

1995/08

B199

Tese de

MESTRADO

**CÁLCULO DE RESSONÂNCIAS DO
ESPALHAMENTO DA LUZ POR UMA
ESFERA METÁLICA COBERTA POR UMA
CAMADA DIELÉTRICA**

Túlio Marcelo Bambino

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas

Rio de Janeiro, 31 de março 1995



Aos meus Pais

AGRADECIMENTOS

Aos Professores:

Luíz Gallisa Guimarães e Aníbal Omar Caride, por todo apoio e estímulo em desenvolver este trabalho;

Aos Amigos:

Lula;

Rodrigo, Flávio e Toninho e aos colegas do CBPF;

À Míriam S. Coutinho, ao CFC, ao DCP e a todo apoio e estrutura oferecidos pelo Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas;

Ao CNPq pelo suporte financeiro.

RESUMO

Neste trabalho é estudado o *espalhamento ressonante* da luz por uma esfera metálica (condutor perfeito) coberta por uma camada dielétrica, utilizando a *teoria de Mie, Aden e Kerker (eletromagnetismo clássico)*. Utilizando a analogia entre mecânica quântica e ótica, é possível interpretar fisicamente estas ressonâncias como *estados quase-ligados da luz*. Devido ao caroço metálico aparecem ressonâncias distintas das de uma esfera dielétrica simples. Os limites destes efeitos são estabelecidos pela análise da variação da espessura da camada dielétrica. São observados pontos de superposição de ressonâncias denominados pontos de *cruzamento*. Tais efeitos de tamanho são analisados no âmbito da secção de choque total do espalhamento.

ABSTRACT

In this work we study the *resonant scattering* of light from a metallic sphere (perfect conductor) covered with a dielectric layer, by the using of Mie, Aden & Kerker theory. The analogy between optics and quantum mechanics is used. Through this analogy it is possible to interpret resonances as *quasi-bound states of light*. Because of the existence of a metallic core, different kind of resonances appear. The limits of these effects are established by the analysis of the dielectric thickness variation. There is resonance superposition among the observed points, which are called *crossover points*. These size effects are analyzed in the framework of the total cross section of the scattering.

LISTA DE SÍMBOLOS

EMCCD = Esfera Metálica Coberta por uma Camada Dielétrica

N = índice de refração do material

k = módulo do vetor de onda = $\frac{\omega}{c}$

ω = frequência angular da onda incidente

c = velocidade da luz no vácuo

b = raio externo de uma EMCCD

a = raio interno de uma EMCCD

$\rho = \frac{b}{a}$ = razão do raio externo pelo raio interno de uma EMCCD

ℓ = momento angular (referente a uma dada onda parcial)

$\lambda = (\ell + 1/2)$

n = ordem da ressonância

$$\left. \begin{aligned} \beta &= kb \\ \alpha &= Nkb = N\beta \\ \gamma &= Nka = \rho^{-1}\alpha \end{aligned} \right\} \text{parâmetros de tamanho}$$

LISTA DE FIGURAS & TABELAS

- FIG. 2.1 - SISTEMA DE COORDENADAS E CAMPOS ELETROMAGNÉTICOS, 7
- FIG 2.2 - DESENHO ESQUEMÁTICO DO ESPALHAMENTO DE LUZ POR UMA EMCCD, 12
- FIG 3.1 - POTENCIAL EFETIVO DE UMA EMCCD, 22
- FIG 3.2 - ESFERAS APLANÁTICAS, 24
- FIG 3.3 - COMPORTAMENTO DE POSIÇÕES E LARGURAS DAS RESSONÂNCIAS, 30
- FIG 3.4 - Q DE EXTINÇÃO PARA VALORES LIMITE DE UMA EMCCD, 34
- FIG 3.5 - Q DE EXTINÇÃO NA REGIÃO TIPO MIE, 35
- FIG 3.6 - Q DE EXTINÇÃO NA REGIÃO TIPO FABRY-PEROT E REGIÃO DE CRUZAMENTO, 37
- TAB 3.1 - TABELA DE VALORES RESSONANTES, 28*

ÍNDICE GERAL

<i>CAPÍTULO 1 INTRODUÇÃO</i>	2
1.1 MOTIVAÇÕES	2
1.2 OBJETIVOS	4
1.3 ORGANIZAÇÃO DO TRABALHO	5
<i>CAPÍTULO 2 O ESPALHAMENTO DA LUZ POR UMA EMCCD</i>	6
2.1 POTENCIAIS DE HERTZ-DEBYE	8
2.2 ESCRREVENDO OS COEFICIENTES DE ESPALHAMENTO PARA UMA EMCCD	10
2.3 EFICIÊNCIA DIANTEIRA E RESSONÂNCIAS	16
<i>CAPÍTULO 3 RESSONÂNCIAS E EFEITOS DE TAMANHO</i>	20
3.1 O POTENCIAL EFETIVO DE UMA EMCCD.....	21
3.2 CÁLCULO DE RESSONÂNCIAS DE UMA EMCCD	25
3.3 CÁLCULO DO Q DE EXTINÇÃO PARA UMA EMCCD.....	32
3.4 CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS FUTURAS	38
BIBLIOGRAFIA:	39

CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO

1.1 Motivações

O problema do espalhamento de luz por uma gota dielétrica está certamente entre os mais antigos e interessantes quebra-cabeças da Física (van de Hulst 1957; Kerker 1969; Nussenzveig 1977). Diferentes técnicas tanto teóricas quanto experimentais foram desenvolvidas ou anexadas ao domínio do conhecimento deste problema.

Especificamente, o problema de ressonância em microesferas teve seu interesse renovado com os experimentos de Ashkin e Dziedzic (1981), entre o final da década de 70 e o início da década passada. Esta linha de pesquisa ampliou muito seus horizontes com o desenvolvimento do laser, novas técnicas de armadilhas e as técnicas de construção de microesferas (Ray *et all* 1991; Hightower & Richardson 1988; Hightower *et all* 1988). Efeitos de ótica quântica e não-linear, tais como espalhamento Raman estimulado, Brillouin estimulado e emissão laser, tem sido desde então estudados (Thurn & Kiefer 1985; Nussenzveig 1992).

Uma micro-esfera¹ (raio $\sim 10\mu m$) de material transparente e índice de refração N com $\text{Re}\{N\} >$ pode ser uma excelente cavidade ressonante. Neste regime, apresenta em regiões próximas de sua superfície campos de alta intensidade (Thurn &

¹Entenda-se daqui por diante que são supostos tamanhos compatíveis com o comprimento de onda no visível.

Kiefer 1985; Guimarães 1993). Um extenso estudo sobre o espectro ressonante de uma gota dielétrica foi realizado por Guimarães e Nussenzveig em trabalhos recentes (1992; 1994; Guimarães 1991; 1993). Lá, utilizando-se do princípio de localização (van de Hulst 1957), teoria de momentum angular complexo foi desenvolvida uma teoria para as flutuações rápidas (ripple) das secções de choque (dianteira e trazeira) de uma microesfera dielétrica. Dentro desta linha de pesquisa, se faz necessário um estudo do espalhamento ressonante da luz por microesferas compostas de camadas com materiais de índices de refração distintos. Sendo assim, cientes das possíveis dificuldades de se abordar o problema mais geral possível, envolvendo o espalhamento da luz por esferas cobertas por multicamadas concêntricas e tentando ganhar um pouco de conhecimento nesta área, optamos em tratar a situação particular em que o centro espalhador é composto por um caroço esférico metálico coberto por uma camada esférica dielétrica.

1.2 Objetivos

Neste trabalho procuramos iniciar um estudo sobre efeitos de cobertura em microesferas. O problema de uma esfera coberta, apresenta-se classicamente como um problema de valores de contorno. Efeitos de interferência por reflexão no caroço e na superfície da camada dielétrica, são extremamente sensíveis as relações entre o raio externo e interno e dos diferentes índices de refração dos meios (van de Hulst 1957; Aden & Kerker 1951; Kerker 1969; Hightower & Richardson 1988; Hightower *et all* 1988.). Tanto experimental, quanto teoricamente o estudo referente a grandezas ligadas ao espectro ressonante são apresentados para uma esfera rígida coberta por uma camada líquida (Hightower & Richardson 1988; Hightower *et all* 1988), no caso de dois líquidos existem complicações dependendo da miscibilidade ou não destes (Ray *et all* 1991). Em comum a estes trabalhos está o fato de exaustivo trabalho computacional e a falta de uma base maior, tanto para uma interpretação quanto para estimativas das grandezas físicas de interesse (Hightower & Richardson 1988; Hightower *et all* 1988., Toon & Ackerman 1981). Como veremos adiante, isto é decorrente do fato da teoria ser descrita por séries infinitas envolvendo funções especiais.

Nosso objetivo principal está em compreender o comportamento do espalhamento ressonante frente a variações da espessura da camada dielétrica. Para tanto, o caminho escolhido foi o de se considerar uma esfera metálica coberta por uma camada dielétrica (EMCCD) (Kerker 1969; Murphy 1965; Rheinstein 1963; Scharfmann 1954; Weston & Hemenger 1962). Serão estudadas as relações entre posição e largura de ressonâncias, como também a seção de choque total do espalhamento em função da razão entre raios externo e o raio interno..

1.3 Organização do trabalho

No capítulo 2, será desenvolvido a teoria de Mie, Aden e Kerker (MAK) para uma EMCCD onde grandezas de interesse deste problema serão definidas.

No capítulo 3, mostraremos que as ressonâncias poderão ser divididas em dois tipos distintos. Um associado ao caso de grandes valores do ρ , onde a esfera metálica exerce pouca ou nenhuma influência sobre os valores pesquisados e outro, caracterizado pela marcante sensibilidade destes valores frente a pequenas variações de ρ . Com isto serão desenvolvidos algoritmos para cálculo destas ressonâncias. Também serão analisadas a maneira com que as posições, larguras de ressonâncias se comportam como função de ρ . Mostraremos também que existe uma analogia entre o comportamento destas ressonâncias e o espectro eletrônico molecular. Conclusões e perspectivas futuras encerram o capítulo 3.

CAPÍTULO 2

O ESPALHAMENTO DA LUZ POR UMA EMCCD

Sempre que uma onda eletromagnética incide sobre um centro espalhador (CE) de bordas finitas e propriedades óticas diferentes do meio que a cerca, uma onda espalhada é gerada. Neste trabalho consideramos o espalhamento da luz por um objeto esférico, que está imerso no vácuo e possui índice de refração relativo ao vácuo $N(\mathbf{r})$.

Do ponto de vista do eletromagnetismo clássico, para se resolver este problema o desenvolvimento a ser seguido deve ser o de se escrever o campo eletromagnético em todo o espaço, dividindo-o em três partes: um campo incidente $(\mathbf{E}_i, \mathbf{H}_i)$, outro se propagando no meio interior do objeto $(\mathbf{E}_r, \mathbf{H}_r)$ e também outro associado a onda espalhada $(\mathbf{E}_s, \mathbf{H}_s)$. Além disto, estes campos têm que satisfazer as condições de contorno usuais do eletromagnetismo (Born & Wolf 1985).

A fig. 2.1 sintetiza este problema, e define o sistema de coordenadas esféricas (r, θ, ϕ) a ser usado neste trabalho.

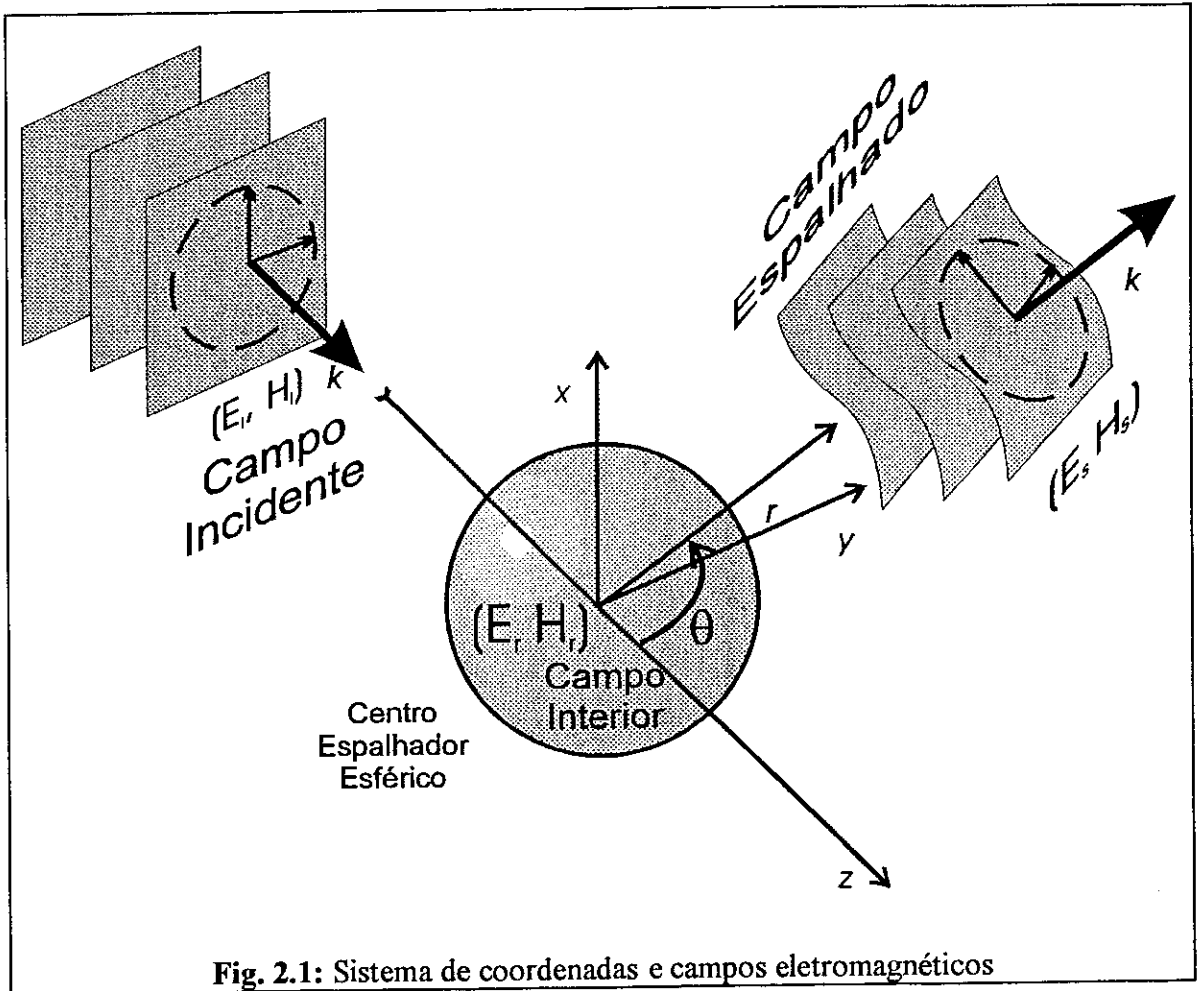


Fig. 2.1: Sistema de coordenadas e campos eletromagnéticos

2.1 Potenciais de Hertz-Debye

Uma maneira de se evitar tratar diretamente com as equações de Maxwell, está na introdução de duas funções auxiliares, os vetores de Hertz. Estes vetores, no sistema de unidades CGS são definidos como (Kerker 1969; Born & Wolf 1985)

$$\mathbf{B}_1 = \mu_0 \varepsilon \vec{\nabla} \times \frac{\partial \vec{\pi}_1}{\partial t} \quad (2.1.a)$$

$$\mathbf{E}_1 = \vec{\nabla} \vec{\nabla} \cdot \vec{\pi}_1 - \mu_0 \varepsilon \frac{\partial^2 \vec{\pi}_1}{\partial t^2} \quad (2.1.b)$$

$$\mathbf{D}_2 = -\mu_0 \varepsilon \vec{\nabla} \times \frac{\partial \vec{\pi}_2}{\partial t} \quad (2.1.c)$$

$$\mathbf{H}_2 = \vec{\nabla} \vec{\nabla} \cdot \vec{\pi}_2 - \mu_0 \varepsilon \frac{\partial^2 \vec{\pi}_2}{\partial t^2} - \sigma \mu_0 \vec{\pi}_2 \quad (2.1.d)$$

acima os índices (1) e (2) dizem respeito respectivamente ao campo exterior (incidente mais o espalhado) e ao campo interior (no caso, interior a esfera). Os fatores ε , μ_0 e σ são respectivamente, a permissividade elétrica e magnética e a condutividade específica. O vetor de Hertz elétrico (magnético) é representado por $\vec{\pi}_{1(2)}$. Os vetores assim definidos sempre satisfazem a equação de onda vetorial:

$$\nabla^2 \vec{\pi}_1 - \sigma \mu_0 \frac{\partial \vec{\pi}_1}{\partial t} - \varepsilon_0 \mu_0 \frac{\partial^2 \vec{\pi}_1}{\partial t^2} = -\frac{\mathbf{P}}{\varepsilon_0} \quad (2.2.a)$$

$$\nabla^2 \vec{\pi}_2 - \sigma \mu_0 \frac{\partial \vec{\pi}_2}{\partial t} - \epsilon \mu_0 \frac{\partial^2 \vec{\pi}_2}{\partial t^2} = -\mathbf{M} \quad (2.2.b)$$

acima \mathbf{P} e \mathbf{M} são respectivamente os vetores polarização elétrica e magnetização, oriundos das distribuições dos multipólos elétricos e magnéticos.

Haverão dois conjuntos de campos vetoriais associados a cada um dos vetores de Hertz. O campo total é obtido pela soma destes vetores. A componente de campo advinda do vetor de Hertz elétrico (magnético) é chamada de onda Elétrica (\mathbf{E}) (Magnética(\mathbf{M})). Tais ondas não possuem componente radial, isto é onda magnética tem a restrição $H_{1r} = 0$. enquanto que ondas elétricas satisfazem $E_{2r} = 0$.

O interessante nesta discussão é que é possível associar os vetores de Hertz a grandezas escalares. Os potenciais de Hertz-Debye elétrico (magnético), $\Pi_{1(2)}$, são definidos como

$$-\nabla \cdot \vec{\pi}_1 = \Pi_1 \quad (2.3.a)$$

$$-\nabla \cdot \vec{\pi}_2 = \Pi_2 \quad (2.3.b)$$

os potenciais de Hertz-Debye são soluções da equação de onda escalar. Portanto escolhendo um sistema de coordenadas apropriado para as condições de contorno do problema, é possível tratar este problema eletromagnético sob o ponto de vista de uma teoria escalar (Kerker 1969; Born & Wolf 1985).

2.2 Escrevendo os coeficientes de espalhamento para uma EMCCD

Uma vez que para espalhamento as soluções procuradas são harmônicas no tempo, o fator $\exp(-i\omega t)$ fica implícito. Com isto também, a equação de onda escalar se reduz a equação de Helmholtz:

$$\{\nabla^2 + k^2 N^2(\mathbf{r})\}\Pi = 0 \quad (2.4)$$

onde $k = \frac{\omega}{c}$, $N(\mathbf{r})$ é o índice de refração da região onde a onda se propaga. Os potenciais de Hertz-Debye Π (eq.(2.3)) são soluções da equação de onda escalar acima (Kerker 1969; Born & Wolf 1985). Escrevendo o laplaciano em coordenadas esféricas, temos que

$$\nabla_{(r,\theta,\phi)}^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \quad (2.6)$$

Devido a simetria do problema vamos representar este potencial por

$$\Pi(\mathbf{r}) = R(r) Y_\ell^m(\theta, \phi) \quad (2.7)$$

Onde $Y_\ell^m(\theta, \phi)$ são os harmônicos esféricos e $R(r)$ satisfaz a seguinte equação radial:

$$\left\{ \frac{d^2}{dr^2} + \left[k^2 N^2(r) - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] \right\} rR(r) = 0 \quad (2.8)$$

As soluções de (2.8), para o caso de $N = \text{constante}$, são as funções de Ricatti-Bessel e Ricatti-Neumann (Abramowitz & Stegun 1972) definidas como:

$$\psi_\ell(kNr) = \sqrt{\left(\frac{\pi kNr}{2}\right)} J_{\ell+\frac{1}{2}}(kNr) \quad (2.9.a)$$

$$\chi_\ell(kNr) = \sqrt{\left(\frac{\pi kNr}{2}\right)} Y_{\ell+\frac{1}{2}}(kNr) \quad (2.9.b)$$

onde $J_{\ell+\frac{1}{2}}(kNr)$ e $Y_{\ell+\frac{1}{2}}(kNr)$, são as funções cilíndricas de Bessel e Neumann respectivamente. A combinação linear das (2.9) também são soluções de (2.8), portanto

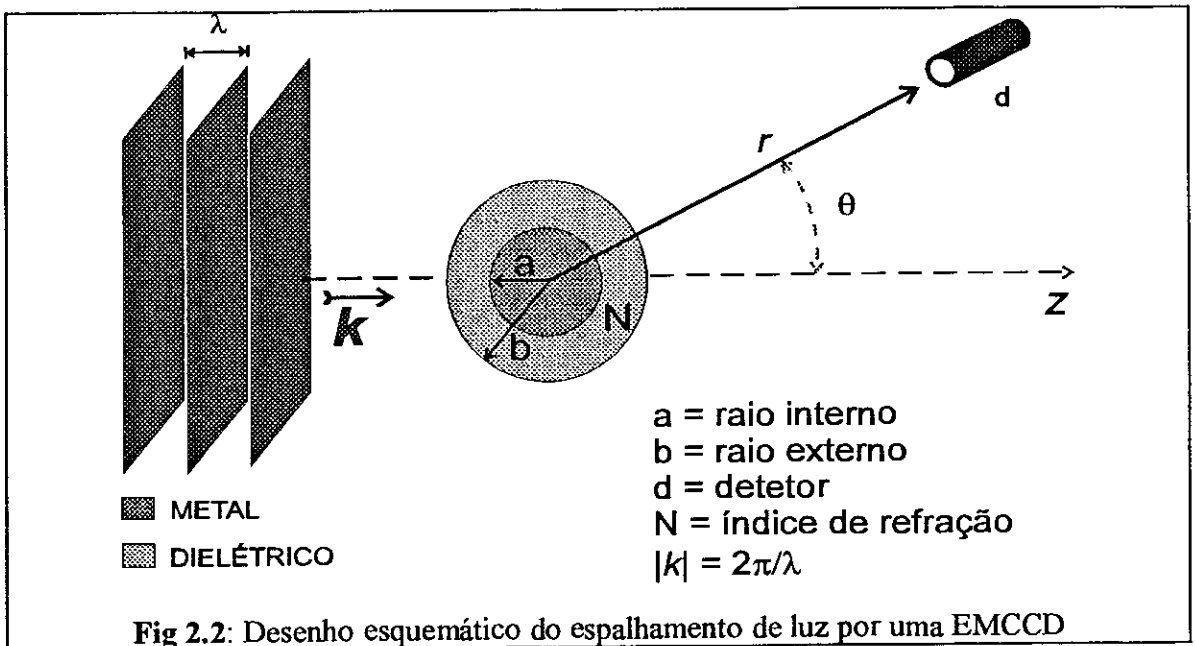
$$\begin{aligned} \zeta_\ell(kNr) &= \sqrt{\left(\frac{\pi kNr}{2}\right)} J_{\ell+\frac{1}{2}}(kNr) + i\sqrt{\left(\frac{\pi kNr}{2}\right)} Y_{\ell+\frac{1}{2}}(kNr) \\ &= \sqrt{\left(\frac{\pi kNr}{2}\right)} H_{\ell+\frac{1}{2}}^{(1)}(kNr) \end{aligned} \quad (2.10.a)$$

$$\begin{aligned} \xi_\ell(kNr) &= \sqrt{\left(\frac{\pi kNr}{2}\right)} J_{\ell+\frac{1}{2}}(kNr) - i\sqrt{\left(\frac{\pi kNr}{2}\right)} Y_{\ell+\frac{1}{2}}(kNr) \\ &= \sqrt{\left(\frac{\pi kNr}{2}\right)} H_{\ell+\frac{1}{2}}^{(2)}(kNr) \end{aligned} \quad (2.10.b)$$

onde $H_{\ell+\frac{1}{2}}^{(1)}(kNr)$ e $H_{\ell+\frac{1}{2}}^{(2)}(kNr)$, são as funções de Hankel cilíndricas de primeira e segunda espécie. Explicitando a forma dos harmônicos esféricos, a solução geral de (2.8) pode ser escrita como:

$$\begin{aligned}
r\Pi &= \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} \Pi_{\ell}^m \\
&= \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} \{c_{\ell} \psi_{\ell}(kr) + d_{\ell} \chi_{\ell}(kr)\} \{P_{\ell}^m(\cos\theta)\} \times \\
&\quad \times \{a_{\ell} \cos(m\phi) + b_{\ell} \sin(m\phi)\}
\end{aligned} \tag{2.11}$$

onde $P_{\ell}^m(\cos\theta)$ são os polinômios associados de Legendre (Abramowitz & Stegun 1972). A partir daqui serão necessárias a introdução das características do CE, para adequação do campo eletromagnético em todo espaço via condições de contorno. Na Fig. 2.2 encontra-se o desenho esquemático do espalhamento de luz por uma EMCCD.



Os potenciais de Hertz-Debye associados a onda plana incidente são escritos como:

$$r\Pi_1^i = \frac{1}{k^2} \sum_{\ell=0}^{\infty} i^{\ell-1} \frac{2\ell+1}{\ell(\ell+1)} \psi_{\ell}(kr) P_{\ell}^{(1)}(\cos\theta) \cos\phi \quad (2.12.a)$$

$$r\Pi_2^i = \frac{1}{k^2} \sum_{\ell=0}^{\infty} i^{\ell-1} \frac{2\ell+1}{\ell(\ell+1)} \psi_{\ell}(kr) P_{\ell}^{(1)}(\cos\theta) \sin\phi \quad (2.12.b)$$

Uma vez que, a onda espalhada assintoticamente corresponde a uma onda emergente, os potenciais de Hertz-Debye associados a esta onda têm a forma:

$$r\Pi_1^s = \frac{1}{k^2} \sum_{\ell=0}^{\infty} i^{\ell-1} \frac{2\ell+1}{\ell(\ell+1)} a_{\ell} \zeta_{\ell}(kr) P_{\ell}^{(1)}(\cos\theta) \cos\phi \quad (2.13.a)$$

$$r\Pi_2^s = -\frac{1}{k^2} \sum_{\ell=0}^{\infty} i^{\ell-1} \frac{2\ell+1}{\ell(\ell+1)} b_{\ell} \zeta_{\ell}(kr) P_{\ell}^{(1)}(\cos\theta) \sin\phi \quad (2.13.b)$$

Por outro lado, do ponto de vista de condições de contorno, o que diferencia uma EMCCD de uma esfera dielétrica simples, é a possibilidade de combinações lineares de soluções permitidas da equação de onda no material dielétrico, uma vez que a presença do caroço metálico afasta a exigência de finitude dos campos na origem. Portanto, a solução da equação de onda na camada é uma combinação linear de funções de Ricatti-Bessel e Ricatti-Neumann, a saber:

$$r\Pi_1^c = \frac{1}{(kN)^2} \sum_{\ell=0}^{\infty} i^{\ell-1} \frac{2\ell+1}{\ell(\ell+1)} \{c_{\ell} \psi_{\ell}(kNr) + d_{\ell} \chi_{\ell}(kNr)\} \times \quad (2.14.a)$$

$$\times P_{\ell}^{(1)}(\cos\theta) \cos\phi$$

$$r\Pi_2^c = \frac{1}{(kN)^2} \sum_{\ell=0}^{\infty} i^{\ell-1} \frac{2\ell+1}{\ell(\ell+1)} \{e_{\ell} \psi_{\ell}(kNr) + f_{\ell} \chi_{\ell}(kNr)\} \times \quad (2.14.b)$$

$$\times P_{\ell}^{(1)}(\cos\theta) \sin\phi$$

A solução geral deve satisfazer as condições de contorno usuais do eletromagnetismo (Kerker 1969; Born & Wolf 1985), isto é temos que exigir a continuidade das componentes normais de \mathbf{D} e tangenciais de \mathbf{H} , nas interfaces $r = a$ e $r = b$ e a ausência de campos no interior do caroço metálico $r = a$. Desta forma, os potenciais de Hertz-Debye estão sujeitos as seguintes restrições:

$$\left. \begin{array}{l} \frac{\partial}{\partial r}(r\Pi_1^c) = 0 \\ \frac{\partial}{\partial r}(r\Pi_2^c) = 0 \\ iNk(r\Pi_1^c) = 0 \\ ik(r\Pi_2^c) = 0 \end{array} \right\}_{r=a} \quad \left. \begin{array}{l} \frac{\partial}{\partial r}(r\Pi_1) = \frac{\partial}{\partial r}(r\Pi_1^i + r\Pi_1^s) \\ \frac{\partial}{\partial r}(r\Pi_2) = \frac{\partial}{\partial r}(r\Pi_2^i + r\Pi_2^s) \\ iNk(r\Pi_1) = ik(r\Pi_1^i + r\Pi_1^s) \\ iNk(r\Pi_2) = ik(r\Pi_2^i + r\Pi_2^s) \end{array} \right\}_{r=b} \quad (2.16)$$

Assim, utilizando a forma explícita destes potenciais e a ortogonalidade dos polinômios associados de Legendre, obtemos para os coeficientes da expansão em ondas parciais acima destes potenciais o seguinte conjunto de oito equações lineares:

$$\left\{ \begin{array}{l} c_l \psi_l'(\gamma) + d_l \chi_l'(\gamma) = 0 \\ c_l \psi_l(\gamma) + d_l \chi_l(\gamma) = 0 \\ c_l \psi_l'(\alpha) + d_l \chi_l'(\alpha) + Na_l \zeta_l'(\beta) = N \psi_l'(\beta) \\ c_l \psi_l(\alpha) + d_l \chi_l(\alpha) + Na_l \zeta_l(\beta) = \psi_l(\beta) \\ e_l \psi_l'(\gamma) + f_l \chi_l'(\gamma) = 0 \\ e_l \psi_l(\gamma) + f_l \chi_l(\gamma) = 0 \\ e_l \psi_l'(\alpha) + f_l \chi_l'(\alpha) + Nb_l \zeta_l'(\beta) = N \psi_l'(\beta) \\ e_l \psi_l(\alpha) + f_l \chi_l(\alpha) + N^2 b_l \zeta_l(\beta) = N^2 \psi_l(\beta) \end{array} \right. \quad (2.17)$$

Onde definimos os parâmetros de tamanho,

$$\begin{cases} \beta = kb \\ \alpha = Nkb \\ \gamma = Nka \end{cases} \quad (2.18)$$

Resolvendo o sistema (2.17) para os coeficientes a_ℓ e b_ℓ , obtém-se os *coeficientes de espalhamento para uma EMCCD*, elétrico e magnético respectivamente. Uma maneira de se escrever mais compactamente estes coeficientes, vem pela definição de dois operadores (Kerker 1969):

$$\begin{aligned} [\chi\psi]'_{\ell,\beta} &= \chi'_\ell(\alpha)\psi_\ell(\beta) - N\chi_\ell(\alpha)\psi'_\ell(\beta) \\ &= \chi_\ell(\alpha)\psi_\ell(\beta)\{\ln' \chi_\ell(\alpha) - N\ln' \psi_\ell(\beta)\} \end{aligned} \quad (2.19.a)$$

$$\begin{aligned} [\chi\psi]''_{\ell,\beta} &= N\chi'_\ell(\alpha)\psi_\ell(\beta) - \chi_\ell(\alpha)\psi''_\ell(\beta) \\ &= \chi_\ell(\alpha)\psi_\ell(\beta)\{N\ln' \chi_\ell(\alpha) - \ln' \psi_\ell(\beta)\} \end{aligned} \quad (2.19.b)$$

onde $\psi'_\ell(\beta) = \frac{d\psi_\ell(\beta)}{d\beta}$ e $\ln' \psi_\ell(\beta) = \frac{\psi'_\ell(\beta)}{\psi_\ell(\beta)}$. Os demais operadores são análogos,

bastando substituir os parâmetros e funções de acordo com a ordem definida acima. Os coeficientes são escritos finalmente, como

$$a_\ell = \frac{\psi'_\ell(\gamma)[\chi\psi]'_{\ell,\beta} - \chi'_\ell(\gamma)[\psi\psi]'_{\ell,\beta}}{\psi'_\ell(\gamma)[\chi\zeta]'_{\ell,\beta} - \chi'_\ell(\gamma)[\psi\zeta]'_{\ell,\beta}} \quad (2.20.a)$$

$$b_\ell = \frac{\psi_\ell(\gamma)[\chi\psi]''_{\ell,\beta} - \chi_\ell(\gamma)[\psi\psi]''_{\ell,\beta}}{\psi_\ell(\gamma)[\chi\zeta]''_{\ell,\beta} - \chi_\ell(\gamma)[\psi\zeta]''_{\ell,\beta}} \quad (2.20.b)$$

2.3 Eficiência dianteira e ressonâncias

Em uma experiência de espalhamento a distância do detector ao CE é, geralmente, muito maior que o tamanho do próprio CE (na Fig 2.2 $r \gg b$). Isto representa dizer que o comportamento assintótico da função e da derivada de Ricatti-Hankel de primeira espécie é da forma (Abramowitz & Stegun, 1972),

$$kr \gg 1 \Rightarrow \begin{cases} \zeta_l(kr) \approx (-i)^{(l+1)} \exp(ikr) \\ \zeta'_l(kr) \approx (-i)^l \exp(ikr) \end{cases}$$

Vamos estudar o comportamento assintótico do campo espalhado neste limite. Devido ao rápido decaimento da parte radial ($\propto 1/r^2$) comparado com as outras componentes, o campo espalhado pode ser escrito em regiões muito afastadas da origem como:

$$E_\phi \approx \frac{i \exp(ikr)}{kr} \sum_{\ell=1}^{\infty} \frac{(2\ell+1)}{\ell(\ell+1)} \left\{ a_\ell \frac{P_\ell^{(1)}(\cos\theta)}{\sin\theta} + b_\ell \frac{dP_\ell^{(1)}(\cos\theta)}{d\theta} \right\} \quad (2.22.b)$$

$$E_\theta \approx -\frac{i \exp(ikr)}{kr} \sum_{\ell=1}^{\infty} \frac{(2\ell+1)}{\ell(\ell+1)} \left\{ a_\ell \frac{dP_\ell^{(1)}(\cos\theta)}{d\theta} + b_\ell \frac{P_\ell^{(1)}(\cos\theta)}{\sin\theta} \right\} \quad (2.22.a)$$

de tal forma que,

$$\mathbf{E}_s \approx \mathbf{E}_\phi + \mathbf{E}_\theta \approx \frac{\exp(ikr)}{kr} \left\{ S_1(\theta, \beta) \hat{\mathbf{e}}_\phi + S_2(\theta, \beta) \hat{\mathbf{e}}_\theta \right\}$$

Como a fase das duas quantidades complexas E_θ e E_ϕ são arbitrárias, a onda espalhada será, geralmente, elipticamente polarizada. Assim, definimos em (2.22) as *amplitudes de espalhamento* $S_1(\theta, \beta)$ e $S_2(\theta, \beta)$ como,

$$\begin{cases} S_1(\theta, \beta) = -\sum_{\ell=1}^{\infty} \frac{(2\ell+1)}{\ell(\ell+1)} \left\{ b_{\ell} \frac{dP_{\ell}^{(1)}(\cos\theta)}{d\theta} + a_{\ell} \frac{P_{\ell}^{(1)}(\cos\theta)}{\sin\theta} \right\} \\ S_2(\theta, \beta) = -\sum_{\ell=1}^{\infty} \frac{(2\ell+1)}{\ell(\ell+1)} \left\{ a_{\ell} \frac{dP_{\ell}^{(1)}(\cos\theta)}{d\theta} + b_{\ell} \frac{P_{\ell}^{(1)}(\cos\theta)}{\sin\theta} \right\} \end{cases} \quad (2.23)$$

Estas amplitudes representam a decomposição do campo em duas polarizações lineares distintas. Experimentalmente é possível através de analisadores selecionar uma em favor da outra.

Existem direções de especial interesse, não só devido a uma maior intensidade da luz espalhada, como também por um maior interesse nos fenômenos físicos particulares desta direção, como por exemplo efeitos de difração na direção dianteira ($\theta = 0$).

Para esta direção tem-se que:

$$\lim_{\theta \rightarrow 0} \frac{P_{\ell}^{(1)}(\cos\theta)}{\sin\theta} = \lim_{\theta \rightarrow 0} \frac{dP_{\ell}^{(1)}(\cos\theta)}{d\theta} = \frac{\ell(\ell+1)}{2} \quad (2.24)$$

que substituído nas (2.23) leva a:

$$\begin{cases} S_1(0, \beta) = -\frac{1}{2} \sum_{\ell=1}^{\infty} (2\ell+1) \{b_{\ell} + a_{\ell}\} \\ = -\frac{1}{2} \sum_{\ell=1}^{\infty} (2\ell+1) \{a_{\ell} + b_{\ell}\} = S_2(0, \beta) \end{cases} \quad (2.25)$$

Utilizando o teorema ótico (Sakurai 1985) podemos relacionar a *seção de choque total de espalhamento* com a amplitude de onda espalhada na direção dianteira.

Dividindo este resultado pela secção geométrica do centro espalhador, neste caso πb^2 , define-se o *fator de eficiência de extinção* Q_{ext} como:

$$Q_{ext} = \frac{2}{\beta^2} \sum_{\ell=1}^{\infty} (2\ell + 1) \operatorname{Re}(a_{\ell} + b_{\ell}) \quad (2.26)$$

As ressonâncias do espalhamento da luz por uma EMCCD, são associadas aos os pólos dos coeficientes da expansão em ondas parciais para os campos. Por exemplo no caso das eqs(2.20) para uma dada onda parcial ℓ , este pólos no plano- β são soluções da seguinte equação transcendental:

$$\ln' \zeta_{\ell}(\beta) = N \varepsilon_j \frac{\frac{F_{\ell}^j(\gamma)}{\chi_{\ell}(\alpha)} \ln' \psi_{\ell}(\alpha) - \frac{G_{\ell}^j(\gamma)}{\psi_{\ell}(\alpha)} \ln' \chi_{\ell}(\alpha)}{\frac{F_{\ell}^j(\gamma)}{\chi_{\ell}(\alpha)} - \frac{G_{\ell}^j(\gamma)}{\psi_{\ell}(\alpha)}} \quad (2.27)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Ressonâncias } \mathbf{M}, \varepsilon_1 = 1, j = 1, F_{\ell}^1(\gamma) = \chi_{\ell}(\gamma), G_{\ell}^1(\gamma) = \psi_{\ell}(\gamma) \\ \text{Ressonâncias } \mathbf{E}, \varepsilon_1 = \frac{1}{N^2}, j = 2, F_{\ell}^2(\gamma) = \chi'_{\ell}(\gamma), G_{\ell}^2(\gamma) = \psi'_{\ell}(\gamma) \end{array} \right.$$

Deve-se notar que as soluções de (2.22) pertencem ao plano complexo. Isto introduz uma relativa complicação numérica, já que algoritmos para cálculo de funções de Bessel de argumento complexo não são de fácil implementação (Toon & Ackerman 1981, Hightower e Richardson 1988). Cabe ainda ressaltar que, diferentemente do problema de uma esfera simples (Guimarães 1991; Guimarães & Nussenzveig 1994), o denominador das equações transcendentais das ressonâncias não são mais iguais. Adiante veremos as implicações devido ao fato de considerarmos funções e derivadas de Ricatti-Bessel.

Neste capítulo foram introduzidos os coeficientes de espalhamento e o Q_{ext} , no capítulo a seguir serão desenvolvidos algoritmos para o cálculo de ressonâncias.

CAPÍTULO 3

RESSONÂNCIAS E EFEITOS DE TAMANHO

No capítulo anterior foi obtida a expressão para o campo espalhado por uma EMCCD. *As ressonâncias deste espalhamento são modos normais que se propagam no interior da camada esférica dielétrica, isto é, são oscilações auto-sustentáveis do campo eletromagnético neste meio* (van de Hulst 1957). Neste capítulo serão desenvolvidos métodos numéricos para cálculo destes modos. Antes porém, será introduzida a analogia entre índice de refração e potencial (Nussenzweig 1992) de maneira a se adquirir uma melhor compreensão física do problema. Também estudaremos o comportamento de posições e larguras de ressonâncias em função de ρ . Como também observaremos estes efeitos de tamanho no fator de eficiência de extinção Q_{ext} .

3.1 O Potencial efetivo de uma EMCCD

Podemos reescrever a equação de onda radial (2.8) como uma equação tipo Schrödinger independente do tempo. Estabelecendo esta analogia, reescreve-se (2.8) em unidades em que $\hbar = 2m = 1$, de tal forma que:

$$\left\{ -\frac{d^2}{dr^2} + U_{ef}(r) \right\} \varphi_l = k^2 \varphi_l \quad (3.1.a)$$

$$U_{ef} = \begin{cases} -\infty, & \text{se } r \leq a \\ \frac{\lambda^2}{r^2} - k^2 N^2, & \text{se } a < r \leq b \\ \frac{\lambda^2}{r^2}, & \text{se } r > b \end{cases} \quad (3.1.b)$$

Em (3.1.b) foi feita a *modificação de Langer* ($\lambda \equiv (\ell + 1/2) \approx \ell(\ell + 1)$) de maneira a ajustar o comportamento assintótico correto para a "função de onda radial" φ_l (Guimarães 1991; 1993; Lam *et all* 1992). Para a existência de ressonâncias é necessário que $N > 1$, já que desta maneira a camada dielétrica funcionará como uma lente convergente e pode aprisionar raios em seu interior. No caso contrário, o potencial adquire a forma de um degrau e a camada funciona como uma lente divergente.

Em função dos parâmetros ρ e N , o gráfico de U_{ef} pode apresentar duas situações distintas, como visto na Fig. 3.1

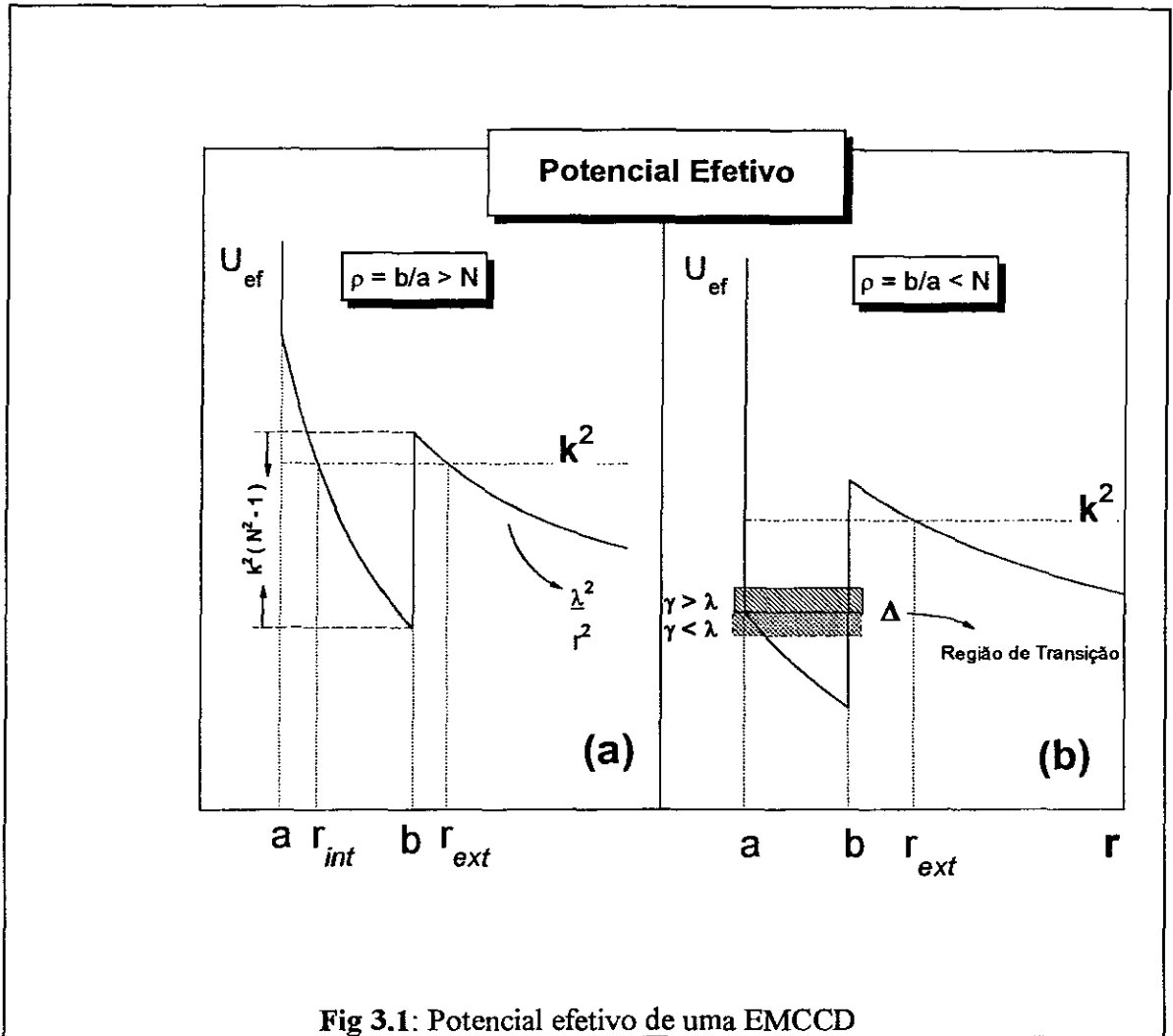


Fig 3.1: Potencial efetivo de uma EMCCD

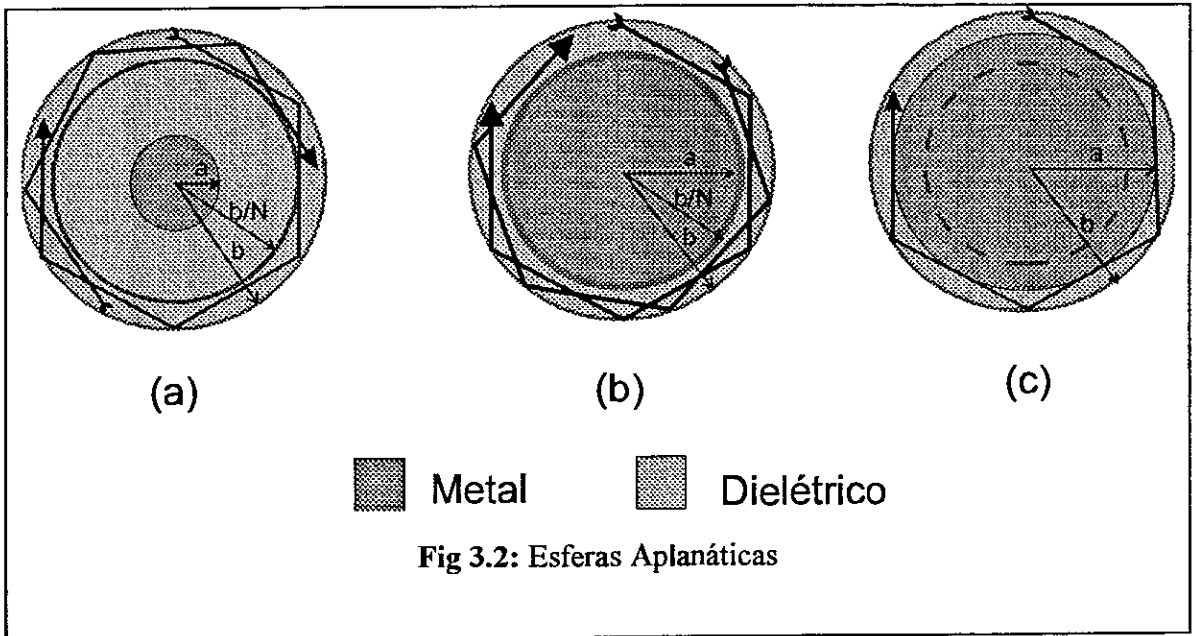
Para $N > 1$, U_{ef} é composto por uma barreira infinita em $r = a$, um poço de profundidade $k^2(N^2 - 1)$ e a barreira centrífuga $(\lambda/r)^2$. Dentro desta formulação, as ressonâncias podem ser interpretadas como *estados quase-ligados da luz* (Guimarães e Nussenzveig 1994, Guimarães 1991; Lam 1992).

² Neste trabalho não foram levados em conta efeitos de absorção, sendo então N sempre um número real. No caso de materiais absorptivos, exige-se que $\text{Re}\{N\} > 1$ para ocorrência de ressonâncias.

Para grandes valores de ρ comparados com N , o potencial U_{ef} é bem próximo ao do problema de uma esfera simples. Sendo assim, para uma dada "energia" k^2 existem duas regiões de penetração de barreira, uma à direita e outra à esquerda do poço. As ressonâncias referentes a este tipo de situação serão denominadas como ressonâncias *tipo Mie* fig.(3.1;a). Quando, o raio da esfera metálica aumenta o poço se modifica fig.(3.1;b), exibindo um ponto de retorno fixo em $r = a$ e uma *região de transição* Δ . Aqui duas situações distintas podem ocorrer para uma dada "energia" k^2 fig. (3.1.b). Uma em que a onda pode penetrar um pouco à esquerda, mas é cortada de forma abrupta e outra, em que não há penetração alguma. Essas ressonâncias referentes a parâmetros de impacto para os quais a esfera metálica *não* pode ser desprezada, serão denominadas por ressonâncias do *tipo Fabry-Perot*. Devido ao fato de serem qualitativamente equivalentes aos modos normais de uma cavidade de Fabry-Perot.

Para dar prosseguimento a esta análise, convém reescrever os parâmetros de tamanho (2.18) em função da razão dos raios externo e interno, $\rho \equiv b/a$ e também, considerar as possíveis situações para as esferas aplanáticas (Fig. 3.2) associadas à superfície esférica $r = b$ (Born & Wolf, 1985), desta maneira:

$$\begin{aligned}
 \beta &= kb \\
 \alpha &= Nkb = N\beta \\
 \gamma &= Nka = \frac{\alpha}{\rho} = \left(\frac{N}{\rho}\right)\beta
 \end{aligned}
 \tag{3.2}$$



As hipóteses devem ser feitas agora sobre as comparações entre o raio do caroço metálico e as posições das esferas aplanáticas bN e b/N , regiões entre as quais a ótica geométrica prevê a localização de campos de maior intensidade (van de Hulst 1957, Nussenzveig 1992). Quando $b/N > a$ e $\gamma < \lambda$, o problema é bem similar ao problema de uma esfera simples, já que a cobertura dielétrica é muito larga (Hightower *et all* 1988) e as ressonâncias se caracterizam como sendo do tipo Mie (Fig 3.1.a e Fig 3.2.a). Ainda com $b/N > a$ pode ocorrer que $\gamma \sim \lambda$, e as ressonâncias serem do tipo Fabry-Perot na região de transição Δ (Ver Fig 3.1.b), nesta região as ressonâncias sofrem uma forte influência de pequenas variações do raio interno (3.2.b). Finalmente quando a camada dielétrica for tão estreita de maneira que $b/N < a$, a esfera aplanática b/N passa a ser virtual, já que agora sua superfície está no interior da esfera metálica (Fig. 3.2.c). Os três casos são resumidos abaixo e relacionados a seus respectivos parâmetros de tamanho:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Tipo Mie, } \alpha > \lambda > \beta > \gamma \\ \text{Tipo } \Delta, |\gamma - \lambda| = O(\lambda^{1/3}), \begin{cases} \alpha > \lambda \approx \gamma > \beta \\ \alpha > \gamma \approx \lambda > \beta \end{cases} \\ \text{Tipo Fabry - Perot, } \alpha > \gamma > \lambda > \beta \end{array} \right.$$

3.2 Cálculo de ressonâncias de uma EMCCD

Os pólos da (2.27) são números complexos escritos como $\tilde{\beta} = \beta - iw$, onde β pode ser identificado como a posição da ressonância e w a sua largura. Usando o procedimento de quantização tipo Bohr Sommerfeld para os estados quase-ligados do potencial efetivo em (3.1), obtém-se uma expressão independente da polarização da forma

$$\int_{r_1}^b \sqrt{\left\{ N^2 k^2 - \left(\frac{\lambda}{r} \right)^2 \right\}} dr = (n + \frac{1}{2})\pi, \quad n = 0, 1, 2, \dots, n_{max} - 1 \quad (3.4)$$

onde n é o número de nós da função de onda no interior do poço, n_{max} é o número máximo de estados ligados possíveis. Para ressonâncias tipo Mie $r_1 = r_{int} = \lambda / (Nk)$ (Fig 3.1.a). Já no caso Fabry-Perot r_1 é a constante $r_1 = a$ (Fig 3.1.b). Para momento angular e razão de raios externo e interno dados (λ, ρ) , a posição da ressonância é rotulada por sua polarização j e ordem n , isto é $\beta \rightarrow \beta_{nj}(\lambda, \rho)$. Dentro da aproximação WKB a largura da ressonância é proporcional ao fator de penetração de barreira:

$$\begin{aligned}
w_{nj} &\propto \exp \left\{ -2 \int_b^{r_{nj}} \sqrt{\left(\frac{\lambda}{r}\right)^2 - N^2 k_{nj}^2} dr \right\} \\
&= \exp \left\{ -2 \left[\lambda \ln \left(\frac{\lambda + \sqrt{\lambda^2 - \beta_{nj}^2(\lambda, \rho)}}{\beta_{nj}^2(\lambda, \rho)} \right) - \sqrt{\lambda^2 - \beta_{nj}^2(\lambda, \rho)} \right] \right\}
\end{aligned} \tag{3.5}$$

A (3.5) mostra que w_{nj} decai exponencialmente e que as ressonâncias associadas a grandes momentos angulares podem ser muito estreitas.

Dentro da aproximação de ressonâncias estreitas,

$$\beta \rightarrow \beta - iw; \text{ com } (\beta \gg w) \tag{3.6}$$

e usando princípio de localização ($\beta \leq \lambda$), podemos separar a eq.(2.27) em suas partes real e imaginária, em ordem de $O(w^2)$. Por exemplo dentro desta aproximação, a equação transcendental, equivalente à (2.27), para a posição da ressonância é dada por:

$$\ln' \chi_\ell(\beta) \approx N \varepsilon_j \frac{\frac{F_\ell^j(\gamma)}{\chi_\ell(\alpha)} \ln' \psi_\ell(\alpha) - \frac{G_\ell^j(\gamma)}{\psi_\ell(\alpha)} \ln' \chi_\ell(\alpha)}{\frac{F_\ell^j(\gamma)}{\chi_\ell(\alpha)} - \frac{G_\ell^j(\gamma)}{\psi_\ell(\alpha)}} \tag{3.7}$$

Na equação acima, os $F_\ell^j(\gamma)$ e $G_\ell^j(\gamma)$ são as mesmas funções definidas em (2.7), porém agora todos os argumentos das funções em (3.7) são reais.

Passemos agora a descrever as diversas etapas de nosso algoritmo computacional para o cálculo destas ressonâncias. Uma maneira de atacar o problema numérico é considerar que em uma região tipo Mie, as ressonâncias de uma EMCCD

diferem pouco das de uma esfera simples. Com isto pode-se usar como valor inicial para a equação transcendente (3.7) para a posição da ressonância a estimativa WKB (Guimarães 1991, Guimarães & Nussenzveig 1994),

$$\beta_{in}^{(0)} = \frac{\tan^{-1}(\sqrt{N^2 - 1})}{\sqrt{N^2 - 1}} \lambda + \left(n + \frac{1}{2}\right) \frac{\pi}{\sqrt{N^2 - 1}} \quad (3.8)$$

Uma vez obtida a solução de (3.7), este resultado é utilizado agora como valor inicial do problema complexo eq.(2.27). Com base neste procedimento numérico construiu-se a tabela de valores ressonantes para $N = 1.33$ (Tab.3.1). Onde utilizamos a seguinte notação para as tabelas e gráficos a seguir:

Ressonâncias Eléctricas de mometum angular ℓ , ordem n referente a um dado ρ :

$$\mathbf{E}_n^\ell(\rho)$$

Ressonâncias Magnéticas de mometum angular ℓ , ordem n referente a um dado ρ :

$$\mathbf{M}_n^\ell(\rho)$$

Ressonâncias	$\rho = b/a$	β	w	γ	$\beta_M - \beta_E$
E_0^{71}	1.50	58.93623	1.36E-5	52.25679	-4.47918E-1
M_0^{71}		58.48831	9.50E-6	51.85963	
	1.40	58.93623	1.36E-5	55.98941	-4.47918E-1
		58.48831	9.50E-6	55.56389	
	1.30	58.93612	1.36E-5	60.29618	-4.47758E-1
		58.48837	9.50E-6	59.83810	
	1.20	58.90990	1.28E-5	65.29180	-4.07503E-1
		58.50240	9.81E-6	64.84016	
E_1^{66}	1.50	59.447	6.94E-3	52.709	-3.628E-1
M_1^{66}		59.084	4.52E-3	52.389	
	1.40	59.446	6.94E-3	56.474	-3.624E-1
		59.084	4.52E-3	56.130	
	1.30	59.419	6.58E-3	60.791	-3.188E-1
		59.101	4.77E-3	60.464	
	1.20	58.870	3.29E-3	65.248	+7.893E-1
		59.659	1.12E-3	66.122	
E_1^{65}	1.50	58.641	8.08E-3	51.995	-3.598E-1
M_1^{65}		58.281	5.26E-3	51.678	
	1.40	58.640	8.08E-3	55.708	-3.593E-1
		58.281	5.26E-3	55.367	
	1.30	58.610	7.62E-3	59.962	-3.099E-1
		58.300	5.44E-3	59.645	
	1.20	58.053	3.84E-3	64.342	+8.328E-1
		58.859	1.22E-3	65.265	
E_2^{61}	1.50	58.9	1.78E-1	52.3	-2.0E-1
M_2^{61}		58.8	1.08E-1	52.1	
	1.40	58.9	1.72E-1	56.0	-1.6E-1
		58.8	1.10E-1	55.8	
	1.30	58.5	1.21E-1	59.9	+6.1E-1
		57.9	1.03E-1	60.5	

Tab. 3.1: Tabela de valores ressonantes

A Tab. 3.1 mostra que a hipótese inicial de que o comportamento de uma EMCCD, pouco difere do de uma esfera simples é confirmada. Na Tab. 3.1 também já é possível notar a drástica mudança nas posições das ressonâncias a medida que a largura da camada diminui. Nesta região de parâmetros, as mais susceptíveis a este comportamento são as de maior ordem (E_2^{61}, M_2^{61}). Entretanto, é importante salientar

que observou-se durante a execução do programa numérico que o número de iterações necessárias para a convergência numérica aumentava a medida que o valor de γ se aproximava de λ . Isto é um reflexo de que o método descrito anteriormente é instável na região de transição Δ . Portanto, um outro procedimento numérico deve ser tomado para o cálculo de ressonâncias nesta região, a saber.

Com os resultados para a posição das ressonâncias obtidos na região tipo Mie ($\rho \gg N$), inicia-se então uma "evaporação" da camada dielétrica através de uma variação de ρ da ordem da largura da ressonância desejada, utilizando-se sempre o valor da ressonância (posição e largura) calculada no passo anterior como valor inicial para sua obtenção. Este método de regressão em ρ foi utilizado para confeccionar os gráficos da Fig. 3.3.

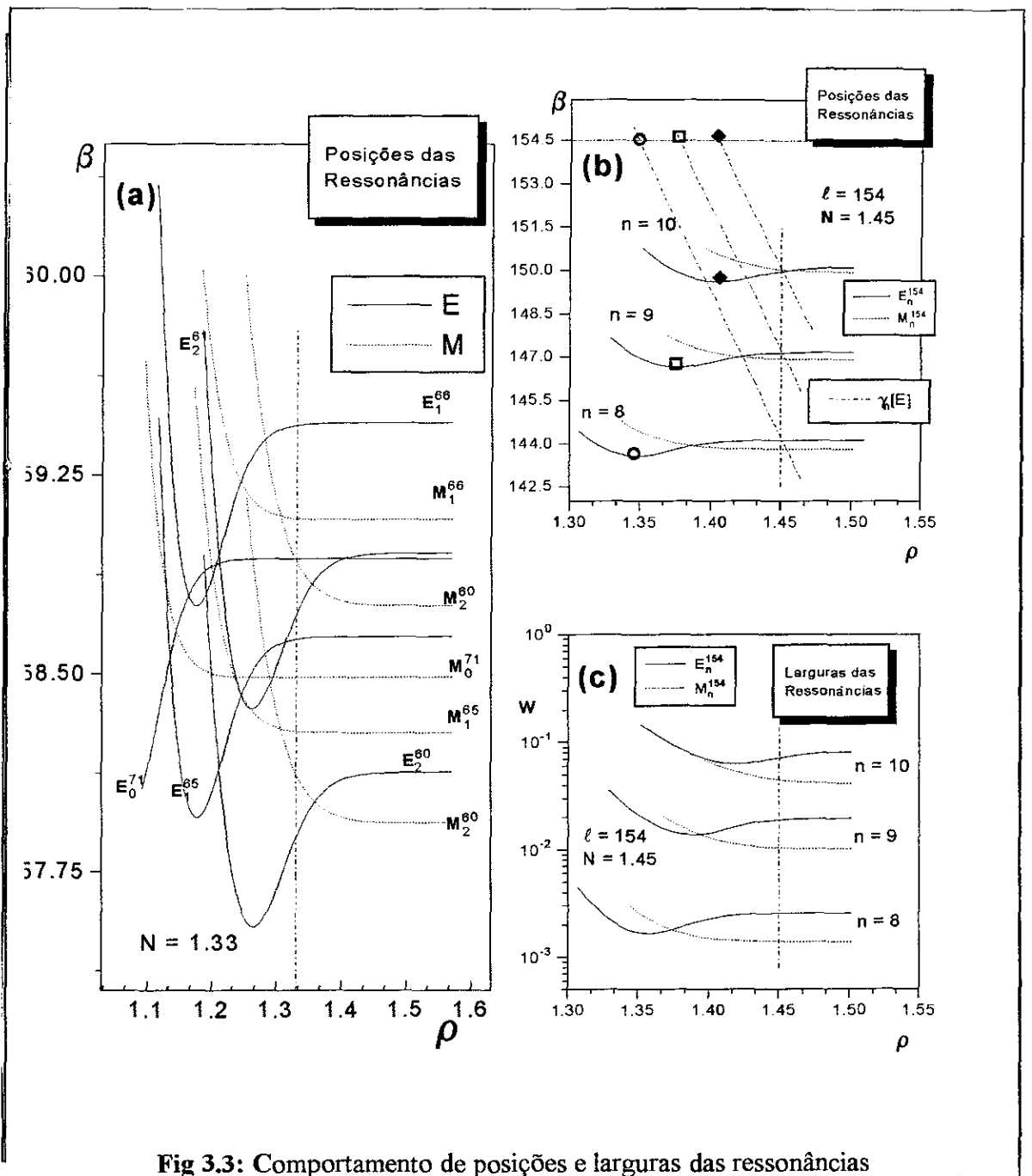


Fig 3.3: Comportamento de posições e larguras das ressonâncias

Na fig.3.3, observa-se o comportamento das ressonâncias (posições e larguras) em uma dada faixa de parâmetros de tamanho ($57 < \beta < 60$) (Fig. 3.3.a), como também para diferentes ordens de ressonância (Fig. 3.3.b; 3.3.c). Nota-se que o

como também para diferentes ordens de ressonância (Fig. 3.3.b; 3.3.c). Nota-se que o comportamento das ressonâncias na regiões de transição ($\rho \approx N$) e Fabry-Perot ($\rho \ll N$) diferem, em muito, do comportamento correlato a região tipo Mie ($\rho \gg N$). É interessante observar também que, algumas ressonâncias **E** e **M**, podem vir a se superpor, exibindo assim os chamados *pontos de cruzamento*. Estes pontos de cruzamento afetam o espalhamento, pois como será visto na seção seguinte, a intensidade do campo espalhado ressonante é drasticamente alterada quando comparada com o resultado equivalente no espalhamento por uma esfera simples.

Também é importante salientar que, as ressonâncias **E**, apresentam um ponto de mínimo, a medida que ρ diminui, característico ao comportamento do espectro eletrônico molecular de um estado *ligante*. Já as ressonâncias **M** apresentam um comportamento sempre crescente ou seja, os “níveis de energia” tendem sempre a serem “expulsos” do poço de potencial a medida que a “largura” ρ diminui, fato este característico do espectro eletrônico molecular de um estado *anti-ligante*. Este comportamento, para o espectro ressonante de uma EMCCD de forma alguma se deve ao acaso. Ele está relacionado a semelhança entre a (2.8) e a equação de Schrödinger. Nestas duas equações, o tunelamento e as condições de contorno são fundamentais na estrutura do espectro de energia (Morrison *et all* 1976). No caso de uma esfera composta por dois materiais dielétricos distintos, com a parte real do índice de refração do caroço dielétrico $\text{Re}\{N_a\}$, maior que o índice de refração da camada $\text{Re}\{N_b\}$, o potencial efetivo será análogo ao de uma molécula diatômica *polarizada*. No caso de uma EMCCD devido a forte absorção do caroço metálico, $\text{Im}\{N_a\} \gg$, os dois poços estão *descorrelacionados*, funcionando esta como uma situação limite para o equivalente ótico de um molécula diatômica fortemente polarizada.

3.3 Cálculo do Q de extinção para uma EMCCD

O método numérico exposto na seção anterior será agora utilizado para identificar picos no perfil dos gráficos do Q_{ext} contra o parâmetro de tamanho β , na região do espectro da Fig 3.3.a, ($58.2 < \beta < 59$). A maneira mais adequada de se calcular numericamente (2.26) é reescrever as (2.20) utilizando a seguinte relação entre as funções de Bessel:

$$\begin{cases} \psi_\ell(\beta) = \frac{1}{2} \{ \zeta_\ell(\beta) + \xi_\ell(\beta) \} \\ \psi'_\ell(\beta) = \frac{1}{2} \{ \zeta'_\ell(\beta) + \xi'_\ell(\beta) \} \end{cases} \quad (3.9)$$

com isto reescrevem-se os operadores (2.19) como,

$$[\chi\psi]'_{\ell,\beta} = \frac{1}{2}[\chi\zeta]'_{\ell,\beta} + \frac{1}{2}[\chi\xi]'_{\ell,\beta} \quad (3.10.a)$$

$$[\chi\psi]''_{\ell,\beta} = \frac{1}{2}[\chi\zeta]''_{\ell,\beta} + \frac{1}{2}[\chi\xi]''_{\ell,\beta} \quad (3.10.b)$$

Desta forma, podemos reescrever os coeficientes (2.20) da expansão em ondas parciais para a onda espalhada como,



$$\alpha_\ell = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \frac{\psi'_\ell(\gamma)[\chi^\xi]_{\ell,\beta}' - \chi'_\ell(\gamma)[\psi^\xi]_{\ell,\beta}'}{\psi'_\ell(\gamma)[\chi^\zeta]_{\ell,\beta}' - \chi'_\ell(\gamma)[\psi^\zeta]_{\ell,\beta}'}$$

$$= \frac{1}{2} + \frac{1}{2} S'_\ell \quad (3.11.a)$$

$$b_\ell = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \frac{\psi_\ell(\gamma)[\chi^\xi]_{\ell,\beta}'' - \chi_\ell(\gamma)[\psi^\xi]_{\ell,\beta}''}{\psi_\ell(\gamma)[\chi^\zeta]_{\ell,\beta}'' - \chi_\ell(\gamma)[\psi^\zeta]_{\ell,\beta}''}$$

$$= \frac{1}{2} + \frac{1}{2} S''_\ell \quad (3.11.b)$$

Onde definimos a *função de espalhamento-S*. Uma vez que, estamos interessados em observar efeitos de ressonância na seção de choque total, temos que ter um critério satisfatório para o truncamento da série infinita (2.26). Para isto, vale lembrar que durante a ressonância temos $(\ell + 1/2) \leq \alpha$. Assim, para o valor de índice de refração estudado ($N = 1.33$) podemos estimar o número máximo de termos somados da série como $\ell_{max} = \beta + 4\beta^{1/3} + 2$ (Nussenzveig 1992).

As regiões de interesse para pesquisa do comportamento do Q_{ext} são as de Mie, Fabry-Perot e próximas a pontos de cruzamento. Todavia, convém serem mostrados Q_{ext} para as duas situações limites, a esfera dielétrica simples e a esfera metálica. É o que nos mostra a Fig 3.4

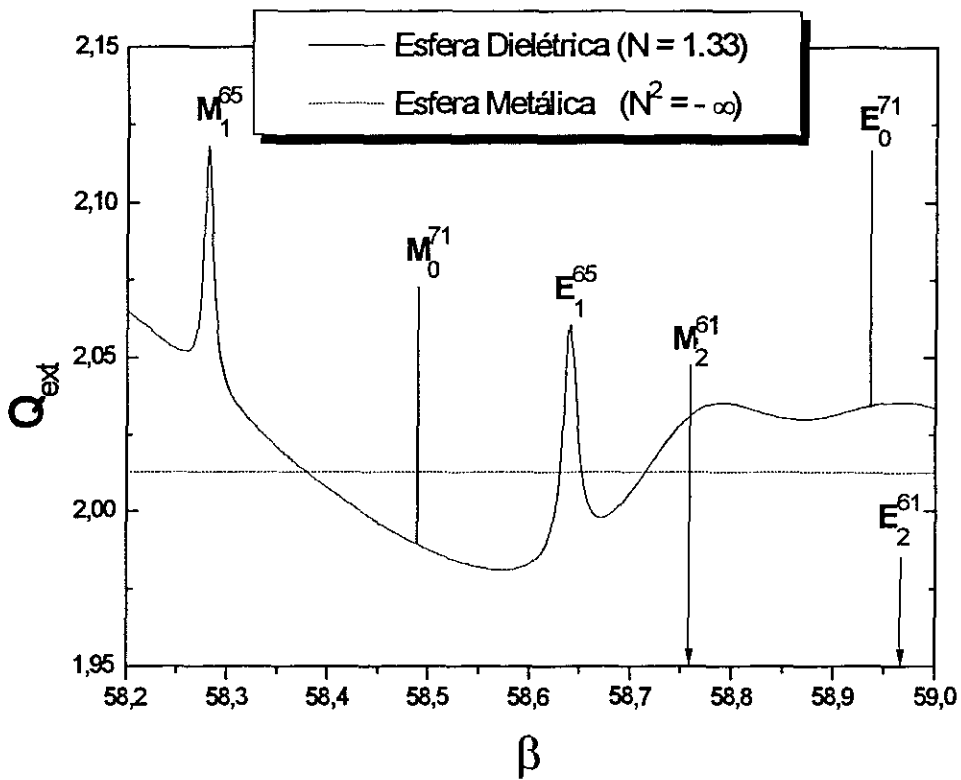


Fig 3.4: Q de extinção para valores limite de uma EMCCD

Para que seja observada a dependência do Q_{ext} em função de ρ , iniciou-se o estudo na região Mie, os resultados apresentam-se na Fig. 3.5,

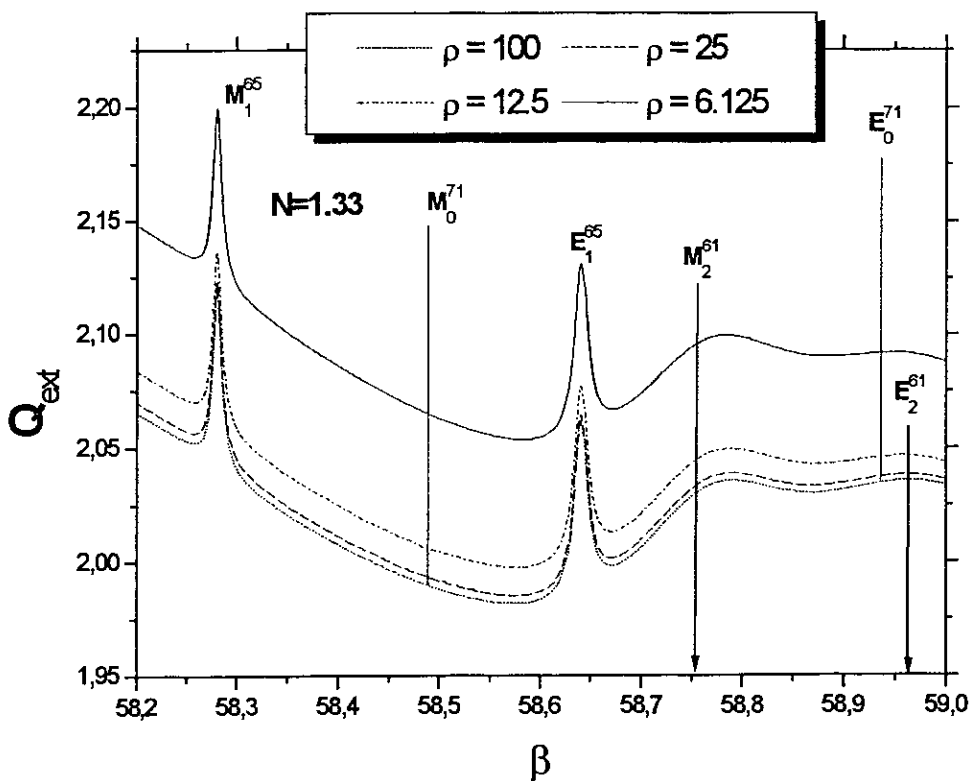


Fig 3.5: Q de extinção na região tipo Mie

Conforme o previsto, as posições das ressonâncias nesta região pouco se modificam. Note que para $\rho = 100$ o comportamento de uma EMCCD reproduz o de uma esfera dielétrica simples. Diminuindo-se os valores de ρ (25, 12.5 e 6.125) observa-se um *ganho coletivo* no perfil do Q de extinção. Isto evidencia a presença do caroço metálico nas propriedades do espalhamento, porém preservando as posições das ressonâncias.

Diminuindo-se o valor de ρ entra-se na região de Fabry-Perot, mostrado na Fig. 3.6.a. A região de cruzamento entre as ressonâncias (E_1^{65}, M_1^{65}) aparece na Fig 3.6.b, note-se a "estabilidade" na posição das ressonâncias de ordem mais baixa E_0^{71} .

O valor de ρ para o qual ocorre o cruzamento, pode ser estimado usando como valor inicial o obtido por inspeção na Fig. 3.3.a e após isto, este resultado é otimizado através de cálculo numérico. Comparando a altura dos picos na Fig 3.6.b, pode-se notar que, para o valor de cruzamento ρ_x este pico é quase duas vezes superior a de valores fora desta região. É importante também ressaltar mais uma vez a grande sensibilidade do Q_{ext} frente a pequenas variações de ρ .

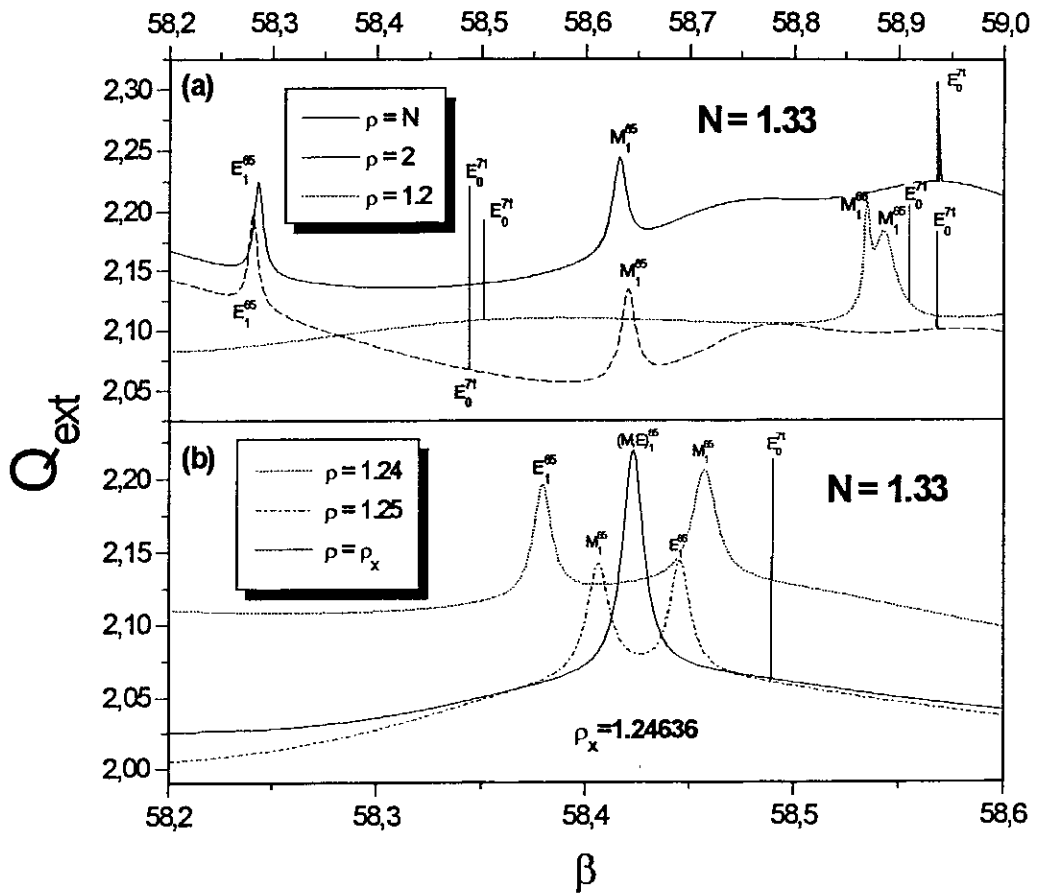


Fig 3.6: Q de extinção na região tipo Fabry-Perot e região de cruzamento

3.4 Conclusões e perspectivas futuras

Desenvolvemos neste trabalho algoritmos capazes de calcular o espectro ressonante de uma EMCCD. Com isto, foi possível se observar a forte semelhança entre este espectro e o espectro eletrônico molecular.

O nosso próximo passo, será a obtenção de expressões assintóticas para as ressonâncias na região de transição. Após isto, tentaremos abordar o problema de uma esfera dielétrica coberta e identificar os regimes predominantes. Também pretendemos fazer um estudo dos efeitos devido a excentricidade do caroço nas propriedades do espalhamento.

Comportamentos limite em física, são de grande importância para a interpretação de novos resultados. Uma EMCCD é um caso limite para o problema mais complexo de uma esfera dielétrica coberta.

Portanto, devido a semelhança entre as ressonâncias de uma esfera coberta e o espectro eletrônico molecular, esperamos que em analogia com a teoria de bandas fotônicas (John 1989), um sistema multi-esferas cobertas deva também exibir localização de fótons. Esperamos também poder abordar este tema no futuro.

Bibliografia:

Abramowitz, M. & Stegun, I.A. (1972), "Handbook of Mathematical Functions" ,10th printing, New York; Dover

Aden, A.L & Kerker, M. (1951), "Scattering of Electromagnetic Waves from two Concentric Spheres", *J. App. Phys.*,**22**, 1242

Ashkin, A. & Dziedzic, J. M. (1981), "Observation of optical resonances of dielectric spheres by light scattering", *Appl. Opt.*, **20**, 1803

Born, M. & Wolf, E. (1985), "Principles of Optics", 6th Edition, New York; Pergamon

Guimarães L.G. (1991), "Cálculo de Ressonâncias do Espalhamento Mie e suas aplicações", Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas, Tese de Ph.D.

Guimarães, L.G. & Nussenzveig, H.M. (1992) "Theory of Mie resonances & ripple fluctuations", *Opt. Comm.*, **89**, 363

Guimarães, L.G. & Nussenzveig, H.M. (1994), "Uniform approximation to Mie resonances", *J. Modern Opt.*, **41**, 625

Guimarães, L.G. (1993) "Theory of Mie caustics" *Opt. Comm.* **103**, 339

Haroche, S. & Klepner, D. (1989), "Cavity quantum electrodynamics", *Phys. Today*, January, 24

Haroche, S. & Raimond, J.M. (1993), "Cavity quantum electrodynamics", *Sci. Am.*, April, 26

Hightower, R.L. & Richardson, C.B (1988), "Resonant Mie scattering from layered sphere", *Appl.Opt.*, **27**, 23,4850

Hightower, R.L., Richardson, C.B, Lin, H.B., Eversole, J.D. & Campillo, A.J. (1988), "Measurements of scattering of light from layered microspheres", *Opt. Lett.* **9**, 946

John, S (1989), "Localization of light", *Phys. Today*, January, 24

Johnson, B.R. (1993), "Theory of morphology dependent resonances: shape and width formulas", *J. Opt. Soc. Am. A*, **10**, 2, 343

Kerker, M. (1969), "The Scattering of Light & Other Electromagnetic Radiation", New York; Academic Press

Lam, C.C., Leung, P.T. & Young, K. (1992), "Explicit asymptotic formulas for the positions, widths & strengths of resonances in Mie scattering", *J. Opt. Soc. Am. B*, **9**, 9, 1585

Morrison, M.A, Estle, T.L. & Lane, N.F.(1976), "Quantum States of Atoms, Molecules and Solids", New Jersey, Prentice Hall Inc.

Murphy, E. L. (1965), "Reduction of electromagnetic backscatter from Plasma-Clad conducting body", *J. App. Phys.*, **36**, 1918

Nussenzveig, H.M. (1977), "Theory of rainbow", *Sci. Am.* **236**, 116

Nussenzveig, H.M. (1992), "Diffraction Effects in Semiclassical Scattering", Cambridge University Press

Ray, A.K., Souyri, A., Davis, E.F. & Allen, T.M. (1991), "Precision of light scattering techniques for measuring optical parameters of microspheres", *Appl.Opt.*, **30**, 27,1351

Rheinstein, J. (1964) "Scattering of electromagnetic waves from dielectric coated conducting spheres", *IEEE Trans. Antennas & Propagation*, **AP-12**, 334

Sakurai, J.J. (1985), "Modern Quantum Mechanics", Addison-Wesley Publishing Company

Scharfman, H. (1954). "Scattering from dielectric coated spheres in the region of the first resonance", *J. App. Phys.*, **23**, 1352

Thurn, R. & Kiefer, W.(1985), "Structural resonances observed in the Raman spectra of optically levitated liquid droplets", *Appl.Opt.*, **24**, 10,1515

Toon, O.B. & Ackerman T.P. (1981), "Algorithms for the calculation of scattering by stratified spheres", *App. Opt.*, **20**, 3657

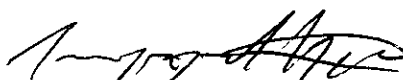
van de Hulst, H.C. (1957), "Light Scattering by Small Particles", New York; John Wiley & Sons

Weston, V.H. & Hemenger, H. (1962), "High frequency scattering from coated sphere", *J. Res. Natl. Bur. Std.*, **D66**, 613

**“CÁLCULO DE RESSONÂNCIAS DO ESPALHAMENTO DA LUZ
POR UMA ESFERA METÁLICA COBERTA POR UMA
CAMADA DIELÉTRICA”**

Tulio Marcelo Bambino

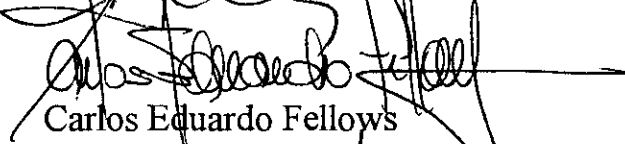
Tese de Mestrado apresentada no Cen-
Brasileiro de Pesquisas Físicas, do Con-
selho Nacional de Desenvolvimento Ci-
entífico e Tecnológico, fazendo parte da
Banca Examinadora os seguintes profes-
sores:



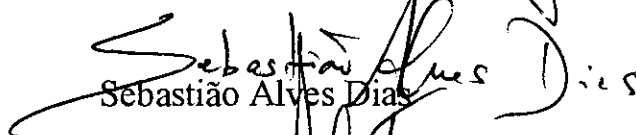
Luiz Gallisa Guimarães - Presidente



Anibal Omar Caride - Orientador *ad hoc*



Carlos Eduardo Fellows



Sebastião Alves Dias

Susana Isabel Zanette de Caride - Suplente

Rio de Janeiro, 31 de março de 1995