

5

Códigos e cálculos complementares

5.1

Aproximação dipolar quase estática

Solução da equação de Laplace em coordenadas esféricas:

Devido ao fato de estarmos modelando o problema para uma esfera metálica isolada, o uso das coordenadas esféricas se torna necessário. Desta forma, para se obter o Laplaciano em coordenadas esféricas, é preciso converter o Laplaciano em coordenadas cartesianas se utilizando das seguintes relações que podem ser visualizadas na figura 57:

$$x = r \sin \theta \cos \phi$$

$$y = r \sin \theta \sin \phi$$

$$z = r \cos \theta$$

$$r = (x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}$$

$$\theta = \cos^{-1}\left(\frac{z}{r}\right)$$

$$\phi = \tan^{-1}\left(\frac{y}{x}\right)$$

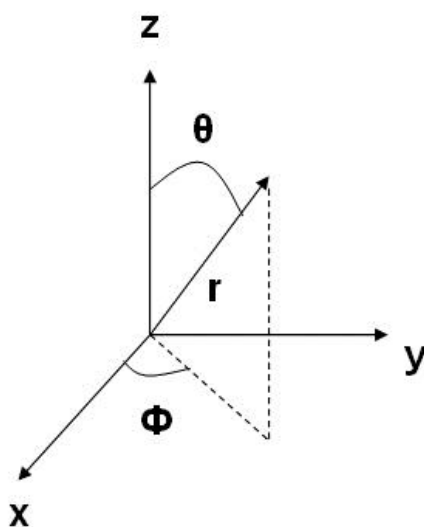


Figura 56: Sistema de coordenadas esféricas.

Após a substituição das relações acima no Laplaciano em coordenadas cartesianas obteremos o Laplaciano em coordenadas esféricas:

$$\nabla^2(r, \theta, \phi) = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \quad (2.82)$$

Com isto estamos interessados em resolver $\nabla^2(r, \theta, \phi)V(r, \theta, \phi) = 0$

$$\nabla^2(r, \theta, \phi)V(r, \theta, \phi) = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial V}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial V}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 V}{\partial \phi^2}$$

Vamos assumir que o problema possui simetria azimutal de modo que o Laplaciano de V em coordenadas esféricas se resuma em:

$$\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial V}{\partial r} \right) + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial V}{\partial \theta} \right) = 0 \quad (2.83)$$

Para resolver esta **EDP (Equação Diferencial Parcial)** de segunda ordem vamos utilizar o método das variáveis separadas. Desta forma, estamos interessados em uma função V contínua de classe C^2 (diferenciável duas vezes) que seja o produto de duas funções também contínuas de classe C^2 , com uma dependendo de r e a outra de θ .

$$V(r, \theta) = R(r)\Theta(\theta) \quad (2.84)$$

Substituindo a equação (2.84) em (2.83) e dividindo tudo por V, obteremos:

$$\frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{1}{\Theta \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Theta}{\partial \theta} \right) = 0 \quad (2.85)$$

Que é uma EDP de segunda ordem nas variáveis r e θ . Desde que o primeiro termo dependa somente de r e o segundo termo somente de θ , então cada um vai ser igual a uma constante e obteremos duas EDO's (Equação Diferencial ordinária) de 2º ordem:

$$\frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left(\frac{r^2 dR}{dr} \right) = l(l+1) \quad (2.86)$$

$$\frac{1}{\Theta} \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Theta}{\partial \theta} \right) = -l(l+1) \quad (2.87)$$

A equação $\frac{d}{dr} \left(\frac{r^2 dR}{dr} \right) = l(l+1)R$ possui a solução geral:

$$R(r) = Ar^l + \frac{B}{r^{l+1}} \quad (2.88)$$

onde A e B são constantes arbitrárias a serem determinadas a partir das condições de contorno do problema.

A obtenção da solução da equação $\frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Theta}{\partial \theta} \right) = -l(l+1) \sin \theta \cdot \Theta$ é não trivial e requer argumentos matemáticos que não serão tratados nesta dedução. As soluções são os *polinômios de Legendre* na variável $\cos \theta$.

$$\Theta(\theta) = P_l(\cos \theta) \quad (2.89)$$

Onde $P_l(x)$ é definido pela *fórmula de Rodrigues*:

$$P_l(x) = \frac{1}{2^l l!} \left(\frac{d}{dx} \right)^l (x^2 - 1)^l \quad \text{com } l \in \mathbb{Z}^+. \quad (2.90)$$

A solução geral para o potencial é dado pelo produto das duas soluções:

$$V(r, \theta) = \left(Ar^l + \frac{B}{r^{l+1}} \right) P_l(\cos \theta) \quad (2.91)$$

Aplicando as condições de contorno na solução geral:

Em geral o campo elétrico E dentro da esfera metálica é diferente do campo elétrico fora da esfera. Sabemos também que o campo elétrico incidente não será afetado pela esfera para distâncias muito afastadas da esfera ($r \rightarrow \infty$). Além disso, o campo no centro da esfera poderá ter valor finito^{21,22,Erro! Indicador não definido.} (o campo será diferente de zero). É a quarta e última condição que garante a continuidade das funções E e V na interface partícula meio ($r = R$). Estas quatro condições podem ser expressas da Tabela 1:

Resumo das condições de contorno para o campo elétrico

Dentro vs fora da esfera	Superfície da esfera ($r = R$)
Condição E1A:	Condição E2A:
$\vec{E}_{ext}(x, y, z) \rightarrow E_o \hat{z}$ se $r \rightarrow \infty$	$\varepsilon_{Np} \vec{E}_{r,int} = \varepsilon_m \vec{E}_{r,ext}$ (Condição radial)
Condição E1B:	Condição E2B:
$\vec{E}_{int}(x, y, z) \rightarrow Finito$ se $r \rightarrow 0$	$\vec{E}_\theta$ e $\vec{E}_\phi$ são contínuas
	(Condição tangencial)

Tabela 6: Resumo das condições de contorno para o campo elétrico E . Do lado esquerdo a condição associada às partes interna e externa à esfera metálica (nanopartícula) enquanto do lado direito as condições associadas à superfície da esfera ($r = R$).

Devido ao fato da dedução ter sido realizada para a obtenção do potencial dentro e fora da esfera, devemos reescrever as condições de contorno para o potencial V (Tabela 2).

Resumo das condições de contorno para o potencial

Dentro vs fora da esfera	Superfície da esfera ($r = R$)
Condição V1A:	Condição V2A:
$\lim_{r \rightarrow \infty} V_{ext}(r, \theta) \rightarrow -E_o z = -E_o r \cos \theta$	$\epsilon_{np} \frac{\partial V_{int}}{\partial r} = \epsilon_m \frac{\partial V_{ext}}{\partial r} \text{ para } r = R$
se $r \rightarrow \infty$	(Condição radial)
Condição V1B:	Condição V2B:
$V_{int}(r, \theta) \rightarrow 0 \text{ se } r \rightarrow 0$	$V_{\theta, int} = V_{\theta, ext} \quad V_{\phi, int} = V_{\phi, ext}$
	$V_{int}(R, \theta) = V_{ext}(R, \theta) \text{ para } r = R$
	(Condição tangencial)

Tabela 7: Resumo das condições de contorno para o potencial. Do lado esquerdo a condição associada às partes interna e externa a esfera metálica (nanopartícula) enquanto do lado direito as condições associadas à superfície da esfera ($r = R$).

Vamos agora examinar a equação do potencial (2.91) para valores específicos de l .

☑ Para $l = 0$:

Vamos aplicar inicialmente as condições dentro e fora da esfera metálica. Inicialmente será aplicada à equação (2.91) a condição **V1A**:

$$\lim_{r \rightarrow \infty} V_{ext}(r, \theta) = \lim_{r \rightarrow \infty} (A_{0, ext} r^0 + \frac{B_{0, ext}}{r}) P_0(\cos \theta) = \lim_{r \rightarrow \infty} (A_{0, ext} + \frac{B_{0, ext}}{r}) = A_{0, ext} = -E_o r \cos \theta$$

Lembrando que o polinômio de Lengendre de ordem zero é sempre 1 para qualquer valor de x , isto é, $P_0(x) = 1 \quad \forall x \in R \text{ ou } \in C$. Com isto a condição **V1A** nos forneceu:

$$\boxed{A_{0, ext} = -E_o r \cos \theta} \quad (2.92)$$

Para determinar $B_{0, int}$ temos que aplicar a condição **V1B**, isto é:

$$\lim_{r \rightarrow 0} V_{\text{int}}(r, \theta) = \lim_{r \rightarrow 0} (A_{0,\text{int}} r^0 + \frac{B_{0,\text{int}}}{r}) P_0(\cos \theta) = \lim_{r \rightarrow 0} (A_{0,\text{int}} 0^0 + \frac{B_{0,\text{int}}}{r}) = \infty$$

com isto deveremos ter que $B_{0,\text{int}} = 0$ para que o potencial se aproxime de zero no centro.

$$\boxed{B_{0,\text{int}} = 0} \quad (2.93)$$

Agora vamos determinar os coeficientes $A_{0,\text{int}}$ e $B_{0,\text{ext}}$ a partir das condições de superfície (interface NP e meio dielétrico), isto é, aplicaremos as condições **V2A** e **V2B**. Aplicando primeiramente a condição **V2B**, teremos que:

$$V_{\text{int}}(R, \theta) = V_{\text{ext}}(R, \theta) \Rightarrow A_{0,\text{int}} + \frac{B_{0,\text{int}}}{R} = A_{0,\text{ext}} + \frac{B_{0,\text{ext}}}{R} \quad \text{com isto,}$$

substituindo $B_{0,\text{int}}$ e $A_{0,\text{ext}}$ dados pelas equações (2.92) e (2.93) na expressão acima obteremos que:

$$\boxed{A_{0,\text{int}} = -E_0 r \cos \theta + \frac{B_{0,\text{ext}}}{R}} \quad (2.94)$$

E por último aplicaremos a condição **V2A** que nos fornecerá os coeficientes finais:

$$\varepsilon_{\text{NP}} \frac{\partial V_{\text{int}}}{\partial r} = \varepsilon_{\text{NP}} \frac{\partial A_{0,\text{int}}}{\partial r} = 0$$

$$\varepsilon_m \frac{\partial V_{\text{ext}}}{\partial r} = \varepsilon_m \frac{\partial}{\partial r} (-E_0 r \cos \theta + \frac{B_{0,\text{ext}}}{r}) = \varepsilon_m (-E_0 \cos \theta - \frac{B_{0,\text{ext}}}{r^2})$$

Com isto:

$$\varepsilon_m E_0 \cos \theta = -\varepsilon_m \frac{B_{0,\text{ext}}}{r^2} \Rightarrow E_0 \cos \theta = -\frac{B_{0,\text{ext}}}{r^2} \Rightarrow B_{0,\text{ext}} = -r^2 E_0 \cos \theta$$

$$\boxed{B_{0,\text{ext}} = -r^2 E_0 \cos \theta} \quad (2.95)$$

Voltando agora na equação (2.94) veremos que:

$$A_{0,\text{int}} = -r E_0 \cos \theta - \frac{r^2 E_0 \cos \theta}{R}$$

Com isto $V_{\text{int}} = -rE_o \cos \theta - \frac{r^2 E_o \cos \theta}{R}$ e

$$V_{\text{ext}} = -rE_o \cos \theta - \frac{r^2 E_o \cos \theta}{r} = 0! \text{ (que viola uma das quatro condições$$

da Tabela 2). Com isto, concluímos que para $l = 0$ não existe nenhuma solução para o problema de contorno. Vamos examinar a solução para:

☑ $l = 1$:

Seguindo os mesmos passos acima, veremos que:

$$\begin{aligned} \lim_{r \rightarrow \infty} V_{\text{ext}}(r, \theta) &= \lim_{r \rightarrow \infty} \left(A_{1,\text{ext}} r + \frac{B_{1,\text{ext}}}{r^2} \right) P_1(\cos \theta) = \lim_{r \rightarrow \infty} \left(A_{1,\text{ext}} r \cos \theta + \frac{B_{1,\text{ext}} \cos \theta}{r^2} \right) \\ &= \lim_{r \rightarrow \infty} \left(A_{1,\text{ext}} z + \frac{B_{1,\text{ext}} \cos \theta}{r^2} \right) = A_{1,\text{ext}} z = -E_o z \end{aligned}$$

Desta forma teremos que:

$$\boxed{A_{1,\text{ext}} = -E_o} \quad (2.96)$$

Agora, se utilizando da condição **V1B**, teremos pelo mesmo motivo observado acima que:

$$\lim_{r \rightarrow 0} V_{\text{int}}(r, \theta) = \lim_{r \rightarrow 0} \left(A_{1,\text{int}} r + \frac{B_{1,\text{int}}}{r^2} \right) P_1(\cos \theta) = \lim_{r \rightarrow 0} \left(\frac{B_{1,\text{int}} \cos \theta}{r^2} \right) = \infty \text{ com isto}$$

$B_{1,\text{int}} = 0$ para que o potencial se aproxime de zero no centro:

$$\boxed{B_{1,\text{int}} = 0} \quad (2.97)$$

E finalmente aplicando a condição **V2B** e **V2A** teremos respectivamente que:

$$\begin{aligned} V_{\text{int}}(R, \theta) &= V_{\text{ext}}(R, \theta) \\ \Rightarrow A_{1,\text{int}} R \cos \theta + \frac{B_{1,\text{int}} \cos \theta}{R^2} &= A_{1,\text{ext}} R \cos \theta + \frac{B_{1,\text{ext}} \cos \theta}{R^2} \quad \text{com isto,} \end{aligned}$$

substituindo $B_{1,\text{int}}$ e $A_{1,\text{ext}}$ dados pelas equações (2.96) e (2.97) na expressão acima e dividindo ambos os lados por $\cos \theta$ e depois por R obteremos que:

$$\boxed{A_{1,int} = -E_o + \frac{B_{1,ext}}{R^3}} \quad (2.98)$$

Sabemos que:

$$V_{int} = A_{1,int} r \cos \theta \quad \text{e} \quad V_{ext} = -E_o r \cos \theta + \frac{B_{1,ext} \cos \theta}{r^2}$$

E suas derivadas são dadas por:

$$\frac{\partial V_{int}}{\partial r} = A_{1,int} \cos \theta \quad \text{e} \quad \frac{\partial V_{ext}}{\partial r} = -E_o \cos \theta - \frac{2B_{1,ext} \cos \theta}{R^3} \quad \text{para } r = R.$$

Aplicando a relação que define a condição **V2A**, veremos que:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{Np} A_{1,int} \cos \theta &= \varepsilon_m \left(-E_o \cos \theta - \frac{2B_{1,ext} \cos \theta}{R^3} \right) \\ \varepsilon_{Np} \left(-E_o + \frac{B_{1,ext}}{R^3} \right) \cos \theta &= \varepsilon_m \left(-E_o \cos \theta - \frac{2B_{1,ext} \cos \theta}{R^3} \right) \\ -\varepsilon_{Np} E_o \cos \theta + \varepsilon_{Np} \frac{B_{1,ext}}{R^3} \cos \theta &= -\varepsilon_m E_o \cos \theta - \frac{2\varepsilon_m B_{1,ext} \cos \theta}{R^3} \\ \frac{\varepsilon_{Np} B_{1,ext}}{R^3} \cos \theta + \frac{2\varepsilon_m B_{1,ext} \cos \theta}{R^3} &= \varepsilon_{Np} E_o \cos \theta - \varepsilon_m E_o \cos \theta \\ B_{1,ext} \left(\frac{\varepsilon_{Np} \cos \theta}{R^3} + \frac{2\varepsilon_m \cos \theta}{R^3} \right) &= E_o \cos \theta (\varepsilon_{Np} - \varepsilon_m) \quad \text{e finalmente:} \end{aligned}$$

$$\boxed{B_{1,ext} = \frac{E_o R^3 (\varepsilon_{Np} - \varepsilon_m)}{\varepsilon_{Np} + 2\varepsilon_m}} \quad (2.99)$$

Substituindo a equação (2.99) na equação (2.98) obteremos o coeficiente

$A_{1,int}$:

$$\boxed{A_{1,int} = -E_o + \frac{E_o (\varepsilon_{Np} - \varepsilon_m)}{\varepsilon_{Np} + 2\varepsilon_m}} \quad (3.00)$$

Com isto a expressão final para o potencial dentro da esfera metálica é:

$$V_{int}(r, \theta) = A_{1,int} r \cos \theta + \frac{B_{1,int}}{r^2} \cos \theta = -E_o r \cos \theta + \frac{E_o r \cos \theta (\varepsilon_{Np} - \varepsilon_m)}{\varepsilon_{Np} + 2\varepsilon_m}$$

$$\boxed{V_{int}(r, \theta) = \frac{-3\varepsilon_m}{\varepsilon_{Np} + 2\varepsilon_m} E_o r \cos \theta} \quad (3.01)$$

Analogamente obteremos a expressão final para o potencial fora da esfera metálica:

$$V_{ext}(r, \theta) = A_{l,ext} r \cos \theta + \frac{B_{l,ext}}{r^2} \cos \theta = -E_o r \cos \theta + \frac{1}{r^2} \cos \theta \left(\frac{E_o R^3 (\epsilon_{Np} - \epsilon_m)}{\epsilon_{Np} + 2\epsilon_m} \right)$$

$$\boxed{V_{ext}(r, \theta) = -E_o r \cos \theta + \left(\frac{\epsilon_{Np} - \epsilon_m}{\epsilon_{Np} + 2\epsilon_m} \right) \frac{E_o R^3 \cos \theta}{r^2}} \quad (3.02)$$

Porém sabemos que $\vec{E} = -\nabla V$ (Laplaciano em coordenadas esféricas). Desta forma, o campo elétrico no interior da esfera metálica é dado por:

$$\vec{E}_{int}(r, \theta) = \frac{3\epsilon_m}{2\epsilon_m + \epsilon_{Np}} E_o \cos \theta \hat{r} - \frac{3\epsilon_m}{2\epsilon_m + \epsilon_{Np}} E_o \sin \theta \hat{\theta} \quad (3.03)$$

Vamos agora utilizar as seguintes relações na equação (3.03) com o objetivo de obter a expressão final para o campo elétrico no interior da esfera metálica:

$$\begin{aligned} \hat{r} &= \cos \theta \hat{z} + \sin \theta \hat{\theta} \\ \hat{\theta} &= -\sin \theta \hat{z} + \cos \theta \hat{\theta} \end{aligned}$$

Com isto o campo elétrico E_{int} é dado por:

$$\boxed{\vec{E}_{int} = \frac{3\epsilon_m}{2\epsilon_m + \epsilon_{Np}} E_o \hat{z}} \quad (3.04)$$

Analogamente, fazendo o mesmo para o campo externo, obteremos a expressão final para o campo elétrico no exterior da esfera metálica.

$$\boxed{\vec{E}_{ext} = E_o \hat{z} + \frac{2R^3 (\epsilon_{Np} - \epsilon_m)}{2\epsilon_m + \epsilon_{Np}} \frac{E_o \cos \theta}{r^3} \hat{r} + \frac{R^3 (\epsilon_{Np} - \epsilon_m)}{2\epsilon_m + \epsilon_{Np}} \frac{E_o \sin \theta}{r^3} \hat{\theta}} \quad (3.05)$$

Podemos reescrever a equação (3.05) em função do módulo do momento de dipolo, isto é:

$$p = \frac{(\varepsilon_{Np} - \varepsilon_m)}{2\varepsilon_m + \varepsilon_{Np}} R^3 E_o \quad (3.06) \rightarrow \boxed{\vec{E}_{ext} = E_o \hat{z} + \frac{2p \cos \theta}{r^3} \hat{r} + \frac{p \sin \theta}{r^3} \hat{\theta}} \quad (3.07)$$

5.2

Parte real e imaginária do índice de refração

O índice de refração pode ser escrito em função da constante dielétrica através da seguinte equação:

$$n = \sqrt{\varepsilon} = \sqrt{\varepsilon_R + i\varepsilon_{Im}} = n_R + in_{Im} \quad (3.08)$$

Será mostrado que a parte real e imaginária do índice de refração é dada por:

$$n_R = \sqrt{\frac{\sqrt{\varepsilon_R^2 + \varepsilon_{Im}^2} + \varepsilon_R}{2}} \quad \text{e} \quad n_{Im} = \sqrt{\frac{\sqrt{\varepsilon_R^2 + \varepsilon_{Im}^2} - \varepsilon_R}{2}} \quad (3.09)$$

De (3.08) temos que:

$$\varepsilon = \varepsilon_R + i\varepsilon_{Im} = (n_R + in_{Im})^2 = n_R^2 + 2n_R in_{Im} - n_{Im}^2 = (n_R^2 - n_{Im}^2) + 2n_R n_{Im} i$$

Que gera um sistema linear envolvendo a parte real e imaginária de ε e n .

$$\varepsilon_R = n_R^2 - n_{Im}^2 \quad (3.10)$$

$$\varepsilon_{Im} = 2n_R n_{Im} \quad (3.11)$$

De (3.11) temos que $n_R = \frac{\varepsilon_{Im}}{2n_{Im}}$ que substituindo em (3.10) teremos que

$$\varepsilon_R = \frac{\varepsilon_{Im}^2}{4n_{Im}^2} - n_{Im}^2 = \frac{4n_{Im}^4 - \varepsilon_{Im}^2}{4n_{Im}^2} \quad \text{Vamos primeiramente encontrar as soluções}$$

para n_{Im} : Reescrevendo a equação acima, obteremos um polinômio de quarto grau em n_{Im} .

$$4n_{Im}^4 - 4n_{Im}^2 \varepsilon_R - \varepsilon_{Im}^2 = 0 \Rightarrow n_{Im}^4 - n_{Im}^2 \varepsilon_R - \frac{\varepsilon_{Im}^2}{4} = 0 \Rightarrow \Delta = \varepsilon_R^2 + \varepsilon_{Im}^2$$

Com isto teremos duas soluções quadradas para n_{Im} , isto é:

$$n_{Im1}^2 = \frac{\varepsilon_R + \sqrt{\varepsilon_R^2 + \varepsilon_{Im}^2}}{2} \quad (3.12) \quad \text{e} \quad n_{Im2}^2 = \frac{\varepsilon_R - \sqrt{\varepsilon_R^2 + \varepsilon_{Im}^2}}{2} \quad (3.13)$$

Agora vamos utilizar o mesmo recurso para determinar n_R :

$$\text{De (3.11) temos que } n_{Im} = \frac{\varepsilon_{Im}}{2n_R}, \text{ então (3.10) fica } \varepsilon_R = n_R^2 - \frac{\varepsilon_{Im}^2}{4n_R^2} = \frac{4n_R^4 - \varepsilon_{Im}^2}{4n_R^2}.$$

Com isto teremos um polinômio de quarto grau em n_R , isto é:

$$4n_R^4 - 4n_R^2 \varepsilon_R - \varepsilon_{Im}^2 = 0 \Rightarrow n_R^4 - n_R^2 \varepsilon_R - \frac{\varepsilon_{Im}^2}{4} = 0 \Rightarrow \Delta = \varepsilon_R^2 + \varepsilon_{Im}^2$$

Desta forma, teremos duas soluções quadradas para n_R , isto é:

$$n_{R1}^2 = \frac{\varepsilon_R + \sqrt{\varepsilon_R^2 + \varepsilon_{lm}^2}}{2} \quad (3.14) \quad \text{e} \quad n_{R2}^2 = \frac{\varepsilon_R - \sqrt{\varepsilon_R^2 + \varepsilon_{lm}^2}}{2} \quad (3.15)$$

Resumo das soluções quadradas:

$$n_{lm1}^2 = \frac{\varepsilon_R + \sqrt{\varepsilon_R^2 + \varepsilon_{lm}^2}}{2} \quad ; \quad n_{lm2}^2 = \frac{\varepsilon_R - \sqrt{\varepsilon_R^2 + \varepsilon_{lm}^2}}{2}$$

$$n_{R1}^2 = \frac{\varepsilon_R + \sqrt{\varepsilon_R^2 + \varepsilon_{lm}^2}}{2} \quad ; \quad n_{R2}^2 = \frac{\varepsilon_R - \sqrt{\varepsilon_R^2 + \varepsilon_{lm}^2}}{2}$$

Um teste rápido mostra que as soluções que satisfazem o sistema são:

$$n_{R1}^2 = \frac{\varepsilon_R + \sqrt{\varepsilon_R^2 + \varepsilon_{lm}^2}}{2} \quad \text{e} \quad n_{lm2}^2 = \frac{\varepsilon_R - \sqrt{\varepsilon_R^2 + \varepsilon_{lm}^2}}{2} \quad \text{como queríamos}$$

demonstrar.

5.3

Código do KS400

```
# Abertura do Arquivo
#-----
imgdelete ".*"
Gclear 0
imgsetpath "Z:\AlunosIPDI\2009\EricPaula\Trabalho"
imgload "12nmafter23.bmp", 1

# Segmentação
#-----

imgRGB2grey 1, 1
imgstatus 1, tamx, tamy

# Eliminando fronteiras
#-----

MSsetprop "FRAMEMODE",1
MSsetprop "FRAMESTARTX",1
MSsetprop "FRAMESTARTY",1
MSsetprop "FRAMESIZEX",tamx-2
MSsetprop "FRAMESIZEY",tamy-2
#MSsetprop "DRAWFEAT", "DRLABELU"
MSsetprop "DRAWFEAT", "DRCONTOURU"

# Impondo conexão 4
#-----

MSsetprop "CONNECT", 4
Gclear 0

#Aplicando dvalleys
#-----

dvalleys 1,2,3.00,1
Gextract 2,128,255,13
imgdisplay 1
imgcopy 1,3
Gmerge 3,0
Gclear 0
dislev 3,4,1,251,1
MSdrawmask 4,1
imgdisplay 1
Gclear 0
grainsbin 4,5,2,5,1,12
Gclear 0

MSdrawmask 5,1
imgdisplay 1

MSsetprop "REGIONFEAT", "AREA, FERETMIN, FERETMAX, DCIRCLE, FCIRCLE,
MAXD"

#escala = pixels/microns
# com 483 pixels
# e campo = 3µm => 6.211 nm/pixel
```

```

# e campo = 2µm => 4.141 nm/pixel
# com 340 pixels
# e campo = 500 nm => 1.471 nm/pixel

MSsetprop "SCALEX",2.0790
MSsetprop "SCALEY",2.0790
MSsetprop "UNIT","nm"
#altura = 40

MSsetprop "DENSFACTOR", 33.77/256
MSsetprop "DENSUNIT","nm"
# surfgrey
1,2,32,32,448,448,4,30.0,30.0,30.0,0.50,1.00,0.10,0.90,0.50,11,0,1

MSsetprop "CONDITION", 1
MSsetprop "CONDITION", "DCIRCLE>15" # && DCIRCLE<70"
Gclear 0
MSdrawmask 5,1
imgdisplay 1
MSmeasmask 5,1,"DATABASE",0,1,10
datalist "DATABASE",0,0

datahisto "DATABASE","DCIRCLE",0,15,17.000000,70.000000,30.000000
datahisto "DATABASE","FCIRCLE",0,15,0.450000,1.000000,35.000000
datahisto "DATABASE","MAXD",0,15,10.000000,30.000000,30.000000
datadist
"DATABASE","DCIRCLE","DATABASE","MAXD",0,15,15,0.000000,100.000000
,0.000000,100.000000
datascat
"DATABASE","DCIRCLE","DATABASE","MAXD",0,17.008400,68.396100,13.47
1700,29.785500
#surfgrey
1,2,32,32,448,448,4,30.0,30.0,30.0,0.50,1.00,0.10,0.90,0.50,11,0,1

imgpal2RGB 1,"cor"
Gmerge "cor"
imgsave "cor", "s6nmspt003500nmcolorida.tif"
stop

extdisdyn 1,6,2,38,0,1,12
Gclear 0
Gextract 2,128,255,13
Gmerge 6,0
Gclear 0
grainsbin 6,7,2,5,1,12
Gclear 0
MSdrawmask 7,1
imgdisplay 1
MSmeasmask 7,1,"DATABASE",0,1,10
datalist "DATABASE",0,0
datahisto "DATABASE","DCIRCLE",0,15,0.000000,100.000000,100.000000
MSdrawmask 7,1
imgdisplay

```

5.4

Código de simulação do Maple 14

Parâmetros da simulação :

Carga do elétron:

> $e := 1.60217653 \cdot 10^{(-19)}$

massa efetiva do elétron:

> $m := 0.99 \cdot 9.1091 \cdot 10^{(-31)}$

Densidade dos elétrons livres:

> $\rho := 5.90172415543 \cdot 10^{(28)}$

Permissividade do Vácuo:

> $\epsilon_0 := 8.8541878176 \cdot 10^{(-12)}$

Tempo de colisão associada com a excitação coletiva dos elétrons:

> $\tau := 9.3 \cdot 10^{(-15)}$

Damping parameter:

> $\beta := \frac{1}{\tau}$

Velocidade da Luz:

> $c := 3 \cdot 10^8$

Constante dielétrica do meio hospedeiro:

> $\epsilon_h := 1$

Filling Factor Definitions:

>

> $f_{6nm} := 2 \cdot 10^{-2}$

> $f_{8nm} := 4 \cdot 10^{-2}$

> $f_{10nm} := 6 \cdot 10^{-2}$

> $f_{12nm} := 8 \cdot 10^{-2}$

> $f_{20nm} := 10 \cdot 10^{-2}$

Lambda de ressonância:

> $\lambda_0 := 520 \cdot 10^{-9}$

Frequência de ressonância :

> $\omega_0 := \frac{2 \cdot \text{Pi} \cdot c}{\lambda_0}$

Frequência do plasma de elétrons livres:

$$> \omega_p := e \cdot \text{sqrt} \left(\frac{\rho}{m \cdot \epsilon_0} \right)$$

Função $\lambda(\omega)$ responsável pela varredura das frequências :

$$> \lambda := \omega \rightarrow \frac{2 \cdot \pi \cdot c}{\omega}$$

$$> \lambda(\omega)$$

Parte real e imaginária da constante dielétrica do metal vinda do modelo de Lorentz:

$$> \epsilon_1 := \omega \rightarrow 1 - \frac{\omega_p^2 \cdot \tau^2}{1 + (\tau \cdot \omega)^2}$$

$$> \epsilon_1(\omega)$$

$$> \epsilon_2 := \omega \rightarrow \frac{\omega_p^2 \cdot \tau}{\omega \cdot (1 + (\tau \cdot \omega)^2)}$$

$$> \epsilon_2(\omega)$$

Constante dielétrica do metal:

$$> \epsilon_j := \omega \rightarrow \epsilon_1(\omega) + i \cdot \epsilon_2(\omega)$$

>

$$> \epsilon_j(\omega)$$

Constante dielétrica efetiva de Maxwell-Garnet:

$$> \epsilon_{eff} := \omega \rightarrow \frac{(\epsilon_j(\omega) + (2 \cdot \epsilon_h) + (2 \cdot f_{6nm} \cdot (\epsilon_j(\omega) - \epsilon_h)))}{(\epsilon_j(\omega) + (2 \cdot \epsilon_h) - (f_{6nm} \cdot (\epsilon_j(\omega) - \epsilon_h)))} \cdot \epsilon_h$$

$$> \epsilon_{eff8} := \omega \rightarrow \frac{(\epsilon_j(\omega) + (2 \cdot \epsilon_h) + (2 \cdot f_{8nm} \cdot (\epsilon_j(\omega) - \epsilon_h)))}{(\epsilon_j(\omega) + (2 \cdot \epsilon_h) - (f_{8nm} \cdot (\epsilon_j(\omega) - \epsilon_h)))} \cdot \epsilon_h$$

$$> \epsilon_{eff10} := \omega \rightarrow \frac{(\epsilon_j(\omega) + (2 \cdot \epsilon_h) + (2 \cdot f_{10nm} \cdot (\epsilon_j(\omega) - \epsilon_h)))}{(\epsilon_j(\omega) + (2 \cdot \epsilon_h) - (f_{10nm} \cdot (\epsilon_j(\omega) - \epsilon_h)))} \cdot \epsilon_h$$

$$> \epsilon_{eff12} := \omega \rightarrow \frac{(\epsilon_j(\omega) + (2 \cdot \epsilon_h) + (2 \cdot f_{12nm} \cdot (\epsilon_j(\omega) - \epsilon_h)))}{(\epsilon_j(\omega) + (2 \cdot \epsilon_h) - (f_{12nm} \cdot (\epsilon_j(\omega) - \epsilon_h)))} \cdot \epsilon_h$$

$$> \epsilon_{eff20} := \omega \rightarrow \frac{(\epsilon_j(\omega) + (2 \cdot \epsilon_h) + (2 \cdot f_{20nm} \cdot (\epsilon_j(\omega) - \epsilon_h)))}{(\epsilon_j(\omega) + (2 \cdot \epsilon_h) - (f_{20nm} \cdot (\epsilon_j(\omega) - \epsilon_h)))} \cdot \epsilon_h$$

$$> \epsilon_{eff}(\omega)$$

$$> \epsilon_{eff8}(\omega)$$

$$> \epsilon_{eff10}(\omega)$$

$$> \epsilon_{eff12}(\omega)$$

$$> \epsilon_{eff20}(\omega)$$

Parte Real da CDF:

$$> \text{Realeff} := \omega \rightarrow \Re(\epsilon_{eff}(\omega))$$


```

> Realeff8 := w → ℑ( eff8( w ) )
> Realeff10 := w → ℑ( eff10( w ) )
> Realeff12 := w → ℑ( eff12( w ) )
> Realeff20 := w → ℑ( eff20( w ) )

```

```

> Realeff( w )
> Realeff8( w )
> Realeff10( w )
> Realeff12( w )
> Realeff20( w )

```

Parte Imaginária da CDF:

```

> Imageff := w → ℑ( eff( w ) )
> Imageff8 := w → ℑ( eff8( w ) )
> Imageff10 := w → ℑ( eff10( w ) )
> Imageff12 := w → ℑ( eff12( w ) )
> Imageff20 := w → ℑ( eff20( w ) )
> Imageff8( w )
> Imageff10( w )
> Imageff12( w )
> Imageff20( w )

```

Plot da parte real da CDF:

```

>
> plot( [ Realeff( w ) ], w = 5 · 1015 .. 1.2 · 1016, color = [ blue ], style = [ line ],
        titlefont = [ "ROMAN", 15 ], labels = [ "Frequency (w)",
        "ε1MG(w)" ], axesfont = [ HELVETICA, 12 ], labelfont
        = [ "HELVETICA", 12 ], gridlines = true, labeldirections
        = [ horizontal, vertical ], axes = boxed, title
        = "Simulation for Real(eff)" )

```

Plot da parte real da CDF:

```

>
> plot( [ Realeff( w ), Realeff8( w ), Realeff10( w ), Realeff12( w ),
        Realeff20( w ) ], w = 5.6 · 1015 .. 1 · 1016, color = [ red, blue, green,
        black, orange ], style = [ line ], titlefont = [ "ROMAN", 15 ], labels
        = [ "Frequency (w)", "ε1MG(w)" ], axesfont = [ HELVETICA, 12 ],
        labelfont = [ "HELVETICA", 12 ], gridlines = true, labeldirections
        = [ horizontal, vertical ], axes = boxed, title
        = "Simulation for Real(eff)" )

```

>

Plot da parte imaginária da CDF:

>

```
plot( [ Imageff( w) ], w = 6 · 1015 .. 1 · 1016, color = [ red ], style = [ line ],
      titlefont = [ "ROMAN", 15 ], labels = [ "Frequency (w)", "ε2MG( w) " ], axesfont = [ HELVETICA, 12 ], labelfont = [ "HELVETICA", 12 ],
      gridlines = true, labeldirections = [ horizontal, vertical ], axes
      = boxed, title = "Simulation for Imaginary( eff )" )
```

Plot da parte imaginária para 5 fill factors diferentes da CDF:

>

```
plot( [ Imageff( w ), Imageff8( w ), Imageff10( w ), Imageff12( w ),
      Imageff20( w) ], w = 5.8 · 1015 .. 1 · 1016, color = [ red, blue, green,
      black, orange ], style = [ line ], titlefont = [ "ROMAN", 15 ], labels
      = [ "Frequency (w)", "ε2MG( w) " ], axesfont = [ HELVETICA, 12 ],
      labelfont = [ "HELVETICA", 12 ], gridlines = true, labeldirections
      = [ horizontal, vertical ], axes = boxed, title
      = "Simulation for Imaginary( eff )" )
```