5
Códigos e cálculos complementares

5.1
Aproximação dipolar quase estática

<u>**Solução da equação de Laplace em coordenadas esféricas:**</u>

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:

$$x = rsen\theta\cos\phi \qquad y = rsen\theta sen\phi \qquad z = r\cos\theta$$

$$r = (x^2 + y^2 + z^2)^{1/2} \qquad \theta = \cos^{-1}(\frac{z}{r}) \qquad \phi = \tan^{-1}(\frac{y}{x})$$

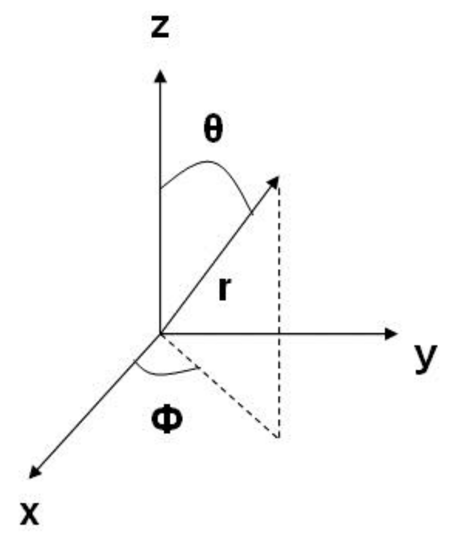

Figura 56: Sistema de coordenadas esféricas.

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

$$\nabla^2(r,\theta,\phi) = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(\frac{r^2\partial}{\partial r}) + \frac{1}{r^2 sen\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(sen\theta\frac{\partial}{\partial\theta}) + \frac{1}{r^2 sen^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \qquad (2.82)$$

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

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

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

$$\frac{\partial}{\partial r}(\frac{r^2\partial V}{\partial r}) + \frac{1}{sen\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(sen\theta\frac{\partial V}{\partial\theta}) = 0 \qquad (2.83)$$

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.

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

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

$$\frac{1}{R}\frac{\partial}{\partial r}(\frac{r^2\partial R}{\partial r}) + \frac{1}{\Theta}\frac{1}{sen\theta}\frac{\partial}{d\theta}(sen\theta\frac{\partial\Theta}{\partial\theta}) = 0 \qquad (2.85)$$

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 2° ordem:

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

$$\frac{1}{\Theta}\frac{1}{sen\theta}\frac{\partial}{d\theta}(sen\theta\frac{\partial\Theta}{\partial\theta}) = -l(l+1) \tag{2.87}$$

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

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

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

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

$$\Theta(\theta) = P_l(\cos\theta) \tag{2.89}$$

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

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

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

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

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 ($r \to \infty$). 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**:
$\vec{E}_{ext}(x,y,z) \to E_o \hat{z}$ se $r \to \infty$	$\varepsilon_{Np}\vec{E}_{r,\mathrm{int}} = \varepsilon_m \vec{E}_{r,ext}$ (Condição radial)
Condição E1B:	**Condição E2B**:
$\vec{E}_{\mathrm{int}}(x,y,z) \to Finito$ se $r \to 0$	$\vec{E}_\theta$ 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**:
$\lim_{r\to\infty} V_{ext}(r,\theta) \to -E_o z = -E_o r\cos\theta$ se r → ∞	$\varepsilon_{Np}\frac{\partial V_{\text{int}}}{\partial r} = \varepsilon_m \frac{\partial V_{ext}}{\partial r}$ para r = R (Condição radial)
Condição V1B:	**Condição V2B**:
$V_{\text{int}}(r,\theta) \to 0$ se r → 0	$V_{\theta,\text{int}} = V_{\theta,ext}$ $V_{\phi,\text{int}} = V_{\phi,ext}$ $V_{\text{int}}(R,\theta) = V_{ext}(R,\theta)$ 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**:

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

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

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

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

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

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

$$\boxed{B_{0,\text{int}} = 0} \tag{2.93}$$

Agora vamos determinar os coeficientes $A_{0,\text{int}}$ e $B_{0,ext}$ 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:

$V_{\text{int}}(R,\theta) = V_{ext}(R,\theta) \Rightarrow A_{0,\text{int}} + \frac{B_{0,\text{int}}}{R} = A_{0,ext} + \frac{B_{0,ext}}{R}$ com isto, substituindo $B_{0,\text{int}}$ e $A_{0,ext}$ dados pelas equações (2.92) e (2.93) na expressão acima obteremos que:

$$\boxed{A_{0,\text{int}} = -E_o r \cos\theta + \frac{B_{0,ext}}{R}} \tag{2.94}$$

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

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

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

Com isto:

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

$$\boxed{B_{0,ext} = -r^2 E_o \cos\theta} \tag{2.95}$$

Voltando agora na equação (2.94) veremos que:

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

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

$V_{ext} = -rE_o\cos\theta - \dfrac{r^2 E_o \cos\theta}{r}$ = 0! (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:

$$\lim_{r\to\infty} V_{ext}(r,\theta) = \lim_{r\to\infty}\left(A_{1,ext} r + \frac{B_{1,ext}}{r^2}\right)P_1(\cos\theta) = \lim_{r\to\infty}\left(A_{1,ext} r\cos\theta + \frac{B_{1,ext}\cos\theta}{r^2}\right)$$

$$= \lim_{r\to\infty}\left(A_{1,ext} z + \frac{B_{1,ext}\cos\theta}{r^2}\right) = A_{1,ext} z = -E_o z$$

Desta forma teremos que:

$$\boxed{A_{1,ext} = -E_o} \tag{2.96}$$

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

$\lim_{r\to o} V_{\text{int}}(r,\theta) = \lim_{r\to o}\left(A_{1,\text{int}} r + \dfrac{B_{1,\text{int}}}{r^2}\right)P_1(\cos\theta) = \lim_{r\to o}\left(\dfrac{B_{1,\text{int}}\cos\theta}{r^2}\right) = \infty$ com isto $B_{1,\text{int}}$ = 0 para que o potencial se aproxime de zero no centro:

$$\boxed{B_{1,\text{int}} = 0} \tag{2.97}$$

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

$V_{\text{int}}(R,\theta) = V_{ext}(R,\theta)$

$\Rightarrow A_{1,\text{int}} R\cos\theta + \dfrac{B_{1,\text{int}}\cos\theta}{R^2} = A_{1,ext} R\cos\theta + \dfrac{B_{1,ext}\cos\theta}{R^2}$ com isto, substituindo $B_{1,\text{int}}$ e $A_{1,ext}$ dados pelas equações (2.96) e (2.97) na expressão acima e dividindo ambos os lados por cosθ e depois por R obteremos que:

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

Sabemos que:

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

E suas derivadas são dadas por:

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

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

$$\varepsilon_{Np} A_{1,\mathrm{int}}\cos\theta = \varepsilon_m(-E_o\cos\theta - \frac{2B_{1,ext}\cos\theta}{R^3})$$

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

$$-\varepsilon_{Np}E_o\cos\theta + \varepsilon_{Np}\frac{B_{1,ext}}{R^3}\cos\theta = -\varepsilon_m E_o\cos\theta - \frac{2\varepsilon_m B_{1,ext}\cos\theta}{R^3}$$

$$\frac{\varepsilon_{Np}B_{1,ext}}{R^3}\cos\theta + \frac{2\varepsilon_m B_{1,ext}\cos\theta}{R^3} = \varepsilon_{Np}E_o\cos\theta - \varepsilon_m E_o\cos\theta$$

$$B_{1,ext}(\frac{\varepsilon_{Np}\cos\theta}{R^3} + \frac{2\varepsilon_m\cos\theta}{R^3}) = E_o\cos\theta(\varepsilon_{Np} - \varepsilon_m) \quad \text{e finalmente:}$$

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

Substituindo a equação (2.99) na equação (2.98) obteremos o coeficiente $A_{1,\mathrm{int}}$:

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

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

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

$$\boxed{V_{\mathrm{int}}(r,\theta) = \frac{-3\varepsilon_m}{\varepsilon_{Np} + 2\varepsilon_m} E_0 r\cos\theta} \tag{3.01}$$

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

$$V_{ext}(r,\theta) = A_{1,ext} r\cos\theta + \frac{B_{1,ext}}{r^2}\cos\theta = -E_o r\cos\theta + \frac{1}{r^2}\cos\theta(\frac{E_o R^3(\varepsilon_{Np} - \varepsilon_m)}{\varepsilon_{Np} + 2\varepsilon_m})$$

$$\boxed{V_{ext}(r,\theta) = -E_o r\cos\theta + (\frac{\varepsilon_{Np} - \varepsilon_m}{\varepsilon_{Np} + 2\varepsilon_m})\frac{E_o R^3 \cos\theta}{r^2}} \qquad (3.02)$$

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

$$\vec{E}_{\text{int}}(r,\theta) = \frac{3\varepsilon_m}{2\varepsilon_m + \varepsilon_{Np}} E_o \cos\theta \hat{r} - \frac{3\varepsilon_m}{2\varepsilon_m + \varepsilon_{Np}} E_0 sen\theta \hat{\theta} \qquad (3.03)$$

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:

$$\hat{r} = \cos\theta \hat{z} + sen\theta \hat{y}$$

$$\hat{\theta} = -sen\theta \hat{z} + \cos\theta \hat{y}$$

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

$$\boxed{\vec{E}_{\text{int}} = \frac{3\varepsilon_m}{2\varepsilon_m + \varepsilon_{Np}} E_o \hat{z}} \qquad (3.04)$$

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

$$\boxed{\vec{E}_{ext} = E_o \hat{z} + \frac{2R^3(\varepsilon_{Np} - \varepsilon_m)}{2\varepsilon_m + \varepsilon_{Np}} \frac{E_o \cos\theta}{r^3} \hat{r} + \frac{R^3(\varepsilon_{Np} - \varepsilon_m)}{2\varepsilon_m + \varepsilon_{Np}} \frac{E_o sen\theta}{r^3} \hat{\theta}} \qquad (3.05)$$

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

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

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:

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

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

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

De (3.08) temos que:

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

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

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

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

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

$\varepsilon_R = \dfrac{\varepsilon_{\mathrm{Im}}{}^2}{4n_{\mathrm{Im}}{}^2} - n_{\mathrm{Im}}{}^2 = \dfrac{4n_{\mathrm{Im}}{}^4 - \varepsilon_{\mathrm{Im}}{}^2}{4n_{\mathrm{Im}}{}^2}$ Vamos primeiramente encontrar as soluções para n_{Im}: Reescrevendo a equação acima, obteremos um polinômio de quarto grau em n_{Im}.

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

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

$$n_{\mathrm{Im}1}{}^2 = \frac{\varepsilon_R + \sqrt{\varepsilon_R{}^2 + \varepsilon_{\mathrm{Im}}{}^2}}{2} \quad (3.12) \text{ e } \quad n_{\mathrm{Im}2}{}^2 = \frac{\varepsilon_R - \sqrt{\varepsilon_R{}^2 + \varepsilon_{\mathrm{Im}}{}^2}}{2} \qquad (3.13)$$

Agora vamos utilizar o mesmo recurso para determinar n_R:

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

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

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

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

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

Resumo das soluções quadradas:

$$n_{\mathrm{Im}1}{}^2 = \frac{\varepsilon_R + \sqrt{\varepsilon_R{}^2 + \varepsilon_{\mathrm{Im}}{}^2}}{2} \quad ; \quad n_{\mathrm{Im}2}{}^2 = \frac{\varepsilon_R - \sqrt{\varepsilon_R{}^2 + \varepsilon_{\mathrm{Im}}{}^2}}{2}$$

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

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

$n_{R1}{}^2 = \frac{\varepsilon_R + \sqrt{\varepsilon_R{}^2 + \varepsilon_{\mathrm{Im}}{}^2}}{2}$ e $n_{\mathrm{Im}2}{}^2 = \frac{\varepsilon_R - \sqrt{\varepsilon_R{}^2 + \varepsilon_{\mathrm{Im}}{}^2}}{2}$ 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:

> $e := 1.60217653 * 10\wedge(-19)$

massa efetiva do elétron:

> $m := 0.99 * 9.1091 * 10\wedge(-31)$

Densidade dos elétrons livres:

> $\rho := 5.90172415543 * 10\wedge(28)$

Permissividade do Vácuo:

> $\epsilon o := 8.8541878176 * 10\wedge(-12)$

Tempo de colisão associada com a exitação coletiva dos elétrons:

> $\tau := 9.3 * 10\wedge(-15)$

Damping parameter:

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

Velocidade da Luz:

> $c := 3 * 10^8$

Constante dielétrica do meio hospedeiro:

> $eh := 1$

Filling Factor Definitions:

>

> $f6nm := 2 \cdot 10^{-2}$

> $f8nm := 4 \cdot 10^{-2}$

> $f10nm := 6 \cdot 10^{-2}$

> $f12nm := 8 \cdot 10^{-2}$

> $f20nm := 10 \cdot 10^{-2}$

Lambda de ressonância:

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

Frequência de ressonância :

> $wo := \frac{2 \cdot Pi \cdot c}{\lambda o}$

Frequência do plasma de elétrons livres:

> $wp := e \cdot \mathrm{sqrt}\left(\frac{\rho}{m \cdot \epsilon o}\right)$

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

> $\lambda := w \to \frac{2 \cdot \pi \cdot c}{w}$

> $\lambda(w)$

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

> $\epsilon 1 := w \to 1 - \frac{wp^2 \cdot \tau^2}{1 + (\tau \cdot w)^2}$

> $\epsilon 1(w)$

> $\epsilon 2 := w \to \frac{wp^2 \cdot \tau}{w \cdot \left(1 + (\tau \cdot w)^2\right)}$

> $\epsilon 2(w)$

Constante dielétrica do metal:

> $ej := w \to \epsilon 1(w) + I \cdot \epsilon 2(w)$

>

> $ej(w)$

Constante dielétrica efetiva de Maxwell-Garnet:

> $eff := w \to \frac{(ej(w) + (2 \cdot eh) + (2 \cdot f6nm \cdot (ej(w) - eh)))}{(ej(w) + (2 \cdot eh) - (f6nm \cdot (ej(w) - eh)))} \cdot eh$

> $eff8 := w \to \frac{(ej(w) + (2 \cdot eh) + (2 \cdot f8nm \cdot (ej(w) - eh)))}{(ej(w) + (2 \cdot eh) - (f8nm \cdot (ej(w) - eh)))} \cdot eh$

> $eff10 := w \to \frac{(ej(w) + (2 \cdot eh) + (2 \cdot f10nm \cdot (ej(w) - eh)))}{(ej(w) + (2 \cdot eh) - (f10nm \cdot (ej(w) - eh)))} \cdot eh$

> $eff12 := w \to \frac{(ej(w) + (2 \cdot eh) + (2 \cdot f12nm \cdot (ej(w) - eh)))}{(ej(w) + (2 \cdot eh) - (f12nm \cdot (ej(w) - eh)))} \cdot eh$

> $eff20 := w \to \frac{(ej(w) + (2 \cdot eh) + (2 \cdot f20nm \cdot (ej(w) - eh)))}{(ej(w) + (2 \cdot eh) - (f20nm \cdot (ej(w) - eh)))} \cdot eh$

> $eff(w)$

> $eff8(w)$

> $eff10(w)$

> $eff12(w)$

> $eff20(w)$

Parte Real da CDF:

> $Realeff := w \to \Re(eff(w))$

> $Realeff8 := w \rightarrow \Re(eff8(w))$

> $Realeff10 := w \rightarrow \Re(eff10(w))$

> $Realeff12 := w \rightarrow \Re(eff12(w))$

> $Realeff20 := w \rightarrow \Re(eff20(w))$

> $Realeff(w)$

> $Realeff8(w)$

> $Realeff10(w)$

> $Realeff12(w)$

> $Realeff20(w)$

Parte Imaginária da CDF:

> $Imageff := w \rightarrow \Im(eff(w))$

> $Imageff8 := w \rightarrow \Im(eff8(w))$

> $Imageff10 := w \rightarrow \Im(eff10(w))$

> $Imageff12 := w \rightarrow \Im(eff12(w))$

> $Imageff20 := w \rightarrow \Im(eff20(w))$

> $Imageff8(w)$

> $Imageff10(w)$

> $Imageff12(w)$

> $Imagleff20(w)$

Plot da parte real da CDF:

>

> *plot*([*Realeff*(*w*)], $w = 5 \cdot 10^{15} .. 1.2 \cdot 10^{16}$, *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*)], $w = 5.6 \cdot 10^{15} .. 1 \cdot 10^{16}$, *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 = 6·10^15..1·10^16, 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 = 5.8·10^15..1·10^16, 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)")
```