of fiber-optic surface plasmon resonance sensors," *Journal of Optical Society of Korea*, vol. 11, pp. 55-58, 2007.
- [16] Y. Al-Qazwini, P. T. Arasu and A. Noor, "Numerical investigation of the performance of an SPR-based optical fiber sensor in an aqueous environment using finite-difference time domain," *2011 2nd International Conference on Photonics*, vol. 1, pp. 1-4, 2011.
- [17] J. Baptista, *Comunicações óticas*, Universidade de Madeira, Funchal: Centro de Competências de Ciências Exatas e da Engenharia, 2010.
- [18] H. Salgado, *Comunicações óticas*, Universidade do Porto: Engenharia Electrotécnica e de Computadores, 2007.
- [19] L. Thévenaz, "Advanced fiber optics: concepts and technology", Lausanne, Switzerland: EFPL Press, 2011.
- [20] A. K. Sharma and B. D. Gupta, "Fibre-optic sensor based on surface plasmon resonance with Ag–Au alloy nanoparticle films," *Nanotechnology*, vol. 17, no. 1, pp. 124-131, 2006.
- [21] M.-H. Chiu and C.-H. Shih, "Searching for optimal sensitivity of single-mode D-type optical fiber sensor in the phase measurement," *Sensors and Actuators B*:

- Chemical*, vol. 131, no. 2, pp. 596-601, 2008.
- [22] D. Viegas, "*Sensing Devices Based on Micro-Optic Technology*", Tese de Doutoramento em Física, Faculdade de Ciências da Universidade do Porto: Faculdade de Ciências da Universidade do Porto, 2010.
- [23] A. Abbas, "Surface Plasmon Resonance," Department of Mechanical Engineering and Materials Science, 2010. [Online]. Available: <http://www.a-abbas.com/index.html>. [Accessed 30- 7- 2012].
- [24] A. K. Sharma, R. Jha and B. D. Gupta, "Fiber-optic sensors based on surface plasmon resonance: A comprehensive review," *IEEE Sensors Journal*, vol. 7, no. 8, pp. 1118-1129, 2007.
- [25] D. J. Sadowski, "BioNavis," BioNavis Ltd., [Online]. Available: <http://www.bionavis.com>. [Accessed 28- 07- 2012].
- [26] A. Otto, "Excitation of nonradiative surface plasma waves in silver by the method of frustrated total reflection," *Zeitschrift für Physik*, vol. 216, pp. 398-410, 1968.
- [28] J. Homola, I. Koudela and S. S. Yee, "Surface plasmon resonance sensors based on diffraction gratings and prism couplers: sensitivity comparison," *Sensors and Actuators Chemical B*, vol. 54, no. 1-2, pp. 16-24, 1999.
- [29] O. Frazão, B. Marques, P. Jorge, J. Baptista and J. Santos, "High birefringence D-type fibre loop mirror used as refractometer," *Sensors and Actuators B: Chemical*, vol. 135, no. 1, pp. 108-111, 2008.
- [30] R. Jorgenson and S. Yee, "A fiber-optic chemical sensor based on surface plasmon resonance," *Sensors and Actuators chemical B*, vol. 12, pp. 213-220, 1993.
- [31] J. Homola, S. S. Yee and G. Gauglitz, "Surface plasmon resonance sensors: review," *Sensors and Actuators Chemical B*, vol. 54, pp. 3-15, 1999.
- [32] R. Jorgenson and S.S. Yee, "Control of the dynamic range and sensitivity of a surface plasmon resonance based fiber optic sensor," *Sensors and Actuators A: Physical*, vol. 43, pp. 44-48, 1994.
- [33] C. Ronot-Trioli, A. Trouillet, C. Veillas and H. Gagnaire, "Monochromatic excitation of surface plasmon resonance in an optical-fibre refractive-index sensor," *Sensors and Actuators A: Physical*, vol. 54, no. 1-3, pp. 589-593, 1996.

- [34] M.-H. Chiu, S.-F. Wang and R.-S. Chang, "D-type fiber biosensor based on surface-plasmon resonance technology and heterodyne interferometry," *Optics letters*, vol. 30, no. 3, pp. 233-235, 2005.
- [35] R. Slavik, J. Homola and J. Ctyroky, "Miniaturization of fiber optic surface plasmon resonance sensor," *Sensors and Actuators Chemical: B*, vol. 51, pp. 311-315, 1998.
- [36] A. J. C. Tubb, F. P. Payne, R. B. Millington and C. R. Lowe, "Single-mode optical fibre surface plasma wave chemical sensor," *Sensors and Actuators Chemical: B*, vol. 41, pp. 71-79, 1997.
- [37] R. K. Verma, A. K. Sharma and B. D. Gupta, "Modeling of tapered fiber-optic surface plasmon resonance sensor with enhanced sensitivity," *IEEE Photonics Technology Letters*, vol. 19, no. 22, pp. 1786-1788, 2007.
- [38] R. Verma and B. Gupta, "Surface plasmon resonance based tapered fiber optic sensor with different taper profiles," *2009 14th OptoElectronics and Communications Conference*, vol. 4, no. 1, pp. 1-2, 2009.
- [39] H. Suzuki, M. Sugimoto, Y. Matsui and J. Kondoh, "Effects of gold film thickness on spectrum profile and sensitivity of a multimode-optical-fiber SPR sensor," *Sensors and Actuators B: Chemical*, vol. 132, no. 1, pp. 26-33, 2008.
- [40] R. K. Verma and B. D. Gupta, "Surface plasmon resonance based U-shaped fiber optic sensor with enhanced sensitivity," in *ICOP 2009-International Conference on Optics and Photonics*, CSIO, Chandigarh, India, 2009.
- [41] M. Erdmanis, D. Viegas, M. Hautakorpi, S. Novotny, J. L. Santos and H. Ludvigsen, "Comprehensive numerical analysis of a surface-plasmon-resonance sensor based on an H-shaped optical fiber," *Optics express*, vol. 19, no. 15, pp. 13980-13988, 2011.
- [42] P. Palaia, M. Satyanarayanb, M. Dasb and K. Thyagarajanb, "Characterization and simulation of long period gratings fabricated using electric discharge," *Optics Communications*, vol. 193, no. 1-6, pp. 181-185, 2001.
- [43] B. Špačková, M. Piliarik, P. Kvasnička, C. Themistos, M. Rajarajan and J. Homola, "Novel concept of multi-channel fiber optic surface plasmon resonance

- sensor," *Sensors and Actuators B: Chemical*, vol. 139, no. 1, pp. 199-203, 2009.
- [44] S.-W. L. Seong-Je Park, S. Jeong, J.-H. Lee, H.-H. Park, D.-G. Choi, J.-H. Jeong and J.-H. Choi, "Nanosilver Colloids-Filled Photonic Crystal Arrays for Photoluminescence Enhancement," *Nanoscale research letters*, vol. 5, no. 10, pp. 1590-1595, 2010.
- [45] M. Hautakorpi, M. Mattinen and H. Ludvigsen, "Surface-plasmon-resonance sensor based on three-hole microstructured optical fiber," *Optics express*, vol. 16, no. 12, pp. 8427-8432, 2008.
- [46] B. Gauvreau, A. Hassani, M. Fassi Fehri, A. Kabashin and M. Skorobogatiy, "Photonic bandgap fiber-based Surface Plasmon Resonance sensors.," *Optics express*, vol. 15, no. 18, pp. 11413-11426, 2007.
- [47] M. Kanso, S. Cuenot and G. Louarn, "Sensitivity of Optical Fiber Sensor Based on Surface Plasmon Resonance: Modeling and Experiments," *Plasmonics*, vol. 3, no. 2-3, pp. 49-57, 2008.
- [48] Y. S. Dwivedi, A. K. Sharma and B. D. Gupta, "Influence of Design Parameters on the Performance of a Surface Plasmon Sensor Based Fiber Optic Sensor," *Plasmonics*, vol. 3, no. 2-3, pp. 79-86, 2008.
- [49] A. K. Sharma and B. D. Gupta, "Comparison of Performance Parameters of Conventional and Nano-plasmonic Fiber Optic Sensors," *Plasmonics*, vol. 2, no. 2, pp. 51-54, 2007.
- [50] A. K. Sharma and G. J. Mohr, "Theoretical understanding of an alternating dielectric multilayer-based fiber optic SPR sensor and its application to gas sensing," *New Journal of Physics*, vol. 10, no. 2, pp. 023-039, 2008.
- [51] D. Monzón-Hernández and J. Villatoro, "High-resolution refractive index sensing by means of a multiple-peak surface plasmon resonance optical fiber sensor," *Sensors and Actuators B: Chemical*, vol. 115, no. 1, pp. 227-231, 2006.
- [52] S.-F. Wang, M.-H. Chiu, J.-C. Hsu, R.-S. Chang and F.-T. Wang, "Theoretical analysis and experimental evaluation of D-type optical fiber sensor with a thin gold film," *Optics Communications*, vol. 253, no. 4-6, pp. 283-289, 2005.
- [53] M. Piliarik, J. Homola, Z. Maníková and J. Čtyroký, "Surface plasmon resonance
-

- sensor based on a single-mode polarization-maintaining optical fiber," *Sensors and Actuators B: Chemical*, vol. 90, no. 1-3, pp. 236-242, 2003.
- [54] A. Méndez and T. F. Morse, "Specialty Optical Fibers Handbook", San Diego, California: Academic Press, 2007, pp. 39-40.
- [55] R. Slavik, J. Homola and J. Ctyroky, "Modelling of surface plasmon resonance waveguide sensor by complex mode expansion and propagation method," *Optical and Quantum Electronics*, vol. 29, pp. 301-311, 1997.
- [56] B. Lee, S. Roh, H. Kim and J. Jung, "Waveguide-based surface plasmon resonance sensor design," *Proc. SPIE*, vol. 7420, p. 74200C, 2009.
- [57] "Lumerical," Lumerical Solutions, Inc., 2003. [Online]. Available: <http://www.lumerical.com/>. [Accessed 12 -8 -2012].
- [58] "COMSOL," COMSOL, 1998. [Online]. Available: <http://www.comsol.com/>. [Accessed 13 -8 -2012].
- [59] M. Fliziani and F. Maradei, "Edge element analysis of complex configurations in presence of shields," *IEEE transactions on Magnetics*, vol. 33, no. 2, pp. 1548-1551, 1997.
- [60] J. A. R. Azevedo, *Radiação e propagação*, Universidade de Madeira, Funchal: Centro de Competências de Ciências Exatas e da Engenharia, 2009.
- [61] P. Viale, S. Février, F. Gérôme and H. Vilard, "Confinement loss computations in photonic crystal fibres using a novel perfectly matched layer design," in *COMSOL Multiphysics User's Conference 2005*, Paris, 2005.
- [62] O. Frazão, J. M. Baptista and J. L. Santos, "Recent Advances in High-Birefringence Fiber Loop Mirror Sensors," *Sensors (Peterborough, NH)*, vol. 7, pp. 2970-2983, 2007.
- [63] H.-H. Yeh and Y.-F. Chau, "The Analysis of high birefringence photonic crystal fiber with elliptical air holes cladding," in *COMSOL Users Conference*, Taipei, 2007.

Anexo A Publicações decorrentes do trabalho realizado

1. D. F. Santos, A. Guerreiro, and J. M. Baptista, "Numerical investigation of a refractive index SPR D-type optical fiber sensor using COMSOL multiphysics", *Photonic Sensors*, 2012.

Photonic Sensors

DOI: 10.1007/s13320-012-0080-5

Photonic Sensors

Regular

Numerical Investigation of a Refractive Index SPR D-Type Optical Fiber Sensor Using COMSOL Multiphysics

D. F. SANTOS^{1,3}, A. GUERREIRO^{2,3}, and J. M. BAPTISTA^{1,3*}

¹*Centro de Ciências Exatas e da Engenharia, Universidade da Madeira, Funchal, Portugal*

²*Faculdade de Ciências da Universidade do Porto, Portugal*

³*INESC TEC, Porto, Portugal*

*Corresponding author: J. M. BAPTISTA E-mail: jmb@uma.pt

Abstract: Recently, many programs have been developed for simulation or analysis of the different parameters of light propagation in optical fibers, either for sensing or for communication purposes. In this paper, it is shown the COMSOL Multiphysics as a fairly robust and simple program, due to the existence of a graphical environment, to perform simulations with good accuracy. Results are compared with other simulation analysis, focusing on the surface plasmon resonance (SPR) phenomena for refractive index sensing in a D-type optical fiber, where the characteristics of the material layers, in terms of the type and thickness, and the residual fiber cladding thickness are optimized.

Keywords: Refractive index sensor, optical fiber sensor, surface plasmon resonance, light propagation simulation, COMSOL Multiphysics, graphical environment

Citation: D. F. SANTOS, A. GUERREIRO, and J. M. BAPTISTA, "Numerical Investigation of a Refractive Index SPR D-Type Optical Fiber Sensor Using COMSOL Multiphysics," *Photonic Sensors*, DOI: 10.1007/s13320-012-0080-5.

1. Introduction

To estimate the behavior of an optical fiber sensor, it is very important to use a simulation tool to analyze parameters such as: magnetic and electric field intensities, effective refractive index, among others. Several difficulties exist in developing a good simulation program, including the necessary approximations when writing the code for 2D or 3D [1]. In particular, when the sensor structure is complex, the calculation becomes too cumbersome, and it is necessary to use simplified methods, for example: expansion and propagation method (MEP) and the method for multilayer structure transfer matrix modeling [2–3]. The latter allows a better approximation to the optical fiber cylindrical structure [4], but fails to get good results for

nano-structures in optical fibers [1]. One solution is to use finite-difference time domain (FDTD), which allows computing the magnetic and electric field distribution, but requires huge quantity of computing memory [5]. In this paper, we demonstrate another method of studying the behavior of optical fiber sensors based on the surface plasmon resonance (SPR) using COMSOL Multiphysics, a commercial program that uses finite element method (FEM).

On the other hand, D-type fiber is an optical fiber with numerous applications in optical sensing for different areas of engineering. Gas detection [6] and curvature sensing [7] are examples of sensing applications using this fiber. The D-type fiber has also been implemented as a biosensor using the surface-plasmon resonance technology [8, 9]. In this

simulation work, we improved the design of an SPR refractive index sensor, based on a D-type optical fiber, where the characteristics of the material layers, in terms of type and thickness, and the residual fiber cladding thickness were optimized.

2. Theory

We have analyzed an optical fiber sensor based on SPR composed by a D-type fiber spliced between two single mode fibers, as shown in Fig. 1. The main design parameters of the sensor included the length of the sensor L , the radius and refractive index of the core (r_c and n_c , respectively) and of the cladding ($r_{clad,d}$ and $n_{clad,d}$, respectively), the distance between the core and the metal d (the residual cladding), the thickness of the metal d_m , and the refractive index of the external medium n_{ext} .

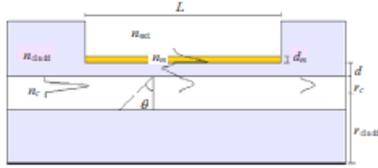


Fig. 1 Typical structure and behavior of a D-type fiber optic sensor based on SPR.

The losses of the light propagating in the fiber were determined by the tuning between the wavelength of the light beam and the SPR which was strongly dependent on the refractive index of the external medium. The transmission coefficient of the sensor could be used to assess with accuracy the value of n_{ext} .

2.1 Calculated transmission coefficient using COMSOL

In this work, we have conducted a 2D analysis of the mode structure and the electromagnetic field modes along the transverse plane of a D-type fiber using the mode analysis utilities of COMSOL Multiphysics. The electromagnetic fields in optical fiber waveguides are governed by the macroscopic Maxwell's equations in the absence of currents or external electric charges:

$$\nabla \times \mathbf{E}(r,t) = -\frac{\partial \mathbf{B}(r,t)}{\partial t} \quad (1)$$

$$\nabla \times \mathbf{H}(r,t) = -\mathbf{J}(r,t) + \frac{\partial \mathbf{D}(r,t)}{\partial t} \quad (2)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{D}(r,t) = \rho \mathbf{B}(r,t) \quad (3)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B}(r,t) = 0 \quad (4)$$

where \mathbf{E} , \mathbf{H} , \mathbf{D} and \mathbf{B} are the electric, the magnetic, the dielectric and the magnetic induction fields, respectively. Also, the term \mathbf{J} is the current density, ρ is the charge density, \mathbf{r} is the spatial coordinate, and t denotes time. The time-harmonic solutions describing strictly monochromatic fields are of the form

$$\mathbf{E}(r,t) = \mathbf{E}(r,\omega)e^{-j\omega t} \quad (5)$$

$$\mathbf{H}(r,t) = \mathbf{H}(r,\omega)e^{-j\omega t} \quad (6)$$

where ω is the angular frequency of light. In this representation, the fields are complex quantities whose real parts correspond to the physical fields [10].

In linear, isotropic, and nonmagnetic media, the following constitutive relations are

$$\mathbf{D}(r,t) = \epsilon_0 \epsilon_r \mathbf{E}(r,\omega)e^{-j\omega t} \quad (7)$$

$$\mathbf{B}(r,t) = \mu_0 \mathbf{H}(r,\omega)e^{-j\omega t} \quad (8)$$

where ϵ_0 and μ_0 are the permittivity and permeability of free space, respectively, and ϵ_r denotes the relative, material-dependent permittivity. In general, these quantities are functions of the spatial coordinates. Taking the curl of (1) and using (3), (7) and (8) yields the wave equation for the Fourier components electric field [10]:

$$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{E}(r,\omega) - k_0^2 [\tilde{\epsilon}_r(r,\omega)] \mathbf{E}(r,\omega)) = 0 \quad (9)$$

the same is the magnetic field:

$$\nabla \times [\tilde{\epsilon}_r(r,\omega)]^{-1} \nabla \times \mathbf{H}(r,\omega) - k_0^2 \mathbf{H}(r,\omega) = 0 \quad (10)$$

where $c = \sqrt{\epsilon_0 \mu_0}$ is the speed of light, and $k_0 = \omega c^{-1}$ is the wave number of the mode of the field. The term $\tilde{\epsilon}_r(r,\omega) = \epsilon_r(r,\omega) - j\sigma(r,\omega)/\omega\epsilon_0$ represents the complex relative dielectric function written in terms of the material-dependent (real valued) relative permittivity ϵ_r and the Ohmic conductivity of the material $\sigma(r,\omega)$.

In optical fibers, the dependency in the spatial z coordinate along the axis is obtained using the variable separation method:

$$E_i(r, \omega) = E_i(r_{\perp}, \omega) e^{-j\omega\beta_i z} \quad (11)$$

$$H_i(r, \omega) = H_i(r_{\perp}, \omega) e^{-j\omega\beta_i z} \quad (12)$$

where β_i is the propagation constant of the i -th mode, and r_{\perp} is the position vector in the plane perpendicular to the optical axis. The solutions of (9) and (10) were obtained using the FEM, which basically consists in dividing the simulation domain into smaller subdomains forming a mesh as shown in Fig. 2. The subdomains have different sizes and are smaller near the interfaces between different media to account for steeper variations of the field. The field equations are then discretized into an algebraic system of equations and solved for their characteristic eigenvalues.

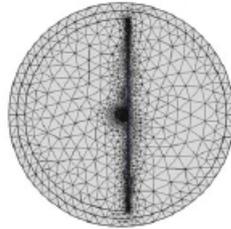


Fig. 2 Structure of the finite elements in COMSOL Multiphysics for a D-type optical fiber with a metallic layer for SPR.

The electric and magnetic fields are dependent on the angular frequency [(9) and (10)] as well as on the refractive index of the materials. For that, it is necessary to calculate the material's refractive index for all frequencies under study. For a dielectric layer, in this case of an optical fiber, it is possible to use the Sellmeier equation [3]

$$n^2(\lambda) = 1 + \sum_{q=1}^3 \frac{B_q \lambda^2}{\lambda^2 - C_q} \quad (13)$$

where B_q , C_q are the Sellmeier coefficients, determined experimentally [11], for a germanium-doped silica core fiber and fluorine-doped silica cladding. For the metallic layer, the permittivity and the refractive index can be obtained from the Drude model as

$$\varepsilon_m(\lambda) = 1 - \frac{\lambda^2 \lambda_c}{\lambda_p^2 (\lambda_c + j\lambda)} \quad (14)$$

$$n_m(\lambda) + jk_m(\lambda) = \sqrt{\varepsilon_m(\lambda)} \quad (15)$$

where n_m and k_m are the real and imaginary values of the refractive index for the metal, respectively, ε_m is the permittivity complex metal, and λ_c and λ_p denote the plasma wavelength and the collision wavelength, respectively, that is defined in [3] for the metals Ag, Au, Cu and Al.

Figure 3 illustrates the intensity of the electric field using the study "Mode Analyses" from COMSOL Multiphysics, for the structure of Fig. 1 and the mesh of Fig. 2 with [Fig. 3(a)] and without [Fig. 3(b)] a metallic layer, in this case of a 65-nm-thickness gold layer. The wavelength of the light was 802 nm. The study allowed confirming the single-mode behavior propagation in the optical fiber.

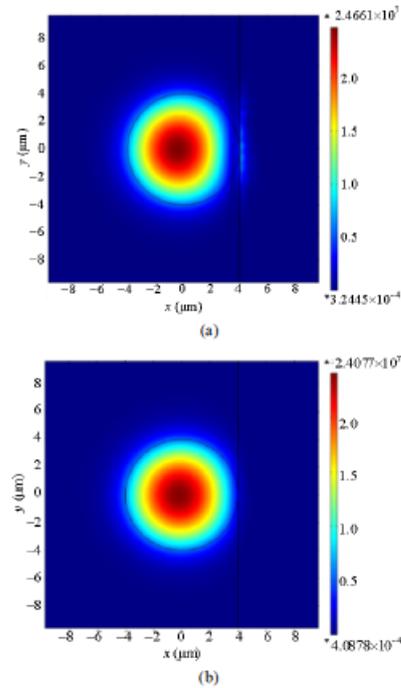


Fig. 3 Electric field distribution 2D near the fiber core for $\lambda=802\text{nm}$ (a) with the metal (Au) with a thickness of 65 nm and (b) without the metal.

The 1D electrical field amplitude in the optical fiber is also shown in Figs. 4(a) and 4(b), with and without a metallic layer, respectively. Comparing both figures, it is possible to see the electric field intensity external to the fiber is stronger when using the metal.

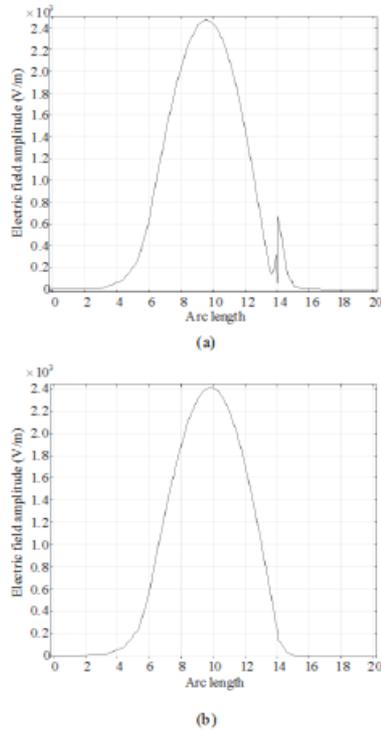


Fig. 4 Electric field amplitude 1D across the fiber core for $\lambda=802$ nm (a) with the metal (Au) with a thickness of 65 nm and (b) without the metal.

Based on the simulation results provided by the COMSOL Multiphysics, one can compute the effective refractive index n_{eff} of the sensor [5] and from it the transmission coefficient T as a function of the wavelength λ , the external refractive index n_{ext} and the thickness of the metal d_m , according to the expression

$$T(\lambda, n_{\text{ext}}, d_m) = e^{-2n_{\text{eff}}(\lambda, n_{\text{ext}}, d_m)k_z L}. \quad (16)$$

2.2 Transmission coefficient calculated using Fresnel laws

To verify that the method works properly, a comparison was made with the implemented algorithm in [12], which used Fresnel equations applied to the structure in Fig. 1, allowing the transmission intensity to be written (for four layers) as

$$T(\lambda, n_{\text{ext}}, d) = (r_{1234})^{2L} e^{i2k_z d} \quad (17)$$

where r_{1234} is the reflective coefficient for four layers as written

$$r_{1234} = \frac{r_{12} + r_{234} e^{i2k_z d}}{1 + r_{12} r_{234} e^{i2k_z d}} \quad (18)$$

where the reflective coefficients for three layers and two layers are, respectively

$$r_{234} = \frac{r_{23} + r_{34} e^{i2k_z d}}{1 + r_{23} r_{34} e^{i2k_z d}} \quad (19)$$

$$r_{ij} = \frac{n_i^2 / k_i - n_j^2 / k_j}{n_i^2 / k_i + n_j^2 / k_j} \quad (20)$$

where k_i is the component of the wave vector of the interface of the two layers of the sensor in the direction z and is given as $k_i = k_0(n_i^2 - n_4 \sin^2 \theta)^{1/2}$, where n_1 , n_2 , n_3 and n_4 represent the refractive indices of the core, cladding, metal and the external test medium, respectively.

Applying (16) and (17), it is possible to obtain the results by the two different methods, as shown in Fig. 5. The behavior of the two methods was similar, having a difference between the transmission coefficients and a small shift in the wavelength dips. We attributed this difference to the fact that in the Fresnel equations' algorithm it is only considered planar waves in a fairly symmetrical arrangement. On the other hand, when using the FEM, we considered the D-type fiber as a non-symmetrical cylindrical waveguide, being able to model the inhomogeneous optical regions with a resolution of the cell size, resulting in a more accurate outcome. In terms of the results and in what concerns the material thickness, the optimal point occurred when a layer with a thickness of 55 nm to 65 nm was used.

Another way to test the efficiency of the described procedure is to calculate the sensor sensitivity (λ/RIU) as function of the different refractive indices of the external environment. The sensitivity for both methods is almost equal and is close to 3150 nm/RIU [2].

Tailoring the simulation analysis in COMSOL Multiphysics, it is possible to optimize the sensitivity, transmission coefficient dip, wavelength operation area, amongst others for a refractive index SPR D-type optical fiber sensor. To decrease the depth of the transmission coefficient dip and consequently lower the sensitivity of the external medium, d can be increased, as shown in Fig. 6.

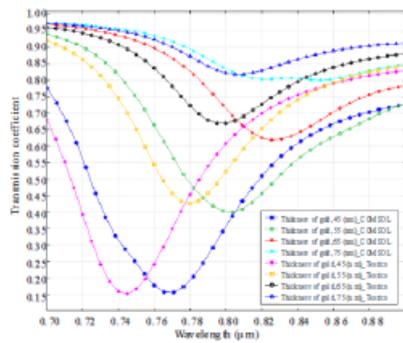


Fig. 5 Transmission coefficient T as a function of the wavelength and metallic layer thicknesses (Au), $d_m=0 \mu\text{m}$, $L=1 \text{ mm}$, $n_{\text{ext}}=1.3943$ and $\theta=88.85^\circ$.

From Figs. 5 and 6, it is possible to have a sensor that works for an area of operation near 820 nm, for a metal thickness of 65 nm (Au).

In case another wavelength is required, one possible solution is to apply an additional layer of a dielectric with a high refractive index, such as tantalum pentoxide (Ta_2O_5)[1–2], which simulation results can be seen in Fig.7 and compared with the results presented in [2]. For different thicknesses of Ta_2O_5 , the transmission coefficient dip of the sensor operation is not significantly altered being possible to tailor the wavelength sensor operation [2].

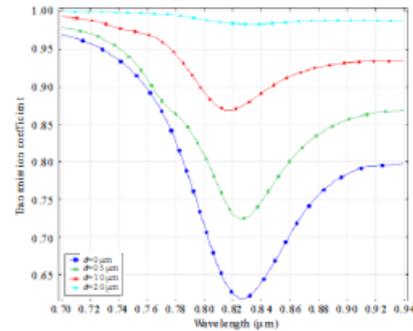


Fig. 6 Simulation of transmission coefficient of the sensor, for different cladding thicknesses: in this simulation, the thickness of the gold layer is 65 nm, and the refractive index of the external environment is 1.3934.

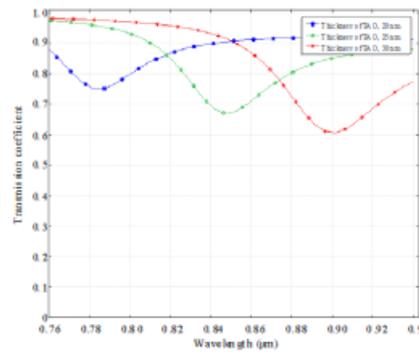


Fig. 7 Simulation of transmission coefficient T of the sensor for different thicknesses of the dielectric (Ta_2O_5); the thickness of the gold is 65 nm and $n_{\text{ext}}=1.329$.

3. Conclusions

Another method was demonstrated to study the behavior of optical fiber sensors for refractive index measurement based on SPR using COMSOL Multiphysics, a commercial program that uses the finite element method. The two simulations, one with COMSOL Multiphysics and the other with Fresnel's equations, present a similar behavior. The graphical interface of COMSOL Multiphysics facilitates the simulation work, having no need to

develop complex formulations. Also, it has the ability to model inhomogeneous optical regions with a resolution of the cell size and allows the analysis of other parameters such as the intensity of magnetic and electric field across the structure [13]. COMSOL Multiphysics permits in a graphical environment more accurate and realistic results than traditional approaches, although at the expense of longer running time.

It was also possible to demonstrate the use of COMSOL Multiphysics to improve the performance of a refractive index SPR D-type optical fiber sensor, where the characteristics of the material layers, in terms of the type and thickness, and the residual fiber cladding thickness are optimized.

Open Access This article is distributed under the terms of the Creative Commons Attribution License which permits any use, distribution, and reproduction in any medium, provided the original author(s) and source are credited.

References

- [1] B. Lee, S. Roh, and J. Park, "Current status of micro- and nano-structured optical fiber sensors," *Optical Fiber Technology*, vol. 15, no. 3, pp. 209–221, 2009.
- [2] R. Slavik, J. Homola, J. Ctyroky, and E. Brynda, "Novel spectral fiber optic sensor based on surface plasmon resonance," *Sensors and Actuators B: Chemical*, vol. 74, no. 1–4, pp. 106–111, 2001.
- [3] A. K. Sharma and B. D. Gupta, "On the performance of different bimetallic combinations in surface plasmon resonance based fiber optic sensors," *Journal of Applied Physics*, vol. 101, no. 9, p. 093111-1–093111-6, 2007.
- [4] E. Anemogiannis, E. N. Glytsis, and T. K. Gaylord, "Transmission characteristics of long-period fiber gratings having arbitrary azimuthal/radial refractive index variations," *Journal of Lightwave Technology*, vol. 21, no. 1, pp. 218–227, 2003.
- [5] Y. Al-Qazwini, P. T. Arasu, and A. S. M. Noor, "Numerical investigation of the performance of an SPR-based optical fiber sensor in an aqueous environment using finite-difference time domain," in *Proc. 2011 2nd International Conference on Photonics*, Oct. 17–19, vol. 1, pp. 1–4, 2011.
- [6] B. Culshaw, F. Muhammad, R. Van Ewyk, G. Stewart, S. Murray, D. Pinchbeck, *et al.*, "Evanescent wave methane detection using optical fibers," *Electronics Letters*, vol. 28, no. 24, pp. 2232–2234, 1992.
- [7] F. M. Araújo, L. A. Ferreira, J. L. Santos, and F. Farahi, "Temperature and strain insensitive bending measurements with D-type fiber Bragg gratings," *Measurement Science and Technology*, vol. 12, no. 7, pp. 829–833, 2001.
- [8] M. H. Chiu, S. F. Wang, and R. S. Chang, "D-type fiber biosensor based on surface-plasmon resonance technology and heterodyne interferometry," *Optics Letters*, vol. 30, no. 3, pp. 233–235, 2005.
- [9] Y. Chen and H. Ming, "Review of surface plasmon resonance and localized surface plasmon resonance sensor," *Photonics Sensors*, vol. 2, no. 1, pp. 37–49, 2012.
- [10] M. Fliziani and F. Maradei, "Edge element analysis of complex configurations in presence of shields," *IEEE Transactions on Magnetics*, vol. 33, no. 2, pp. 1548–1551, 1997.
- [11] A. Méndez and T. F. Morse, *Specialty Optical Fibers Handbook*. San Diego, California: Academic Press, 2007, pp. 39–40.
- [12] M. H. Chiu, C. H. Shih, and M. H. Chi, "Optimum sensitivity of single-mode D-type optical fiber sensor in the intensity measurement," *Sensors and Actuators B: Chemical*, vol. 123, no. 2, pp. 1120–1124, 2007.
- [13] D. Christensen and D. Fowers, "Modeling SPR sensors with the finite-difference time-domain method," *Biosensors & Bioelectronics*, vol. 11, no. 6, pp. 677–684, 1996.

1. D. F. Santos, A. Guerreiro and J. M. Baptista “Surface plasmon resonance sensor simulation using COMSOL multiphysics”, SEON 2012 – X Symposium on Enabling Optical Networks, Porto, Portugal, 2012.

1

Surface plasmon resonance sensor simulation using COMSOL Multiphysics

D. F. Santos¹, A. Guerreiro^{2,3}, J. M. Baptista^{1,3}

¹Centro de Competências de Ciências Exactas e da Engenharia, Universidade da Madeira, Funchal, Portugal.²Faculdade de Ciências da Universidade do Porto, Portugal.³INESC TEC, Porto, Portugal.

Abstract—Recently, many programs have been developed for simulation or analysis of the different parameters of light propagation in optical fibers, either for sensing or for communication purposes. In this paper it is shown the COMSOL Multiphysics as a fairly robust and simple program, due the existence of a graphical environment, to perform the simulations with good accuracy. Results are compared with other simulation analysis, focusing on surface plasmon resonance (SPR) phenomena.

Index Terms—light propagation simulation, COMSOL Multiphysics, fiber optics, surface plasmon resonance, graphical environment

I. INTRODUCTION

TO estimate the behavior of an optical fiber sensor, it is very important to use a simulation tool to analyze parameters such as: magnetic and electric field intensity, effective refractive index, among others. Several difficulties exist in developing a good simulation program, including the necessary approximations when writing the code for 2D or 3D [1]. In particular, when the sensor structure is complex, the calculation becomes too cumbersome and it is necessary to use simplified methods, for example: expansion and propagation method (MEP) and the method for multilayer structure transfer matrix modeling [2], [3]. The latter allows a better approximation to the optical fiber cylindrical structure [4], fails to get good results for nano-structures optical fibers [1]. One solution is to use finite-difference time domain (FDTD), which allows to compute the magnetic and electric field distribution, but requires huge quantity of computing memory [5].

In this paper, we demonstrate another method of studying the behavior of optical fiber sensors based on SPR using COMSOL Multiphysics, a commercial program that uses finite element method (FEM).

II. THEORY

We have analyzed an optical fiber sensor based on SPR composed by a D-type fiber spliced into a single mode fiber, as is shown in Figure 1. The main design parameters of the sensor include the length of the sensor L , the radius and refraction index of the core (respectively r_c and n_c) and of the cladding (respectively r_{cladd} and n_{cladd}), the distance between the core and the metal d , the thickness of the metal d_m and the index of refraction of the external medium n_{ext} .

The losses of the light propagating in the fiber are determined by the tuning between the wavelength of beam and the SPR which is strongly dependent on the refractive index

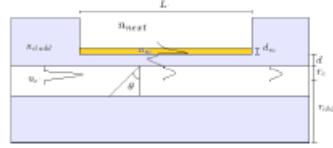


Figure 1. Typical behavior of a fiber optic sensor based on SPR

of the external medium. The transmission coefficient of the sensor can be used to assess with accuracy the value of n_{ext} .

A. Transmission coefficient calculated using COMSOL

In this work we have conducted a 2D analysis of the mode structure and the electromagnetic field modes along the transverse plane of a D-type fiber using the mode analysis utilities of COMSOL. The simulation package computes the field spatial eigenmodes by solving the wave equations [6]

$$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega)) - k_0^2 [\tilde{\epsilon}_r(\mathbf{r}, \omega)] \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) = 0 \quad (1)$$

$$\nabla \times \left\{ [\tilde{\epsilon}_r(\mathbf{r}, \omega)]^{-1} \nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega) \right\} - k_0^2 \mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega) = 0 \quad (2)$$

where \mathbf{E} , \mathbf{H} , \mathbf{D} and \mathbf{B} are the electric, the magnetic, the dielectric and the magnetic induction fields amplitudes at the spatial coordinate \mathbf{r} associated with monochromatic time-harmonic waves with frequency ω . Also, $c = \sqrt{\epsilon_0 \mu_0}$ is the speed of light, ϵ_0 and μ_0 are the permittivity and permeability of free space, respectively and $k_0 = \omega c^{-1}$ is the wavenumber of the mode of the field. The term $\tilde{\epsilon}_r = \epsilon_r(\mathbf{r}, \omega) - j\sigma(\mathbf{r}, \omega)/\omega\epsilon_0$ represents the complex relative dielectric function written in terms of the material-dependent (real valued) relative permittivity ϵ_r and the Ohmic conductivity of the material $\sigma(\mathbf{r}, \omega)$.

In optical fibers, the dependency in the spatial z coordinate along the axis is obtained using the variable separation method

$$\mathbf{E}_i(\mathbf{r}, \omega) = \mathbf{E}_i(\mathbf{r}_\perp, \omega) e^{-j\omega\beta_i z} \quad (3)$$

$$\mathbf{H}_i(\mathbf{r}, \omega) = \mathbf{H}_i(\mathbf{r}_\perp, \omega) e^{-j\omega\beta_i z} \quad (4)$$

where β_i is the propagation constant of the i -th mode and \mathbf{r}_\perp is the position vector in the plane perpendicular to the optical axis. The solution of equation (1) and (2) were obtained using FEM, which basically consists in dividing the simulation domain into smaller subdomains forming a Mesh as shown in Figure 2a). The subdomains have different sizes and are

smaller near the interfaces between different media to account for steeper variations of the field. The field equations are then discretized into an algebraic system of equations and solved for their characteristic eigenvalues. A solution of the electric field distribution near the fiber core is presented in figure 2b).

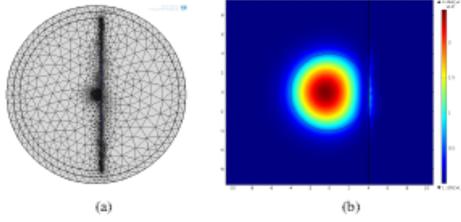


Figure 2. a) Structure of the finite elements in COMSOL. b) Electric field distribution 2D near the fiber core.

Based on the COMSOL results, it is possible to compute the effective refractive index of the sensor [5] and from it the transmission coefficient T as a function of the wavelength λ , external refractive index n_{ext} and thickness of the metal d_m according to the expression

$$T(\lambda, n_{ext}, d) = e^{-2n_{eff}(\lambda, n_{ext}, d)k_0L}. \quad (5)$$

The results are shown in Figure 3.

B. Transmission coefficient calculated using Fresnel laws

To verify that the method works properly a comparison is made with the implemented algorithm in [7] which uses Fresnel equations applied to the structure of Figure 1, allowing the transmission intensity to be written as

$$T(\lambda, n_{ext}, d) = (r_{1234})^{L/r_c \tan \theta} = \left(\frac{r_{12} + r_{123} e^{i2k_2 d}}{1 + r_{12} r_{234} e^{i2k_2 d}} \right)^{L/r_c \tan \theta} \quad (6)$$

where the reflective coefficient for three layers and two layers

$$r_{234} = \frac{r_{23} + r_{34} e^{i2k_3 d_m}}{1 + r_{23} r_{34} e^{i2k_3 d_m}} \quad (7)$$

$$r_{ij} = \frac{n_i^2/k_i - n_j^2/k_j}{n_i^2/k_i + n_j^2/k_j} \quad (8)$$

where k_j is the component of the wave vector of the interface of the two layers of the sensor in the direction z and is given a $k_i = k_0(n_i^2 - n_1 \sin^2 \theta)^{1/2}$ where n_1, n_2, n_3 and n_4 represent the refractive index of the core, cladding, metal and the external test medium, respectively. Applying equation (6) and (5), it is possible to obtain the results by different methods, as shown in Figure 3. The behavior of the two methods is similar, having a difference between in the transmission coefficient for the intensity and a small shift in the wavelength dip. In terms of the material thickness, the optimal point is when a layer of 55 to 65 nm is used.

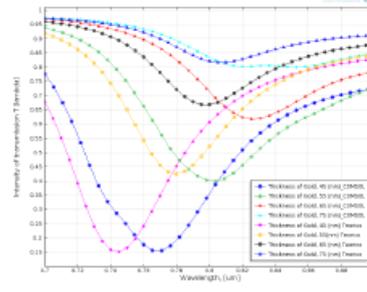


Figure 3. Transmission coefficient T as a function of wavelength and metallic layer thicknesses (Au), $d_m = 0$, $L = 1 \text{ mm}$ and $\theta = 88.85^\circ$.

Another way to test the efficiency of the described procedure is to calculate the sensor sensitivity (λ/RIU) as function of the different refractive index of the external environment. The sensitivity for both methods are almost equal and is close to 3150 nm / RIU.

III. CONCLUSIONS

It was demonstrated another method of studying the behavior of optical fiber sensors based on SPR using COMSOL Multiphysics, a commercial program that uses finite element method (FEM). The two simulations, one with COMSOL and the other with Fresnel's equations present a similar behavior. In COMSOL an angle of incidence is not defined since only a fiber section is analyzed. The graphical interface of COMSOL facilitates the simulation work, having no need to develop complex formulations. Also allows the analysis of other parameters such as the intensity of magnetic and electric field across the structure (Figure 4). COMSOL allows for more accurate and realistic results than traditional approaches, although at the expense of longer running times.

REFERENCES

- [1] B. Lee, S. Roh, and J. Park, "Current status of micro- and nano-structured optical fiber sensors," *Optical Fiber Technology*, vol. 15, no. 3, pp. 209–221, Jun. 2009.
- [2] E. Brynda, "Novel spectral fiber optic sensor based on surface plasmon resonance," *Sensors And Actuators*, vol. 74, pp. 106–111, 2001.
- [3] A. K. Sharma and B. D. Gupta, "On the performance of different bimetallic combinations in surface plasmon resonance based fiber optic sensors," *Journal of Applied Physics*, vol. 101, no. 9, p. 093111, 2007.
- [4] E. Anemogiannis, S. Member, and E. N. Glytsis, "Transmission Characteristics of Long-Period Fiber Gratings Having Arbitrary Azimuthal / Radial Refractive Index Variations," *Lightwave*, vol. 21, no. 1, pp. 218–227, 2003.
- [5] Y. Al-Qazwini, P. T. Arasu, and A. Noor, "Numerical investigation of the performance of an SPR-based optical fiber sensor in an aqueous environment using finite-difference time domain," *2011 2nd International Conference on Photonics*, vol. 1, pp. 1–4, Oct. 2011.
- [6] E. Engineering, P. Rojo, and F. Maradei, "Edge element analysis of complex configurations in presence of shields," vol. 33, no. 2, pp. 1548–1551, 1997.
- [7] M.-H. Chiu, C.-H. Shih, and M.-H. Chi, "Optimum sensitivity of single-mode D-type optical fiber sensor in the intensity measurement," *Sensors and Actuators B: Chemical*, vol. 123, no. 2, pp. 1120–1124, May 2007.

Anexo B Parâmetros definidos pelo utilizador e COMSOL

Neste anexo são apresentados os parâmetros e equações definidos pelo utilizador como pelo COMSOL multiphysics no estudo.

- Parâmetros e variáveis definidos pelo utilizador

Tabela B.1. Parâmetros utilizados no COMSOL para realizar o estudo.

Parâmetro	Valor	Descrição
a	4	Raio do núcleo
b	60	Raio da bainha
c	60	Raio PML = c+10 e Raio next = c+5
A1core	0.69681	Constante de Sellmeier Sílica núcleo
A2core	0.40817	Constante de Sellmeier Sílica núcleo
A3core	0.89493	Constante de Sellmeier Sílica núcleo
B1core	0.06853	Constante de Sellmeier Sílica núcleo
B2core	0.11612	Constante de Sellmeier Sílica núcleo
B3core	9.914	Constante de Sellmeier Sílica núcleo
A1clad	0.6911	Constante de Sellmeier sílica 1% flúor bainha
A2clad	0.4079	Constante de Sellmeier sílica 1% flúor bainha
A3clad	0.8975	Constante de Sellmeier sílica 1% flúor bainha
B1clad	0.0684	Constante de Sellmeier sílica 1% flúor bainha
B2clad	0.1162	Constante de Sellmeier sílica 1% flúor bainha
B3clad	9.896	Constante de Sellmeier sílica 1% flúor bainha
lamda	0.6328	Comprimento de onda da luz, em [um]
fre	c_const/lamda[um]	Frequência de funcionamento
nclad	1.4378	Índice de refração da fibra convencional (1550 nm), bainha
ncore	1.4457	Índice de refração da fibra convencional (1550 nm), núcleo
next	1.3294	Índice de refração externo
fem	4	Parâmetro que permite estudar a <i>mesh</i>
d	4	Distância que existe entre o centro do núcleo e o corte em "D"
P_Au	1.6826e-7[m]	Comprimento de onda do plasmão, ouro
C_Au	8.9342e-6[m]	Comprimento de onda de colisão, ouro
E0	(8.85e-12[F])/1[m]	Permitividade do vácuo
thickness	2.3	Variável criada para estudar o comprimento das linhas retas.
control	1	Permite colocar (0) ou retirar (1) componentes (metal, dielétrico)
p	9	Foco da parábola
h1	0	Distância do centro, y
k1	0	Distância do centro, x
points	30+2*p	Número de pontos definidos
dhole	1	Diâmetro dos buracos da fibra PCF
shole	2.3	Distância entre os buracos da fibra PCF
x1	-5	Parâmetros da parábola
x2	-4.93329	

Anexos

Parâmetro	Valor	Descrição
x3	-4.72961	
x4	-4.38391	
x5	-3.892	
x6	-3.25093	
x7	-2.45914	
x8	-1.51619	
x9	-0.42251	
x10	0.821001	
x11	2.213176	
x12	3.752781	
x13	5.438608	
y1	0	
y2	-1.1551	
y3	-2.32547	
y4	-3.51023	
y5	-4.70744	
y6	-5.9145	
y7	-7.12862	
y8	-8.34722	
y9	-9.56817	
y10	-10.7898	
y11	-12.011	
y12	-13.2309	
y13	-14.449	
x14	7.269534	
x15	9.244535	
x16	11.3627	
x17	13.62321	
x18	16.02534	
x19	18.56847	
x20	21.25203	
y14	-15.665	
y15	-16.8787	
y16	-18.0902	
y17	-19.2993	
y18	-20.5063	
y19	-21.711	
y20	-22.9138	
x21	24.07551	
x22	27.03846	
x23	30.14049	

Parâmetro	Valor	Descrição
x24	33.38124	
x25	36.76037	
x26	40.2776	
y21	-24.1145	
y22	-25.3134	
y23	-26.5106	
y24	-27.706	
y25	-28.9	
y26	-30.0924	
SPR	65	Espessura do metal, em [nm]
P_Ag	1.451e-7[m]	Comprimento de onda do plasmão, prata
C_Ag	1.7614e-5[m]	Comprimento de onda de colisão, prata
P_Al	1.0657e-7[m]	Comprimento de onda do plasmão, alumínio
C_Al	2.4511e-5[m]	Comprimento de onda de colisão, alumínio
P_Cu	1.3617e-7[m]	Comprimento de onda do plasmão, cobre
C_Cu	4.0852e-5[m]	Comprimento de onda de colisão, cobre
Over	19	Espessura do dielétrico da camada extra, em [nm]
A1core1	0.6867	Constante de Sellmeier sílica germânio, core
A2core1	0.4348	Constante de Sellmeier sílica germânio, core
A3core1	0.8966	Constante de Sellmeier sílica germânio, core
B1core1	0.07268	Constante de Sellmeier sílica germânio, core
B2core1	0.1151	Constante de Sellmeier sílica germânio, core
B3core1	10	Constante de Sellmeier sílica germânio, core

Tabela B.2 Variáveis globais utilizadas no estudo no COMSOL.

Variável	Equação	Descrição
nclad1	$\sqrt{1+(A1clad*\lambda^2)/(\lambda^2-B1clad^2)+(A2clad*\lambda^2)/(\lambda^2-B2clad^2)+(A3clad*\lambda^2)/(\lambda^2-B3clad^2)}$	Equação de Sellmeier que permite calcular a variação do índice de refração da bainha em função do comprimento de onda
ncore1	$\sqrt{1+(A1core*\lambda^2)/(\lambda^2-B1core^2)+(A2core*\lambda^2)/(\lambda^2-B2core^2)+(A3core*\lambda^2)/(\lambda^2-B3core^2)}$	Equação de Sellmeier que permite calcular a variação do índice de refração do núcleo de sílica em função do comprimento de onda
ncore2	$\sqrt{1+(A1core1*\lambda^2)/(\lambda^2-B1core1^2)+(A2core1*\lambda^2)/(\lambda^2-B2core1^2)+(A3core1*\lambda^2)/(\lambda^2-B3core1^2)}$	Equação de Sellmeier que permite calcular a variação do índice de refração do núcleo de sílica dopada com germânio em função do comprimento de onda
NA	$\sqrt{ncore2^2-nclad1^2}$	Abertura numérica com germânio
NA1	$\sqrt{ncore1^2-nclad1^2}$	Abertura numérica com sílica
V	$2*\pi*a*NA/\lambda$	Frequência normalizada com germânio
V1	$2*\pi*a*NA1/\lambda$	Frequência normalizada com sílica

Tabela B.3 Variáveis locais utilizadas no estudo no COMSOL.

Variável	Equação	Descrição
v1	$emw.k0*a[um]*sqrt(ncore^2-nclad^2)$	Frequência normalizada
v2	$emw.beta*a[um]*sqrt(ncore^2-nclad^2)/emw.neff$	Frequência normalizada
E1_Au	$1-((C_Au^2*(lamda[um])^2)/((P_Au^2)*(C_Au^2+(lamda[um])^2)))$	Permitividade real do ouro
E2_Au	$(C_Au*(lamda[um])^3)/(P_Au^2*(C_Au^2+(lamda[um])^2))$	Permitividade imag. do ouro
n1_Au	$sqrt((sqrt(E1_Au^2+E2_Au^2)+E1_Au)*0.5)$	Índice de refração real do ouro
k1_Au	$sqrt((sqrt(E1_Au^2+E2_Au^2)-E1_Au)*0.5)$	Índice de refração imag do ouro
E1_Al	$1-((C_Al^2*(lamda[um])^2)/((P_Al^2)*(C_Al^2+(lamda[um])^2)))$	Permitividade real do alumínio
E1_Ag	$1-((C_Ag^2*(lamda[um])^2)/((P_Ag^2)*(C_Ag^2+(lamda[um])^2)))$	Permitividade real da prata
E1_Cu	$1-((C_Cu^2*(lamda[um])^2)/((P_Cu^2)*(C_Cu^2+(lamda[um])^2)))$	Permitividade real do cobre
E2_Al	$(C_Al*(lamda[um])^3)/(P_Al^2*(C_Al^2+(lamda[um])^2))$	Permitividade imag. do alumínio
E2_Ag	$(C_Ag*(lamda[um])^3)/(P_Ag^2*(C_Ag^2+(lamda[um])^2))$	Permitividade imag. da prata
E2_Cu	$(C_Cu*(lamda[um])^3)/(P_Cu^2*(C_Cu^2+(lamda[um])^2))$	Permitividade imag. do cobre
n1_Al	$sqrt((sqrt(E1_Al^2+E2_Al^2)+E1_Al)*0.5)$	Índice de refração real do alumínio
n1_Ag	$sqrt((sqrt(E1_Ag^2+E2_Ag^2)+E1_Ag)*0.5)$	Índice de refração real da prata
n1_Cu	$sqrt((sqrt(E1_Cu^2+E2_Cu^2)+E1_Cu)*0.5)$	Índice de refração real do cobre
k1_Al	$sqrt((sqrt(E1_Al^2+E2_Al^2)-E1_Al)*0.5)$	Permitividade imag. do alumínio
k1_Ag	$sqrt((sqrt(E1_Ag^2+E2_Ag^2)-E1_Ag)*0.5)$	Índice de refração imag. da prata
k1_Cu	$sqrt((sqrt(E1_Cu^2+E2_Cu^2)-E1_Cu)*0.5)$	Índice de refração imag. do cobre
TAO	$1.878+(178.4*10^{-4})/(lamda)^2+(52.7*10^{-5})/(lamda)^4$	Variação do índice de refração em função do comprimento de onda do Ta ₂ O ₅
TIO	$sqrt(5.913+0.2441/(lamda^2-0.0843))$	Variação do índice de refração em função do comprimento de onda do TiO ₂

• **Parâmetros e variáveis definidos pelo COMSOL**

Tabela B.4 Alguns dos parâmetros fornecidos pelo COMSOL Mutiphysics.

Parâmetros	Equação	Descrição
c_const	2,9978E8 m/s	Velocidade da luz
mu0_const	1,2566E-6 H/m	Permitividade no vácuo
epsilon0_const	8,8542E-12 F/m	Permeabilidade no vácuo

Tabela B.5 Algumas das variáveis fornecidas pelo COMSOL Mutiphysics.

Variáveis	Equação	Descrição
emw.alphaport	$-\lambda$	Constante de propagação complexa
emw.beta	$\text{imag}(\text{emw.alphaport})$	Constante de propagação
emw.dampz	$\text{real}(\text{emw.alphaport})$	Constante de atenuação
emw.neff	$-\text{emw.alphaport} * i / \text{emw.k0}$	Índice de refração efetivo
emw.freq	Root.freq	Frequência
emw.omega	$2 * \pi * \text{emw.freq}$	Frequência angular
emw.iomega	$\text{emw.omega} * i$	Frequência angular complexa
emw.k0	$\text{emw.iomega} * \sqrt{\mu_0_{\text{const}} * \epsilon_0_{\text{const}}} / i$	Número de onda no espaço livre
emw.Ex	E_x	Campo elétrico, componente x
emw.Ey	E_y	Campo elétrico, componente y
emw.Ez	E_z	Campo elétrico, componente z
emw.curlEx	E_{zy}	Rotacional do campo elétrico, componente x
emw.curlEy	$-E_{zx}$	Rotacional do campo elétrico, componente y
emw.curlEz	$\text{curl}E_z$	Rotacional do campo elétrico, componente z
emw.normE	$\sqrt{\text{realdot}(\text{emw.Ex}, \text{emw.Ex}) + \text{realdot}(\text{emw.Ey}, \text{emw.Ey}) + \text{realdot}(\text{emw.Ez}, \text{emw.Ez})}$	Amplitude do campo elétrico
emw.Px	$\epsilon_0_{\text{const}} * (\text{emw.epsilon}_{rx} * \text{emw.Ex} + \text{emw.epsilon}_{ry} * \text{emw.Ey} + \text{emw.epsilon}_{rz} * \text{emw.Ez} - \text{emw.Ex})$	Polarização, componente x
emw.Py	$\epsilon_0_{\text{const}} * (\text{emw.epsilon}_{ry} * \text{emw.Ex} + \text{emw.epsilon}_{ry} * \text{emw.Ey} + \text{emw.epsilon}_{rz} * \text{emw.Ez} - \text{emw.Ey})$	Polarização, componente y
emw.Pz	$\epsilon_0_{\text{const}} * (\text{emw.epsilon}_{rz} * \text{emw.Ex} + \text{emw.epsilon}_{ry} * \text{emw.Ey} + \text{emw.epsilon}_{rz} * \text{emw.Ez} - \text{emw.Ez})$	Polarização, componente z
emw.normP	$\sqrt{\text{realdot}(\text{emw.Px}, \text{emw.Px}) + \text{realdot}(\text{emw.Py}, \text{emw.Py}) + \text{realdot}(\text{emw.Pz}, \text{emw.Pz})}$	Amplitude polarização
emw.k	$\text{emw.k0} * \sqrt{(\text{emw.mu}_{rx} * (\text{emw.ep}$	Número de onda
emw.Bx	$-\text{emw.curlEx} / \text{emw.iomega}$	Densidade de fluxo magnético, componente x
emw.By	$-\text{emw.curlEy} / \text{emw.iomega}$	Densidade de fluxo magnético, componente y
emw.Bz	$-\text{emw.curlEz} / \text{emw.iomega}$	Densidade de fluxo magnético, componente z
emw.normB	$\sqrt{\text{realdot}(\text{emw.Bx}, \text{emw.Bx}) + \text{realdot}(\text{emw.By}, \text{emw.By}) + \text{realdot}(\text{emw.Bz}, \text{emw.Bz})}$	Densidade da amplitude fluxo magnético
emw.normH	$\text{emw.beta} * a[\text{um}] * \sqrt{(n_{\text{core}}^2 - n_{\text{clad}}^2)} / \text{emw.neff}$	Amplitude do campo magnético

Anexo C Algoritmo para a elaboração das equações do Fresnel utilizado o MatLab

Função Principal

```

clear
clc
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%Constantes alterar (nm)
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%Comprimento do sensor (nm)
L = 1e6;
% Ângulo de incidência em grau (°)
tetaGrau = 88.85;
%Espessura do metal (nm)
SPRmin = 15;
SPRmax = 85;
SPRdelta = 10; % manter fixa o 10, devido aos gráficos no fim
(são 8 diferentes tipos de espessura)
SPR = 65;

%Raio do núcleo, bainha, (nm)
Rn = 4000;
Rc = 70000;
%Distância entre o núcleo e o metal (nm)
Dnm = 0 ;
%Minimo e máximo do espectro (nm)
lambmin = 300;
lambmax = 633;
lambdelta = 5; % manter fixo, devido aos gráficos no fim
% Incremento em teta
dteta=pi/(2.0*100.0);
% constante de Drude metales, plasma P_Au, Collision, C_Au (nm)
P_Au = 168.26;
C_Au = 8934.2;
P_Al = 106.57;
C_Al = 24511.0;
P_Ag = 145.14;
C_Ag = 17614.0;
P_Cu = 136.17;
C_Cu = 40852.0;

P = P_Ag;
C = C_Ag;

%Constante de Sellmeier sílica germânio (um)
A1_S2O4 = 0.6867;
A2_S2O4 = 0.4348;
A3_S2O4 = 0.8966;

```

```

B1_S2O4 = 0.07268;
B2_S2O4 = 0.1151;
B3_S2O4 = 10;

%Constante de Sellmeier sílica com 2% fluor (um)
A1_Fluor = 0.67744;
A2_Fluor = 0.40101;
A3_Fluor = 0.87193;
B1_Fluor = 0.06135;
B2_Fluor = 0.1203;
B3_Fluor = 9.8563;

%Constante de Sellmeier sílica com 1% fluor (um)
A1_Fluor = 0.6911;
A2_Fluor = 0.4079;
A3_Fluor = 0.8975;
B1_Fluor = 0.06840;
B2_Fluor = 0.1162;
B3_Fluor = 9.896;

%Índice de refração do meio a estudar next
nextmin = 1;
nextmax = 1.54;
nextdelta = (nextmax-nextmin)/10;
next = 1.3934;

%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%Dados do programa: pode alterar
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%NOTA:COMPRIMENTOS DE ONDAS EM NANOMETROS

%DISTÂNCIAS DAS INTERFACES AO EIXO OPTICO (nm)
d= ([Rn,Dnm,SPR,Rc]);

%Coeficientes de Sellmeier

%Sílica
a1=([A1_S2O4,A2_S2O4,A3_S2O4]);
b1=([B1_S2O4,B2_S2O4,B3_S2O4])*1000;

%Sílica fluor
a2=([A1_Fluor,A2_Fluor,A3_Fluor]);
b2=([B1_Fluor,B2_Fluor,B3_Fluor])*1000;

%espectro em comprimentos de onda inicial, final e incremento
(por ordem no vetor)
spectrum=(lambmin:lambdelta:lambmax);

%gama de ângulos de incidência: inicial, final, incremento

```

```

tetaaxis=(0.0:dteta:1.0*pi/2.0);
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
% Programa: nao alterar
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

i=1;
ns=length(spectrum);
na=length(tetaaxis);

R_mat=zeros([ns,na]);
T_mat=zeros([ns,na]);
X=zeros([ns,na]);
Y=zeros([ns,na]);
for SPR = SPRmin:SPRdelta:SPRmax
d=([Rn,Dnm,SPR,Rc]);
%     for next = nextmin:nextdelta:nextmax
%         j=1;
%         for lamb = spectrum;

eps_cons=( [eps_die(lamb,a1,b1),eps_die(lamb,a2,b2),eps_met(lamb,
C , P),next]);
        niu_cons=([1.0,1.0,1.0,1.0]);
        Penetracao1(j) =
(spectrum(j)/(2*pi))*sqrt((real(eps_cons(3))*-1+1^2)/1^4);
        Penetracao132(j) =
(spectrum(j)/(2*pi))*sqrt((real(eps_cons(3))*-1+1.33^2)/1.33^4);
        Penetracao154(j) =
(spectrum(j)/(2*pi))*sqrt((real(eps_cons(3))*-1+1.54^2)/1.54^4);

        teta = tetaGrau*pi/180;
        R_mat(i,j) = R(eps_cons,niu_cons,d,teta,lamb);

T_mat(i,j)=R(eps_cons,niu_cons,d,teta,lamb)^(L/(2*d(1).*tan(teta
)));
        X(i,j)=teta*180.0/pi;
        R1_mat(i,j) = R1(eps_cons,niu_cons,d,teta,lamb);

T1_mat(i,j)=R1(eps_cons,niu_cons,d,teta,lamb)^(L/(2*d(1).*tan(te
ta)));
        Y(i,j)=lamb;
        j=j+1;
    end
    i=i+1;
end
% end
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
% Saída de dados
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
plot (spectrum,T1_mat)

```

```

todo = (spectrum)';
  todo(:,2:9) = T1_mat';
  todo(:,1)=todo(:,1)/1000
% % Varios indices de refraçao
% var =1+((lambmax-lambmin)/lambdelta);
% figure(1)
% plot(spectrum, T_mat(1:var,67),spectrum,
T_mat(var+1:2*var,67),...
% spectrum, T_mat(1+2*var:3*var,67),spectrum,
T_mat(1+3*var:4*var,67),...
% spectrum, T_mat(1+4*var:5*var,67),spectrum,
T_mat(1+5*var:6*var,67),...
% spectrum, T_mat(1+6*var:7*var,67),spectrum,
T_mat(1+7*var:8*var,67),...
% spectrum, T_mat(1+8*var:9*var,67),spectrum,
T_mat(1+9*var:10*var,67),spectrum, T_mat(1+10*var:11*var,67))
%
legend('1.30','1.31','1.32','1.33','1.34','1.35','1.36','1.37','
1.38','1.39','1.40')
%
% figure(2)
% plot(spectrum, R_mat(1:var,67),spectrum,
R_mat(var+1:2*var,67),...
% spectrum, R_mat(1+2*var:3*var,67),spectrum,
R_mat(1+3*var:4*var,67),...
% spectrum, R_mat(1+4*var:5*var,67),spectrum,
R_mat(1+5*var:6*var,67),...
% spectrum, R_mat(1+6*var:7*var,67),spectrum,
R_mat(1+7*var:8*var,67),...
% spectrum, R_mat(1+8*var:9*var,67),spectrum,
R_mat(1+9*var:10*var,67),spectrum, R_mat(1+10*var:11*var,67))
%
legend('1.30','1.31','1.32','1.33','1.34','1.35','1.36','1.37','
1.38','1.39','1.40')
%
% for i = 1:na-1;
%     figure(3)
%     plot(spectrum, R_mat(1:81,i))
% end
%
% for i = 1:ns;
%     figure(4)
%     plot(tetaaxis*180/pi, R_mat(i,:))
% end
%
% figure(3)
% plot(spectrum, R_mat(1:81,:))
% % figure (5)
% % plot(spectrum, R_mat(1+4*var:5*var,300:330))
% % figure (6)
% % plot(tetaaxis*180/pi, R_mat(70:81,1:550))
%
%
```

```
%
% %contourf(X,Y,R_mat,100)
% %colorbar()
%
%
%
% %xlabel('angle/degrees')
% %ylabel('wavelength/nm')
```

Cálculo do coeficiente de reflexão e de transmissão utilizando o método das matrizes para sistemas multicamadas.

```
%R - Calculo para um comprimento de onda e um angulo
%Ref - varrimento de vários ângulos
%e_cons - vetor contendo a constante dielétrica em cada camada
%niu_cons - vetor contendo a constante dielétrica em cada camada
%d - vetor descrevendo a espessura de cada camada (a espessura do núcleo e calculada em relação ao eixo ótico)
%n1 - índice de refração do núcleo
%teta - angulo de incidência na primeira interface
%lamb - comprimento de onda do feixe
function [ R ] = R(eps_cons,niu_cons, d, teta,lamb)
%UNTITLED4 Summary of this function goes here
% Detailed explanation goes here
n1=sqrt(eps_cons(1)*niu_cons(1));
q=eps_cons./sqrt(eps_cons-(n1^2*sin(teta)^2));
beta=2.0*pi.*d.*sqrt(eps_cons-(n1.*sin(teta))^2)/lamb;
M=eye(2,2);
for i = 1:length(d)-1
    M=[[cos(beta(i)),-1.j*sin(beta(i))/q(i)];[-1.j*sin(beta(i))*q(i),cos(beta(i))]];
end
r= ((M(1,1)+M(1,2)*q(length(d)))*q(1) - (M(2,1)+M(2,2)*q(length(d)))) / ((M(1,1)+M(1,2)*q(length(d)))*q(1) + (M(2,1)+M(2,2)*q(length(d))));

R = abs(r)^2;

end
```

Cálculo do coeficiente de reflexão e de transmissão utilizado as equações de Fresnel

```
%R - Calculo para um comprimento de onda e um angulo
%Ref - varrimento de varios angulos
%e_cons - vetor contendo a constante dielectrica em cada camada
%niu_cons - vetor contendo a constante dielectrica em cada camada
%d - vetor descrevendo a espessura de cada camada (a espessura do nucleo e calculada em relacao ao eixo optico)
```

```

%n1 - indice de refracao do nucleo
%teta - angulo de incidencia na primeira interface
%lamb - comprimento de onda do feixe
function [ R1 ] = R1(eps_cons,niu_cons, d, teta,lamb)
%UNTITLED4 Summary of this function goes here
% Detailed explanation goes here
for i = 1:length(d)-1
    n(i) = sqrt(eps_cons(i).*niu_cons(i));
end
    n(length(d))= eps_cons(length(d));
for i = 1:length(d)
    for J = 1:length(d)
        ki(i)= (2*pi/lamb)*sqrt(n(i)^2-
(n(1)^2*sin(teta)*sin(teta)));
        kJ(J)= (2*pi/lamb)*sqrt(n(J)^2-
(n(1)^2*sin(teta)*sin(teta)));
        r(i,J)= ((n(i)^2)/(ki(i))-
((n(J)^2)/kJ(J)))/((n(i)^2)/(ki(i))+((n(J)^2)/kJ(J)));
    end
end
    r234 = (r(2,3)+
r(3,4)*exp(j*2*ki(3)*d(3)))/(1+r(2,3)*r(3,4)*exp(j*2*ki(3)*d(3))
);

    r1234 =
(r(1,2)+r234*exp(j*2*ki(2)*d(2)))/(1+r(1,2)*r234*exp(j*2*ki(2)*d
(2)));

R1 = abs(r1234)^2;

end

```