

# Aplicação do COMSOL para Análise de Sensores Plasmônicos de Nanopartículas

R. C. dos Santos, J. S. Costa, A. F. S. da Cruz e K. Q. da Costa

**Resumo** - Este artigo apresenta uma análise numérica de um sensor plasmônico baseado em ressonância de superfície de plasma (SPR – *Surface Plasmon Resonance*), com estrutura baseada na configuração *Kretschmann*, para análise e caracterização de nanopoluentes metálicos. Os nanopoluentes metálicos são modelados por um arranjo de nanopartículas com núcleo de ouro e casca dielétrica (*core-shell* - AuNps). O software COMSOL foi utilizado para obtenção dos resultados numéricos, os quais são validados com resultados analíticos.

**Palavras-Chave** – Sensor SPR, Kretschmann, Nanopartículas de Ouro, Método dos Elementos Finitos, Plasmônica.

**Abstract** – This paper presents a numerical analysis of a Surface Plasmon Resonance sensor (SPR) in Kretschmann configuration for metallic nanopoluenents characterization. The metallic nanopoluenents are composed by an array of spherical gold nanoparticles with core-shell (AuNps). The COMSOL software was used for the numerical analysis and the model has been confirmed by the analytical results.

**Keywords** – SPR sensor, Kretschmann Configuration, Gold Nanoparticles, Finite Elements Method, Plasmonic.

## I. INTRODUÇÃO

Sensores SPR são baseados na excitação da onda de superfície SPP (*Surface Plasmon Polaritons*) e sua aplicação para a detecção e caracterização de moléculas e nanopartículas, como nanopoluenents metálicos residuais dos processos de nanofabricação, têm sido cada vez mais relatada [1]. Estes também podem ser utilizados para detecção de espécies químicas e biológicas, como em sistemas de controle de qualidade e segurança de alimentos. Além das aplicações em medicina, como detecção de células cancerígenas e vírus [2]. E também em controle e qualidade de gases.

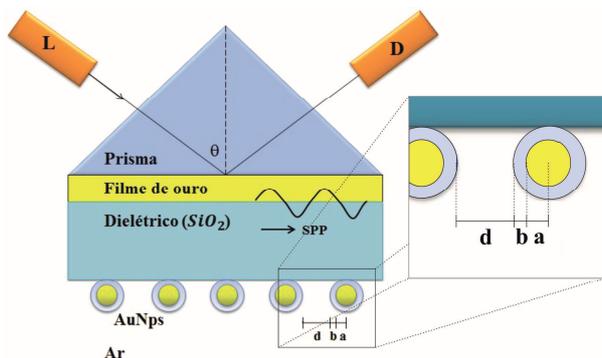


Fig. 1. Geometria do problema do sensor SPR na configuração Kretschmann acoplado a um arranjo de nanopartículas esféricas que será considerada nesse projeto.

Neste trabalho analisa-se a resposta do sensor SPR na Fig. 1, cuja estrutura é baseada na configuração Kretschmann, na presença de nanopoluenents metálicos, os quais são modelados por arranjo periódico de nanopartículas tipo *core-shell*. O software COMSOL Multiphysics® é utilizado para realizar a análise numérica, cujos dados são validados por modelagem analítica baseada no coeficiente de reflexão generalizado e a permissividade efetiva de Clausius Mossotti [1,3]. O estudo teórico deste problema pode auxiliar no projeto e na otimização da geometria e configuração deste tipo de nanosensor.

## II. MODELAGEM E MÉTODOS

A estrutura multicamada do sensor SPR na Fig. 1 é composta por quatro camadas: prisma (SF4), filme de ouro, sílica fume (SiO<sub>2</sub>) e ar. A excitação é realizada por feixe de luz com polarização TM (*Transversal Magnetic*) no comprimento de onda  $\lambda = 633\text{ nm}$  [1] e ângulo de incidência  $\theta$  variável. A modelagem da estrutura no COMSOL® é baseada em uma estrutura periódica de múltiplas camadas (Fig. 2a). Utiliza-se apenas uma célula contendo uma nanopartícula da estrutura periódica para analisar a refletividade angular da onda incidente na interface prisma/ouro (Fig. 2d).

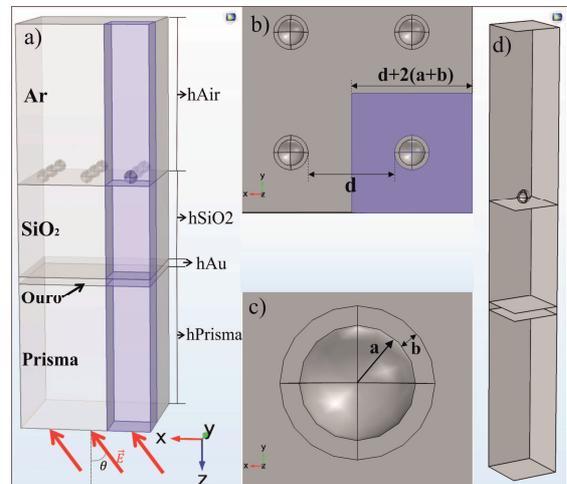


Fig. 2. Estrutura modelada no COMSOL Multiphysics para a realização das simulações: a) Estrutura periódica do sensor, b) Plano xy do arranjo AuNps, c) Geometria de uma AuNp e d) Célula utilizada na simulação.

O software COMSOL possui o *RF module* com o subgrupo *Frequency Domain* para estudos eletromagnéticos no domínio da frequência. Foram utilizadas *Ports boundaries*, do tipo *Periodic Ports*, para definir a fonte de excitação (interfaces superior e inferior) e condições de contorno periódicas nas interfaces laterais [4].

A malha do sistema foi definida de acordo com a função *Physics-controlled mesh*, onde o software considera os índices de reflexão dos materiais para obter um modelo de distribuição do campo eletromagnético na estrutura [5], com a qual foi possível obter resultados satisfatórios para comparação. O modelo analítico é uma aproximação baseada na modelagem do arranjo de AuNps por uma camada homogênea com permissividade efetiva dada por Clausius-Mossotti [1,3]. A Tabela I apresenta os parâmetros utilizados para a simulação.

TABELA I. PARÂMETROS DEFINIDOS NO COMSOL

a	30 nm	Raio das AuNps
b	10 nm	Espessura do <i>core-shell</i>
d	200 nm	Distância entre as esferas
lam0	632.8 nm	Comprimento de onda [1]
hAir	1.5*lam0	Espessura camada de ar
hSiO2	600 nm	Espessura do dielétrico
hAu	46 nm	Espessura do filme de ouro
hPrisma	1.5*lam0	Espessura da camada de prisma
theta1	30° - 60°	Ângulo de elevação
phi	0°	Ângulo de azimute
f0	c_const/lam0	Frequência
ePrisma	3.0615	Permissividade relativa do Prisma
eAu	-11.67+1.35*i	Permissividade relativa do ouro
eSiO2	2.1228	Permissividade SiO2
eAuNps	1.113+0.006*i	Permissividade camada de AuNps (Analítico)
eAir	1	Permissividade do ar

III. RESULTADOS

Na Fig. 3 temos a curva de refletividade do sensor com as AuNps, obtida pelo método analítico do coeficiente de reflexão generalizado [1] e também pela simulação numérica, em comparação com o resultado numérico para a célula na Fig. 2d com nanoesfera de ouro ( $b = 0$  nm) e com a AuNps ( $b = 10$  nm) em função de  $\theta$ . Note dois pontos de mínimo nas curvas, os quais representam a excitação dos modos de onda guiados TM1 e TM2, e são tomados como referência para medir o deslocamento angular em  $R$  devido à presença de AuNps sobre o sensor (resposta do sensor) [2].

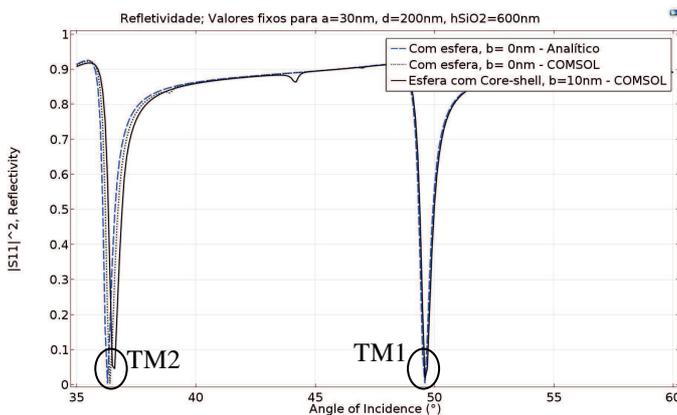


Fig. 3. Curvas de Refletividade TM para o sensor sem as esferas (analítico e numérico) com um arranjo de esferas de ouro ( $b=0$  nm) e com um arranjo de AuNps ( $b = 10$  nm) [1].

Na Fig. 4 temos a distribuição do campo magnético transversal  $Re\{H_y\}$  (campo no domínio do tempo para  $t = 0$  s), para os modos TM1 e TM2 nos pontos de mínimo da curva  $b =$

10 nm observados na Fig. 3, em comparação com o campo obtido pelo modelo analítico. Note a semelhança entre os gráficos de campo numérico e analítico, o que mostra a coerência dos resultados obtidos no COMSOL®.

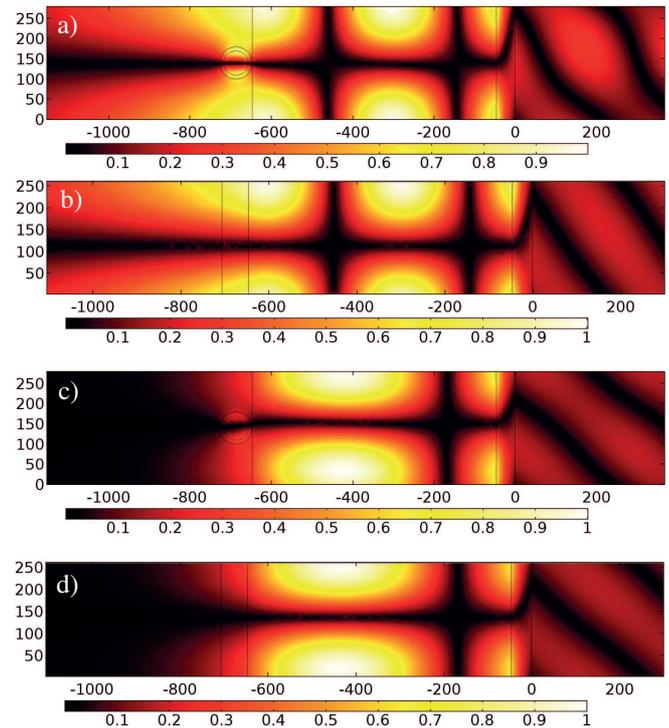


Fig. 4. Distribuição do campo magnético  $Re\{H_y\}$  normalizado para o máximo de 1A/m: (a) Numérico - Modo TM2 em  $\theta = 36,5^\circ$ ; (b) Analítico - Modo TM2 em  $\theta = 36,29^\circ$ ; (c) Numérico - Modo TM1 em  $\theta = 49,59^\circ$ ; e (d) Analítico - Modo TM1 em  $\theta = 49,59^\circ$ .

IV. CONCLUSÕES

Nota-se que o efeito do *core-shell* da nanopartícula na curva de refletividade é mais perceptível no segundo modo TM guiado (TM2), enquanto o primeiro (TM1) é menos sensível a sua presença quando comparado com a curva para nanopartícula sem capa da simulação e do modelo analítico. Junto a isso, o software proporciona uma análise mais detalhada dos efeitos da nanoesfera na curva que não são observados no resultado analítico.

A distribuição do campo magnético na estrutura se mostra satisfatória para os dois modelos quando comparados, mostrando que o modelo desenvolvido no COMSOL obteve os resultados que se eram esperados. O que permitirá avanços na modelagem desse tipo de sensores, tanto para pesquisa, para análise e validação do modelo, quanto para estudos experimentais na área.

REFERÊNCIAS

- [1] K. Q. da Costa, J. S. Costa, V. Dmitriev, T. Del Rosso, O. Pandoli, R. Q. Aucelio. "Analysis of Surface Plasmon Resonance Sensor Coupled to Periodic Array of Gold Nanoparticles", IMOC 2015.
- [2] J. Homola, "Surface plasmon resonance sensors for detection of chemical and biological species", Chem. Rev., vol. 108, pp. 462-493, 2008.
- [3] J. A. Kong, Electromagnetic Wave Theory, Cambridge: Massachusetts, 1998.
- [4] "Modeling Electromagnetic Waves and Periodic Structures". (<http://www.comsol.com/blogs/modeling-electromagnetic-waves-periodic-structures/>).
- [5] COMSOL Multiphysics 5.2, Inc. (<http://www.comsol.com/>).