

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DE TECNOLOGIA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA ELÉTRICA

Marcus Vinicius do Amaral Pires

**Otimização Estrutural de Sensores
Ópticos Baseados em Moléculas
Fotônicas: Mitigação da Dependência
Térmica para Aplicações de Alta
Precisão**

Marcus Vinicius do Amaral Pires

**Otimização Estrutural de Sensores
Ópticos Baseados em Moléculas
Fotônicas: Mitigação da Dependência
Térmica para Aplicações de Alta
Precisão**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Elétrica do Centro de Ciências Exatas e de Tecnologia da Universidade Federal de São Carlos, como parte dos requisitos para a obtenção do título de Mestre em Engenharia Elétrica.

Área de concentração: Fotônica: Materiais e Dispositivos

Orientador: Prof. Dr. Luís Alberto Mijam Barêa

Coorientador: Prof. Dr. Paulo Henrique Dias Ferreira

São Carlos - SP

2026

Pires, Marcus Vinicius do Amaral

Otimização Estrutural de Sensores Ópticos Baseados em Moléculas Fotônicas: Mitigação da Dependência Térmica para Aplicações de Alta Precisão / Marcus Vinicius do Amaral Pires -- 2026.

115f.

Dissertação (Mestrado) - Universidade Federal de São Carlos, campus São Carlos, São Carlos

Orientador (a): Luís Alberto Mijam Barêa

Banca Examinadora: André Luís Moras Junior, Helder Vinicius Avanço Galeti

Bibliografia

1. Sensores ópticos. 2. Moléculas fotônicas. 3. Otimização estrutural. I. Pires, Marcus Vinicius do Amaral. II. Título.

Ficha catalográfica desenvolvida pela Secretaria Geral de Informática (SIn)

DADOS FORNECIDOS PELO AUTOR

Bibliotecário responsável: Arildo Martins - CRB/8 7180

Folha de Aprovação

Defesa de Dissertação de Mestrado do candidato Marcus Vinicius do Amaral Pires, realizada em 20/03/2026.

Comissão Julgadora:

Prof. Dr. Luís Alberto Mijam Barêa (UFSCar)

Prof. Dr. Helder Vinicius Avanço Galetti (UFSCar)

Prof. Dr. André Luís Moras Junior (UNICAMP)

Dedico esta dissertação à minha esposa, Caroline, por ter caminhado comigo desde o início do mestrado — dividindo desafios, celebrando conquistas e tornando essa jornada mais leve.

Agradecimentos

Agradeço ao meu orientador, Prof. Dr. Luís Alberto Mijam Barêa, pela paciência, dedicação e ensinamentos ao longo dos anos de orientação, bem como pela confiança e pelo constante incentivo durante o desenvolvimento deste trabalho. Agradeço também ao meu coorientador, Prof. Dr. Paulo Henrique Dias Ferreira, pelo apoio técnico e pelas contribuições fundamentais nos desafios práticos do estudo.

À Universidade Federal de São Carlos (UFSCar), ao Programa de Pós-Graduação e aos docentes e servidores que contribuíram para minha formação e para a realização desta pesquisa, registro meus agradecimentos. Agradeço, ainda, ao grupo de pesquisa GpDFoton, pelas discussões, trocas de conhecimento e pelo ambiente colaborativo que contribuíram significativamente para este trabalho.

Por fim, agradeço à minha família pelo suporte e compreensão ao longo desse percurso.

"If you believe the possibility exists, then you should do whatever it takes"
(Roy Mustang, FMA)

Resumo

Sensores ópticos baseados em microcavidades ressonantes têm se destacado por reunir alta sensibilidade e potencial de integração em plataformas fotônicas em silício. Entretanto, variações de temperatura podem provocar deslocamentos espectrais das ressonâncias, introduzindo incertezas que degradam a repetibilidade e a precisão de medições de índice de refração. Nesse contexto, esta dissertação investiga uma estratégia passiva de mitigação da dependência térmica por meio de otimização estrutural de um sensor baseado em moléculas fotônicas, com foco no equilíbrio entre sensibilidade e estabilidade térmica.

A abordagem empregada combina modelagem e simulações computacionais para avaliar, de forma sistemática, como alterações geométricas influenciam a resposta espectral do dispositivo sob variação controlada de temperatura e sob diferentes condições de meio externo. As ressonâncias são identificadas ao longo do espectro e o deslocamento térmico é quantificado, permitindo comparar tendências entre configurações e estabelecer métricas consistentes para estabilidade e desempenho de detecção. Além do estudo físico, são discutidos aspectos práticos relacionados à viabilidade de implementação e às limitações típicas de fabricação em *foundries* de fotônica integrada, de modo a aproximar a análise do cenário de aplicação.

Os resultados mostram que modificações estruturais podem reduzir a sensibilidade térmica sem comprometer a sensibilidade ao índice de refração, indicando que a resposta térmica é predominantemente governada pela geometria do dispositivo e pela distribuição modal do campo. Verifica-se também que determinadas escolhas geométricas levam a comportamentos distintos de compromisso entre estabilidade e sensibilidade, permitindo a identificação de configurações com melhor desempenho relativo em cada critério e apontar uma configuração potencialmente mais equilibrada.

Palavras-chave: Sensores ópticos, microcavidades ressonantes, estabilidade térmica, otimização estrutural, fotônica integrada.

Abstract

Optical sensors based on resonant microcavities have gained prominence by combining high sensitivity with strong potential for integration on silicon photonic platforms. However, temperature variations can induce spectral shifts of the resonances, introducing uncertainties that degrade the repeatability and accuracy of refractive-index measurements. In this context, this dissertation investigates a passive approach to mitigate thermal dependence through structural optimization of a photonic-molecule-based sensor, with emphasis on the trade-off between sensitivity and thermal stability.

The adopted methodology combines modeling and computational simulations to systematically assess how geometric modifications influence the device spectral response under controlled temperature variation and under different external-medium conditions. Resonances are identified across the spectrum, and thermal drift is quantified, enabling comparison of trends among configurations and the definition of consistent metrics for stability and detection performance. Beyond the physical analysis, practical aspects related to implementation feasibility and typical fabrication constraints in integrated photonics foundries are discussed, bringing the study closer to realistic deployment scenarios.

The results show that structural modifications can reduce the thermal sensitivity without compromising refractive-index sensitivity, indicating that the thermal response is predominantly governed by the device geometry and the modal field distribution. It is also observed that specific geometric choices lead to distinct trade-off behaviors between stability and sensitivity, allowing the identification of configurations that perform better under each criterion and highlighting a potentially more balanced configuration.

Keywords: Optical sensors, resonant microcavities, thermal stability, structural optimization, integrated photonics.

Lista de ilustrações

Figura 1 – Biossensores fotônicos integrados em plataforma Lab-on-a-Chip.	27
Figura 2 – Molécula fotônica aplicada em sensoriamento óptico	30
Figura 3 – Refração e Reflexão da luz	40
Figura 4 – Guia de onda e reflexão interna total	41
Figura 5 – Componentes da reflexão interna total	43
Figura 6 – Distribuição de energia e potência em um microdisco	47
Figura 7 – Dinâmica espectral em moléculas fotônicas	49
Figura 8 – Acoplamento óptico em cavidade anelar	50
Figura 9 – Espectro de transmissão em uma cavidade anelar	51
Figura 10 – Seção transversal em um guia de onda.	58
Figura 11 – Partição da seção transversal em Slabguides.	59
Figura 12 – Modelo 2D de uma cavidade anelar.	59
Figura 13 – Neff2D e Neff3D: valores simulados para solução de Etilenoglicol em 5% de concentração	60
Figura 14 – Neff2D e Neff3D: Erro diferencial observado.	61
Figura 15 – Layout proposto para o sensor óptico baseado em molécula fotônica (PM).	64
Figura 16 – Modelos de layout do dispositivo em ambiente CAD (KLayout)	67
Figura 17 – Etapas para a aplicação do método do índice efetivo na área de detecção do sensor	68
Figura 18 – Distribuição dos dispositivos na máscara de fabricação	79
Figura 19 – Diagnóstico do algoritmo de pareamento espectral e cálculo de sensibi- lidade (D1, 20 °C)	86
Figura 20 – Cálculo da estabilidade térmica via API (E3)	89
Figura 21 – Variação da sensibilidade com a temperatura para o dispositivo D1.	93
Figura 22 – Variação da sensibilidade com a temperatura para o dispositivo E1 e F1.	93
Figura 23 – Variação da sensibilidade com a temperatura para o dispositivo F1.	94

Figura 24 – Distorção espectral por aproximação entre ressonâncias de detecção e referência (D1).	95
Figura 25 – Regressões lineares da sensibilidade média $S(\lambda)$ (1.46–1.62 μm) para diferentes áreas de detecção.	96
Figura 26 – Variação da sensibilidade com a temperatura para o dispositivo E2. . .	99
Figura 27 – Variação da sensibilidade com a temperatura para o dispositivo E3. . .	99
Figura 28 – Variação da sensibilidade com a temperatura para o dispositivo E4. . .	100
Figura 29 – Variação da sensibilidade com a temperatura para o dispositivo E5. . .	100
Figura 30 – Regressões lineares da sensibilidade média $S(\lambda)$ (1.46–1.62 μm) para diferentes estrangulamentos.	101
Figura 31 – Comparação da estabilidade térmica (TS) entre dispositivos com variação de W_L e W_t	104
Figura 32 – Coeficiente térmico residual (RTC) para diferentes geometrias do sensor.	105
Figura 33 – Resposta espectral do dispositivo E3 para o cenário com analito água. .	111

Lista de tabelas

Tabela 1 – Coeficientes em temperatura do Analito Base	73
Tabela 2 – Parâmetros dos blocos da máscara de fabricação	81
Tabela 3 – Parâmetros das linhas da máscara de fabricação	81
Tabela 4 – Sensibilidade calculada para o dispositivo D1.	94
Tabela 5 – Métricas médias obtidas na variação da Área de Detecção	97
Tabela 6 – Métricas médias obtidas na variação do Estrangulamento	101
Tabela 7 – Resultados simulados para E2–E5 nas regiões espectrais $\lambda \approx 1460$ nm e $\lambda \approx 1550$ nm.	108
Tabela 8 – Comparação entre RTC simulado e RTC_{teo}	108
Tabela 9 – Comparação entre TS simulado e TS_{teo}	109
Tabela 10 – Comparação entre valores teóricos e simulados para 1460 nm e 1550 nm.	112

BPM Beam Propagation Method
CMOS Complementary Metal-Oxide-Semiconductor
EG Etilenoglicol
EIM Effective Index Method
FDTD Finite-Difference Time-Domain
FE Fator de Extinção
FSR Free Spectral Range
LOD Limite de detecção
LOC Lab-on-a-Chip
MDVR Faixa de variação máxima detectável
MRR microring resonators
PDK Process Design Kit
PM Photonic Molecule
Q Fator de Qualidade
RI refractive index
RIS Refractive Index Sensor
RIU Refractive Index Unit
RTC Residual Thermal Coefficient
SiNOI silicon nitride-on-insulator
SNR Relação Sinal-Ruído
SOI silicon-on-insulator
TS thermal stability
WGM Whispering Gallery Mode

Sumário

1	INTRODUÇÃO	25
1.1	Sensores Ópticos Integrados Baseados em Microcavidades Resonantes	26
1.2	Dependência Térmica em Sensores Ressonantes	28
1.3	Arquiteturas Diferenciais Baseadas em Moléculas Fotônicas	29
1.4	Lacuna Científica e Motivação do Trabalho	31
1.5	Objetivos do Trabalho	32
1.5.1	Objetivo Geral	33
1.5.2	Objetivos Específicos	33
1.6	Impactos e Inserção Tecnológica da Pesquisa	33
1.6.1	Impacto para a Sociedade e Aplicações Tecnológicas	34
1.6.2	Desenvolvimento Sustentável e Alinhamento com os ODS	35
1.6.3	Inserção Tecnológica e Contexto Nacional	35
1.7	Organização da Dissertação	36
2	FUNDAMENTOS TEÓRICOS	39
2.1	Guia de onda óptico	39
2.2	Microcavidades Ópticas e Moléculas Fotônicas	47
2.3	Sensores Ópticos baseados em PMs	52
2.3.1	Sensibilidade em um Microrressonador Isolado	52
2.3.2	Extensão da Análise para Moléculas Fotônicas	53
2.3.3	Resíduo Térmico Diferencial	54
2.3.4	Relação entre Sensibilidade, Fator-Q, FSR e Faixa de variação máxima detectável	55
2.3.5	Definição Matemática da Faixa de variação máxima detectável (MDVR)	56
2.3.6	Interdependência entre Sensibilidade, Q e MDVR	56
2.4	Metodologia de Modelagem com Redução Dimensional 3D→2D	57

3	METODOLOGIA	63
3.1	Arquitetura do sensor e parâmetros de varredura geométrica .	64
3.2	Ferramentas de simulação e estratégia computacional	65
3.2.1	Simulação eletromagnética e modelagem do dispositivo	66
3.2.2	Redução dimensional 3D-2D por método do índice efetivo	67
3.2.3	Camada computacional em Python: automação, dados e otimização . .	68
3.3	Fases do projeto	70
3.3.1	Fase 1 – Modelagem Matemática	70
3.3.2	Fase 2 – Seleção e caracterização de materiais	70
3.3.3	Fase 3 – Simulações do modelo matemático e ajuste de parâmetros globais	73
3.3.4	Fase 4 – Simulação eletromagnética do dispositivo completo	74
3.3.5	Fase 5 – Construção do conjunto de variações do layout e análise auto-	
	matizada	75
3.3.6	Iterações do fluxo metodológico e adaptação a <i>foundries</i>	77
3.4	Máscaras de fabricação	78
3.4.1	Estratégia de variação e divisão em blocos	79
3.4.2	Nomenclatura adotada	80
3.4.3	Motivação da estratégia	81
3.5	Crítérios de comparação e tomada de decisão	81
3.5.1	Carregamento e pré-processamento do espectro	82
3.5.2	Deteccção das ressonâncias (mínimos locais)	82
3.5.3	Identificação de regiões-padrão e separação entre ressonância de referên-	
	cia e deteccção	83
3.5.4	Pareamento de regiões entre dois analitos ou condições	83
3.5.5	Escolha da ressonância de referência e extração da ressonância de deteccção	84
3.5.6	Cálculo da Sensibilidade	85
3.5.7	Cálculo da estabilidade térmica	86
4	RESULTADOS E DISCUSSÕES	91
4.1	Resultados de sensibilidade ao índice de refração	92
4.1.1	Efeito do tamanho da área de deteccção na sensibilidade	92
4.1.2	Efeito do estrangulamento na sensibilidade	97
4.1.3	Resumo comparativo e implicações para projeto	101
4.2	Resultados de resposta térmica e robustez do sensor	103
4.2.1	Deslocamento diferencial e estabilidade térmica (TS):	103
4.2.2	Coefficiente térmico residual: RTC	104
4.3	Correlação entre S, TS e RTC	106
4.4	Validação do modelo térmico estendido	107
4.4.1	Modelagem empírica do termo residual $RTC(\lambda)$	108
4.4.2	Reconstrução de $TS(\lambda)$ a partir de $S(\lambda)$ e $RTC(\lambda)$	108

4.4.3	Análise dos resultados	109
4.5	Caso particular: Analito Água	110
5	CONCLUSÃO	113
	Conclusão	113
	REFERÊNCIAS	115

Capítulo 1

Introdução

O avanço da fotônica integrada nas últimas décadas tem impulsionado o desenvolvimento de dispositivos ópticos cada vez mais compactos, eficientes e compatíveis com processos industriais consolidados, como as plataformas Complementary Metal-Oxide Semiconductor (CMOS) (WANLASS, 1967; BAKER, 2007). Essa convergência entre microeletrônica e fotônica acompanha, em sentido amplo, a trajetória histórica de miniaturização e integração consolidada pela microeletrônica desde os trabalhos de Moore (MOORE, 2006).

Nesse contexto, sensores ópticos integrados têm se destacado como soluções estratégicas para aplicações biomédicas, ambientais e industriais, especialmente em cenários que demandam alta sensibilidade, resposta em tempo real e integração em plataformas do tipo Lab-on-a-Chip (LOC) (GURKAN et al., 2024). A capacidade de detectar pequenas variações no índice de refração (RI) torna esses dispositivos particularmente atrativos para biossensoriamento, monitoramento químico e análise de fluidos complexos (DELI et al., 2024; FIBBEN et al., 2025).

Entre as diversas arquiteturas propostas na literatura, destacam-se aquelas baseadas em microcavidades ressonantes (SCHWELB, 2008), nas quais a luz é confinada em estruturas dielétricas de dimensões micrométricas. Pequenas perturbações no meio externo que envolve a cavidade resultam em deslocamentos mensuráveis do comprimento de onda ressonante, permitindo a detecção de variações físicas ou químicas com elevada resolução espectral. Entretanto, apesar do alto desempenho em sensibilidade, esses dispositivos apresentam desafios associados à estabilidade térmica. Isso ocorre porque variações de temperatura influenciam simultaneamente o RI dos materiais estruturais e as dimensões geométricas da cavidade, produzindo deslocamentos espectrais que podem mascarar a resposta ao analito.

Dessa forma, compreender os mecanismos físicos que governam a operação desses sensores e identificar estratégias capazes de mitigar sua dependência térmica tornam-se aspectos centrais no projeto de arquiteturas ressonantes robustas para uso em sensores. Este capítulo apresenta, inicialmente, um panorama dos sensores ópticos baseados em microcavidades (Seção 1.1), discute a dependência térmica intrínseca desses dispositivos (Seção 1.2) e introduz arquiteturas diferenciais baseadas em moléculas fotônicas (PMs), incluindo uma breve descrição da medida diferencial e o papel da área de detecção (Seção 1.3). Em seguida, explicitam-se a lacuna científica e a motivação do trabalho (Seção 1.4), definem-se os objetivos (Seção 1.5) e discutem-se a relevância, o impacto e a organização da dissertação (Seções 1.6, 1.7).

1.1 Sensores Ópticos Integrados Baseados em Microcavidades Ressonantes

Em plataformas fotônicas consolidadas, como silício-sobre-isolante (SOI) e nitreto de silício-sobre-isolante (SiNOI), microcavidades ressonantes têm sido amplamente investigadas devido à sua elevada sensibilidade e alta compactidade, além da compatibilidade com processos de fabricação reprodutíveis e integração monolítica a circuitos ópticos mais complexos (LIANG; BOWERS, 2010; KONINCK; ROELKENS; BAETS, 2015; VLAISOV, 2008).

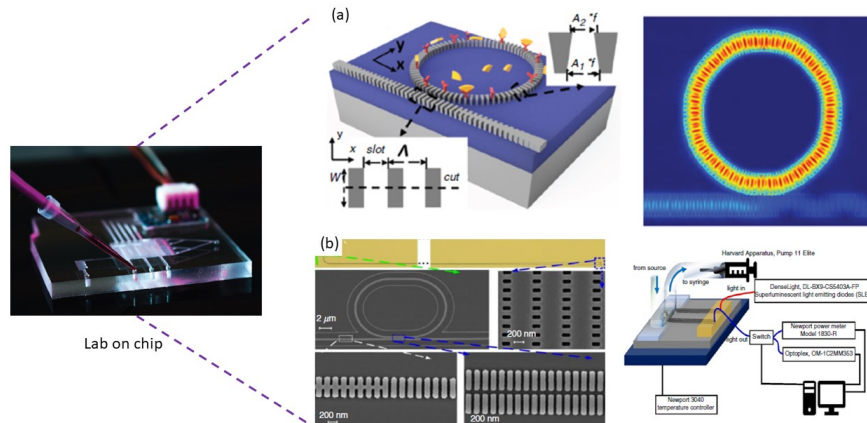
Estruturas como microrressonadores anelares (MRR) e microdiscos suportam modos do tipo Whispering Gallery Mode (WGM), nos quais a luz permanece confinada ao longo da periferia da cavidade por reflexão interna total. A condição de ressonância é satisfeita quando o comprimento óptico da cavidade corresponde a um múltiplo inteiro do comprimento de onda propagante, resultando em picos discretos no espectro de transmissão.

Pequenas variações no RI do meio que envolve a cavidade alteram o índice efetivo do modo guiado e, conseqüentemente, deslocam a posição espectral dessas ressonâncias. Esse princípio constitui a base dos sensores ópticos de índice de refração (RIS), cuja sensibilidade é usualmente expressa em nm/RIU, indicando o deslocamento, em nanômetros, do comprimento de onda ressonante por unidade de variação do índice de refração (Refractive Index Unit, RIU) do analito.

Diversos trabalhos demonstram a eficiência dessas arquiteturas no monitoramento de interações biomoleculares, detecção de substâncias químicas e quantificação de concentrações em solução (LUAN et al., 2018; ZHANG et al., 2018), como apresentado na Figura 1. Estratégias geométricas como a introdução de regiões do tipo slot (Figura 1(a)) ou a utilização de configurações racetrack (Figura 1(b)) ampliam a interação do campo evanescente com o meio externo, aumentando a fração modal exposta ao analito e, conseqüentemente, a sensibilidade do dispositivo ((ASGHARI et al., 2021; BAEHR-JONES et

al., 2005)). A sensibilidade desses dispositivos depende, portanto, da extensão do campo evanescente que se estende para fora do núcleo do guia de onda. Esse comportamento estabelece um compromisso intrínseco entre confinamento modal e sensibilidade: maior exposição do campo ao meio externo intensifica a interação com o analito, porém pode reduzir o fator de qualidade (Q) da cavidade e aumentar perdas ópticas.

Figura 1 – Biossensores fotônicos integrados em plataforma Lab-on-a-Chip.



(a) Esquemático ilustrativo de um biossensor de baixa perda de acoplamento e seu confinamento simulado para o modo TE em 1550 nm; (b) imagem de microscopia de um biossensor que explora uma geometria do tipo *racetrack* com *slots*, e diagrama de operação. Fonte: Adaptado de (ASGHARI et al., 2021).

Parâmetros como o Free Spectral Range (FSR) e o fator de qualidade Q desempenham papel central na resolução espectral e na capacidade do sensor de distinguir pequenas variações do RI. Além da sensibilidade, outra métrica relevante é a Faixa de variação máxima detectável (MDVR), definida como o intervalo operacional no qual o deslocamento da ressonância ocorre de forma monotônica e não ambígua. Em microcavidades, a MDVR está diretamente relacionada ao FSR e à separação adequada entre ressonâncias consecutivas, sendo fundamental para garantir ampla faixa de detecção sem comprometer a confiabilidade da leitura. Assim, o desempenho global do dispositivo depende do projeto geométrico da cavidade e do controle do confinamento modal, que influenciam simultaneamente sensibilidade, resolução espectral e faixa dinâmica de operação.

Apesar do elevado potencial, sensores baseados em microcavidades ressonantes apresentam uma limitação importante: sua resposta espectral é fortemente influenciada por variações térmicas. O RI dos materiais dielétricos varia com a temperatura (efeito termo-óptico), enquanto a dilatação estrutural altera o comprimento óptico da cavidade. Como consequência, deslocamentos induzidos por temperatura podem se sobrepor àqueles provocados pelo analito, comprometendo a confiabilidade da medição. Essa limitação constitui um dos principais desafios no projeto de sensores ópticos baseados em microca-

vidades ressonantes (SADAGOPAN et al., 2005) e será discutida na seção seguinte.

1.2 Dependência Térmica em Sensores Ressonantes

A posição espectral das ressonâncias em microcavidades ópticas depende do índice de refração efetivo do modo guiado e do comprimento óptico da cavidade. Assim, qualquer variação de temperatura capaz de modificar esses parâmetros resulta em um deslocamento do comprimento de onda ressonante.

A resposta térmica desses dispositivos decorre essencialmente de dois mecanismos físicos. O primeiro é o efeito termo-óptico, associado à variação do índice de refração dos materiais com a temperatura. O segundo é a dilatação térmica, que altera as dimensões físicas da cavidade e, conseqüentemente, seu comprimento óptico. A combinação desses efeitos produz um deslocamento espectral proporcional à variação de temperatura.

Em plataformas fotônicas integradas, o coeficiente termo-óptico dos materiais dielétricos apresenta ordem de grandeza típica entre 10^{-4} e 10^{-5} $^{\circ}\text{C}^{-1}$, enquanto o coeficiente de expansão térmica linear situa-se em torno de 10^{-6} $^{\circ}\text{C}^{-1}$. Como consequência, a contribuição termo-óptica tende a dominar a resposta térmica global do dispositivo (PADMARAJU; BERGMAN, 2014), embora a dilatação estrutural também contribua para o fenômeno.

É importante destacar que o coeficiente termo-óptico efetivo do modo guiado não depende apenas do material do núcleo do guia de onda, mas também da distribuição espacial do campo óptico. Em RIS, parte significativa do campo evanescente se estende para o meio externo. Nessas condições, a variação térmica do analito também contribui para a resposta global do dispositivo. Assim, a magnitude do deslocamento térmico está diretamente relacionada à fração modal exposta ao ambiente externo.

Por outro lado, o princípio de operação desses sensores baseia-se no deslocamento espectral induzido pela variação do índice de refração do analito. Idealmente, esse deslocamento deveria refletir exclusivamente alterações no meio analisado. Entretanto, quando variações térmicas e variações de índice ocorrem simultaneamente, seus efeitos se somam no espectro medido experimentalmente. Esse fenômeno é conhecido como sensibilidade térmica cruzada e pode comprometer a confiabilidade da medição, especialmente quando as variações de índice do analito são pequenas.

A literatura apresenta duas abordagens principais para mitigar esse problema (PADMARAJU; BERGMAN, 2014). A primeira consiste em técnicas ativas de estabilização térmica, baseadas na integração de aquecedores e sistemas de controle eletrônico. A segunda envolve estratégias passivas, como a seleção de materiais com menor coeficiente termo-óptico e o emprego de arquiteturas diferenciais capazes de compensar deslocamentos comuns às estruturas ressonantes.

Entretanto, mesmo com materiais de menor sensibilidade térmica, como o nitreto de silício, a resposta residual permanece dependente da distribuição modal e da geometria

da cavidade. Dessa forma, a estabilidade térmica não deve ser interpretada apenas como propriedade intrínseca do material, mas como resultado da interação entre propriedades físicas e o projeto estrutural do dispositivo. Essa constatação motiva a investigação de arquiteturas diferenciais baseadas no acoplamento entre cavidades ressonantes, discutidas na seção seguinte.

1.3 Arquiteturas Diferenciais Baseadas em Moléculas Fotônicas

Entre as estratégias passivas para mitigação térmica discutidas na seção anterior, destacam-se as arquiteturas diferenciais baseadas no acoplamento entre microcavidades ressonantes. Em sua forma mais comum, essas configurações empregam duas cavidades: uma cavidade sensorial, exposta ao analito, e uma de referência, protegida ou isolada do meio externo. A leitura diferencial entre as ressonâncias busca suprimir deslocamentos espectrais comuns às duas estruturas, como aqueles induzidos por variações térmicas globais.

Conceitualmente, o deslocamento espectral observado em cada cavidade pode ser decomposto, em primeira ordem, em uma contribuição associada à variação do RI do analito (grandeza de interesse) e outra associada à variação de temperatura. Na cavidade sensorial, ambas as contribuições estão presentes; na cavidade de referência, idealmente, apenas a contribuição térmica permanece. A diferença entre as posições espectrais das duas ressonâncias define a medida diferencial, cujo objetivo é cancelar o termo térmico comum às cavidades, decorrente de variações globais de temperatura.

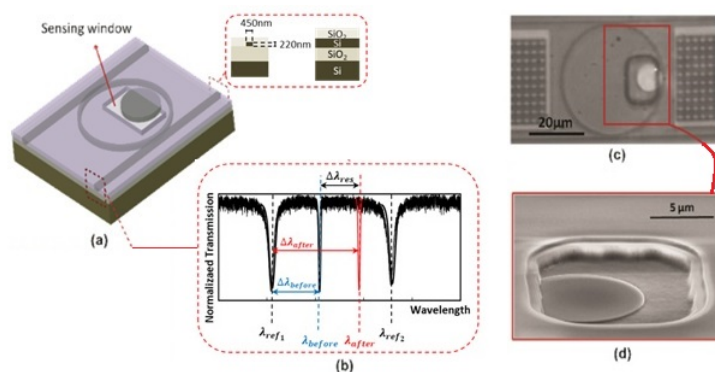
Entretanto, essa compensação não é automaticamente garantida. A eficiência do cancelamento térmico depende da proximidade entre os coeficientes térmicos efetivos das duas cavidades. Em plataformas fotônicas integradas, a variação espectral induzida pela temperatura resulta, em geral, da combinação entre mudanças do índice efetivo (associadas ao efeito termo-óptico do modo guiado) e variações geométricas (associadas à expansão térmica da estrutura). Na prática, o termo associado à variação do índice efetivo tende a dominar a resposta térmica; por isso, pequenas diferenças no confinamento modal entre as cavidades — que alteram a fração de campo em cada material e, conseqüentemente, o coeficiente termo-óptico efetivo — podem resultar em um resíduo térmico não desprezível, mesmo quando as dimensões geométricas são semelhantes.

Quando a cavidade sensorial apresenta maior interação do campo evanescente com o analito, o coeficiente termo-óptico efetivo passa a incorporar a contribuição térmica do analito, que pode diferir significativamente daquela associada à cavidade de referência. Assim, embora a arquitetura diferencial reduza o *drift* térmico global, diferenças na participação modal do analito podem comprometer a completa anulação da resposta térmica.

Esse aspecto, embora fundamental, é pouco explorado de forma sistemática na literatura. A maioria dos trabalhos assume que a simples presença de duas cavidades garante compensação eficiente, sem analisar quantitativamente como parâmetros geométricos influenciam a equivalência térmica modal entre elas.

Nesse contexto, destaca-se a arquitetura baseada em PMs, conforme proposto por Moras et al. (2020, 2020, 2022), conforme ilustrado na Figura 2. Nessa arquitetura, duas cavidades ressonantes são acopladas de forma concêntrica: uma cavidade externa atua predominantemente como referência, enquanto a cavidade interna contém uma determinada área de detecção, responsável pela interação com o analito. Essa configuração permite limitar espacialmente a região exposta, reduzindo a participação do analito na resposta térmica global do dispositivo. A Figura 2(a) apresenta o esquema do sensor implementado em plataforma SOI, evidenciando a área de detecção em apenas uma parcela da cavidade interna. A Figura 2(b) mostra o espectro de transmissão característico da PM, no qual se observam as ressonâncias associadas às duas cavidades acopladas. As Figuras 2(c) e 2(d) apresentam, respectivamente, a microscopia óptica do dispositivo fabricado e a microscopia eletrônica de varredura da região sensorial.

Figura 2 – Molécula fotônica aplicada em sensoriamento óptico



(a) Visão esquemática do sensor baseado em PM. (b) Espectro de transmissão evidenciando o deslocamento da ressonância sensorial devido à variação do índice de refração. (c) Microscopia óptica do dispositivo fabricado. (d) Microscopia eletrônica de varredura da região de detecção com o recobrimento removido. Fonte: Adaptado de (MORAS et al., 2022)

Na leitura diferencial, define-se o espaçamento espectral entre a ressonância sensorial e de referência. Ao monitorar a variação desse espaçamento antes e após a variação do RI do analito, elimina-se a contribuição comum associada à cavidade de referência, de modo que o deslocamento diferencial represente predominantemente a resposta da cavidade sensorial.

Idealmente, como ambas as cavidades compartilham o mesmo substrato e estão sujeitas às mesmas flutuações térmicas globais, uma parcela significativa do deslocamento

induzido por temperatura é compensada. Contudo, a equivalência térmica entre as cavidades depende da similaridade na distribuição modal e na fração do campo exposta ao meio externo. Por esse motivo, o controle geométrico da área de detecção torna-se um elemento central no projeto do dispositivo.

A introdução de uma área de detecção parcialmente exposta constitui uma estratégia para reduzir a contribuição termo-óptica do analito, favorecendo maior equivalência térmica entre as cavidades. Entretanto, essa abordagem impõe um compromisso importante: ao reduzir a área exposta no anel de detecção, diminui-se também a fração de campo evanescente interagindo com o analito, o que pode resultar em redução da sensibilidade espectral.

Essa interdependência entre sensibilidade e estabilidade térmica evidencia que a eficácia de arquiteturas diferenciais baseadas em PM não depende apenas do acoplamento entre cavidades, mas do projeto geométrico detalhado do dispositivo. A determinação de um equilíbrio adequado entre extensão da área de detecção e desempenho térmico configura, portanto, um problema de otimização estrutural que fundamenta a lacuna científica discutida na seção seguinte.

1.4 Lacuna Científica e Motivação do Trabalho

A análise desenvolvida na seção anterior evidencia que o desempenho de sensores diferenciais baseados em PM resulta da combinação de dois efeitos principais: a resposta espectral à variação do RI do analito e a resposta térmica associada às propriedades efetivas das cavidades. A robustez térmica do dispositivo depende, portanto, da proximidade entre os coeficientes térmicos efetivos das cavidades sensorial e de referência. Idealmente, esses coeficientes deveriam ser equivalentes, de modo a minimizar o termo térmico residual na leitura diferencial.

Entretanto, como discutido anteriormente, o coeficiente termo-óptico efetivo da cavidade sensorial incorpora a contribuição do analito na região exposta. Essa participação modal pode torná-lo significativamente distinto do coeficiente associado à cavidade de referência, comprometendo a compensação térmica ideal.

Embora arquiteturas diferenciais baseadas em duas cavidades sejam amplamente exploradas na literatura, a maioria dos trabalhos concentra-se na demonstração experimental da redução do drift térmico, sem uma investigação sistemática como parâmetros geométricos específicos influenciam a equivalência térmica modal entre as cavidades. Em particular, são escassos estudos que analisam quantitativamente o impacto da área de detecção, da largura do guia de onda ou do grau de confinamento modal sobre a diferença entre os coeficientes termo-ópticos efetivos.

No caso da PM proposta por Moras et al. (2020), a introdução de uma área de detecção parcial representa uma estratégia para limitar a participação do analito na

resposta térmica diferencial. Contudo, a redução da área exposta afeta simultaneamente a fração de campo evanescente que interage com o meio externo, impactando diretamente a sensibilidade espectral do sensor. Dessa forma, a minimização do resíduo térmico pode ocorrer à custa da redução da resposta ao RI.

Esse cenário configura um problema clássico de compromisso entre duas métricas de desempenho potencialmente conflitantes: estabilidade térmica e sensibilidade espectral. Apesar da relevância prática desse equilíbrio, não se observa, na literatura, uma investigação sistemática que estabeleça critérios objetivos para a otimização geométrica da área de detecção em moléculas fotônicas diferenciais, considerando simultaneamente a mitigação térmica e a preservação da sensibilidade.

Além disso, a compensação térmica é frequentemente tratada como consequência intrínseca da arquitetura diferencial, sem que se explore, de forma aprofundada, o papel do projeto geométrico na modulação do coeficiente termo-óptico efetivo do modo guiado. Essa lacuna limita o estabelecimento de diretrizes estruturais claras e generalizáveis para o dimensionamento de sensores diferenciais mais robustos.

Diante desse contexto, torna-se necessária uma análise sistemática detalhada da influência de parâmetros geométricos na resposta térmica diferencial e na sensibilidade espectral de sensores baseados em PM. A compreensão quantitativa dessa interdependência constitui a principal motivação deste trabalho, que busca identificar configurações estruturais capazes de maximizar a robustez térmica sem introduzir penalidades desproporcionais no desempenho sensorial.

1.5 Objetivos do Trabalho

Considerando a problemática associada à compensação térmica residual em sensores diferenciais baseados em PM, esta dissertação tem como objetivo investigar, de forma sistemática, a influência de modificações geométricas na resposta espectral e térmica do dispositivo, buscando estabelecer um equilíbrio entre sensibilidade ao RI e robustez frente às variações de temperatura.

Neste trabalho, a abordagem de otimização concentra-se exclusivamente em parâmetros geométricos compatíveis com processos de fabricação em *foundry*, ou seja, variáveis estruturais controláveis no projeto do *layout* fotônico e implementáveis em plataformas CMOS padrão. Entre esses parâmetros destacam-se a largura do guia de onda que compõe os anéis ressonantes, a extensão angular da área de detecção e modificações locais de seção transversal, como estrangulamentos nos guias de onda, todos realizáveis dentro das regras de projeto típicas de fabricação fotônica integrada.

1.5.1 Objetivo Geral

Avaliar e otimizar geometricamente um sensor óptico diferencial baseado em PM de duas cavidades acopladas, investigando a influência da largura dos guias de onda, da extensão da área de detecção e das modificações estruturais locais sobre a sensibilidade espectral e a estabilidade térmica do dispositivo, considerando parâmetros compatíveis com processos de fabricação em *foundry*.

1.5.2 Objetivos Específicos

Para atingir o objetivo proposto, estabelecem-se os seguintes objetivos específicos:

1. Avaliar sistematicamente o efeito da variação da extensão angular da área de detecção sobre a sensibilidade ao RI, identificando tendências e possíveis regimes de operação;
2. Investigar o impacto de modificações locais de seção transversal (estrangulamentos) na cavidade sensorial sobre o confinamento modal e o deslocamento diferencial das ressonâncias, comparando configurações com e sem modificações estruturais;
3. Quantificar, de forma comparativa, a evolução simultânea da sensibilidade espectral e do resíduo térmico diferencial em função das variações geométricas consideradas;
4. Determinar configurações geométricas que apresentem melhor compromisso entre sensibilidade, estabilidade térmica e MDVR, considerando restrições compatíveis com processos de fabricação fotônica padronizados.

Dessa forma, o trabalho busca estabelecer diretrizes de projeto aplicáveis a dispositivos fabricados em plataformas fotônicas comerciais, demonstrando que a robustez térmica pode ser significativamente aprimorada por meio de ajustes geométricos compatíveis com processos industriais consolidados.

1.6 Impactos e Inserção Tecnológica da Pesquisa

A crescente demanda por sensores ópticos compactos, sensíveis e energeticamente eficientes torna a fotônica integrada uma tecnologia estratégica para aplicações científicas e industriais. O desenvolvimento de sensores diferenciais com mitigação térmica passiva contribui para o desenvolvimento de sistemas de detecção mais robustos, confiáveis e de menor consumo energético.

A otimização geométrica proposta reduz a dependência de mecanismos ativos de estabilização térmica, simplifica a arquitetura do dispositivo e favorece sua implementação em sistemas portáteis e distribuídos.

Os impactos dessa pesquisa podem ser analisados sob três perspectivas complementares: sua contribuição para aplicações tecnológicas, seu alinhamento com princípios de desenvolvimento sustentável — em particular com os Objetivos de Desenvolvimento Sustentável (ODS) da ONU — e sua inserção estratégica no contexto nacional.

1.6.1 Impacto para a Sociedade e Aplicações Tecnológicas

Sensores de RI com aplicações em biossensoriamento, diagnóstico médico, monitoramento ambiental e controle de processos industriais se beneficiam de maior estabilidade térmica, especialmente em cenários que envolvem medições repetidas ou de longo prazo. Embora medições pontuais possam apresentar baixa influência térmica, variações de temperatura entre diferentes experimentos introduzem desvios sistemáticos que comprometem a reprodutibilidade e a comparabilidade dos resultados.

Nesse contexto, a redução da sensibilidade cruzada térmica contribui para maior confiabilidade das medições, ao mesmo tempo em que reduz a necessidade de calibrações frequentes e manutenção dos sistemas, simplificando a operação e reduzindo custos. Adicionalmente, sensores mais robustos termicamente apresentam melhor desempenho em condições reais de operação, nas quais variações ambientais, gradientes térmicos locais e limitações de controle são inevitáveis.

A robustez térmica também se torna relevante em arquiteturas com múltiplos sensores, como em sistemas multiplexados ou redes de sensoriamento, nos quais variações térmicas distintas entre dispositivos podem dificultar a interpretação dos sinais. Nesse sentido, a mitigação de efeitos térmicos contribui para maior uniformidade e confiabilidade em sistemas com múltiplos canais.

Além disso, a menor dependência térmica reduz o tempo necessário para a estabilização do sistema antes das medições, permitindo a realização de aquisições mais rápidas e maior eficiência operacional. Em plataformas de fotônica integrada, essa característica também favorece a miniaturização e a co-integração com componentes eletrônicos, reduzindo interferências térmicas internas e viabilizando dispositivos mais compactos e densamente integrados (MILLER, 2000).

Por fim, a adoção de estratégias passivas de mitigação térmica contribui para a redução do consumo energético global do sistema, ao diminuir ou eliminar a necessidade de mecanismos ativos de controle térmico, como aquecedores ou sistemas de resfriamento.

Adicionalmente, a engenharia espectral associada à PM apresenta potencial para aplicações em telecomunicações ópticas, processamento de sinais e desenvolvimento de circuitos fotônicos integrados mais complexos (SADAGOPAN et al., 2004; ALDUINO; PANICCIA, 2007), contribuindo para a evolução de tecnologias de comunicação e sensoriamento.

1.6.2 Desenvolvimento Sustentável e Alinhamento com os ODS

A proposta desta pesquisa apresenta alinhamento com os ODS estabelecidos pela ONU, especialmente no que se refere à eficiência energética, confiabilidade de sistemas tecnológicos e viabilização de aplicações em ambientes não controlados.

Diferentemente de abordagens baseadas em controle térmico ativo, a estratégia de mitigação térmica passiva adotada neste trabalho atua diretamente na redução do consumo energético do sistema e na simplificação da arquitetura dos dispositivos, aspectos centrais para o desenvolvimento de tecnologias mais sustentáveis.

Nesse contexto, destacam-se os seguintes ODS:

- ❑ **ODS 3 – Saúde e Bem-Estar:** sensores mais estáveis e confiáveis aumentam a qualidade e a repetibilidade de medições em aplicações de biossensoriamento e diagnóstico, contribuindo para maior precisão na detecção e monitoramento de condições biológicas.
- ❑ **ODS 9 – Indústria, Inovação e Infraestrutura:** o desenvolvimento de dispositivos fotônicos integrados com menor dependência de controle ativo favorece soluções mais robustas, escaláveis e compatíveis com processos industriais, contribuindo para a consolidação de tecnologias avançadas em sensoriamento e comunicações ópticas.
- ❑ **ODS 12 – Consumo e Produção Responsáveis:** a redução da necessidade de sistemas ativos de estabilização térmica implica menor consumo energético, bem como menor complexidade de fabricação e operação, além de potencial redução no uso de materiais e componentes auxiliares.
- ❑ **ODS 13 – Ação contra a Mudança Global do Clima:** ao diminuir a demanda energética associada à operação de sensores e sistemas fotônicos, a abordagem proposta contribui indiretamente para a redução de emissões associadas ao consumo de energia, especialmente em aplicações em larga escala ou distribuídas.

Adicionalmente, a utilização de plataformas compatíveis com processos industriais consolidados favorece a produção em escala, reduz custos e amplia a viabilidade tecnológica, contribuindo para soluções mais acessíveis e energeticamente eficientes ao longo de todo o ciclo de vida dos dispositivos.

1.6.3 Inserção Tecnológica e Contexto Nacional

No contexto nacional, a pesquisa se insere no âmbito das Engenharias IV, contribuindo para o fortalecimento de competências nacionais em fotônica integrada, uma área estratégica e ainda em consolidação no Brasil. A formação de recursos humanos altamente

qualificados, com experiência em modelagem, simulação e projeto de dispositivos fotônicos, constitui um fator essencial para a ampliação da capacidade nacional em desenvolver tecnologias próprias nesse domínio.

Além da capacitação técnica, o desenvolvimento de dispositivos baseados em plataformas compatíveis com processos industriais consolidados aproxima a pesquisa acadêmica de possíveis aplicações práticas, reduzindo barreiras para transferência tecnológica. Essa compatibilidade favorece a integração com fluxos de fabricação já estabelecidos em foundries internacionais, ao mesmo tempo em que contribui para a preparação do ecossistema nacional para futuras iniciativas de fabricação e integração fotônica.

A proposta também se alinha com a crescente demanda por soluções em sensoriamento óptico, comunicações e instrumentação avançada, áreas de interesse estratégico para setores como telecomunicações, energia, defesa e monitoramento ambiental. Nesse contexto, a robustez térmica dos dispositivos torna-se particularmente relevante no cenário brasileiro, caracterizado por ampla extensão territorial e significativa variação de temperatura entre diferentes regiões e ao longo do ano. Sensores menos sensíveis a variações térmicas apresentam maior confiabilidade e uniformidade de operação em diferentes condições climáticas, reduzindo a necessidade de recalibração e favorecendo sua aplicação em sistemas distribuídos ao longo do território nacional.

Nesse sentido, o domínio dessas tecnologias contribui para a redução da dependência externa e para o aumento da autonomia tecnológica do país. Adicionalmente, a simplificação da arquitetura dos dispositivos, proporcionada pela mitigação térmica passiva, favorece a viabilidade de implementação em aplicações reais, ampliando o potencial de inovação e transferência de conhecimento entre universidades, centros de pesquisa e a indústria.

Dessa forma, a pesquisa não apenas contribui para o avanço científico, mas também para a consolidação de um ambiente tecnológico mais robusto, capaz de sustentar o desenvolvimento de soluções inovadoras no cenário brasileiro.

1.7 Organização da Dissertação

Esta dissertação está estruturada de modo a conduzir o leitor desde os fundamentos teóricos até a análise dos resultados da otimização geométrica proposta.

O Capítulo 2 apresenta a base teórica dos sensores ópticos baseados em microcavidades ressonantes, abordando a propagação em guias dielétricos, o confinamento modal, o fator de qualidade Q , o FSR, a sensibilidade espectral e a MDVR, além dos fundamentos da PM e acoplamento entre cavidades.

O Capítulo 3 descreve a metodologia adotada, incluindo a definição do modelo estrutural do dispositivo, os parâmetros geométricos investigados, as ferramentas de simulação eletromagnética e os procedimentos de extração das métricas de desempenho.

O Capítulo 4 apresenta e discute os resultados obtidos, analisando o impacto das variações geométricas sobre a sensibilidade espectral e a resposta térmica diferencial, evidenciando os compromissos entre o desempenho sensorial (por meio da MDVR) e a robustez térmica.

Por fim, o Capítulo 5 sintetiza as conclusões e apresenta perspectivas para pesquisas futuras em sensores ópticos diferenciais baseados em PM.

Capítulo 2

Fundamentos teóricos

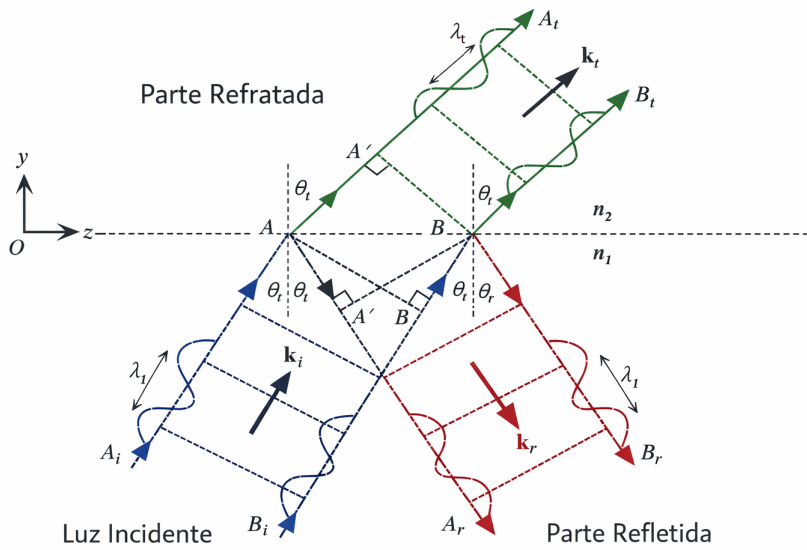
Os sensores ópticos estudados neste trabalho são formados por duas estruturas principais: guias de onda dielétricos e microcavidades ressonantes. Os guias de onda conduzem a luz ao longo do chip fotônico, enquanto as microcavidades permitem que essa luz circule repetidamente sob condição de ressonância. Quando o guia de onda é posicionado muito próximo à cavidade, ocorre transferência de energia entre eles devido à sobreposição de seus campos evanescentes. Esse fenômeno, conhecido como acoplamento evanescente, permite que a luz do guia excite os modos ressonantes da cavidade. Se duas cavidades também forem posicionadas próximas entre si, seus modos podem interagir, formando uma PM (BAREA et al., 2013b). Essa configuração, quando aplicada como sensores, possibilita a realização de medidas diferenciais, reduzindo a influência de variações térmicas. Neste capítulo são apresentados os fundamentos físicos da propagação em guias, da formação das ressonâncias e da interação entre cavidades que fundamentam o funcionamento dos sensores baseados em PM, estabelecendo a base teórica para a compreensão deste trabalho e de seus resultados.

2.1 Guia de onda óptico

Para entender o funcionamento de um guia de onda óptico é necessário compreender algumas características fundamentais da luz. Estudando a luz e entendendo sua dualidade como onda e partícula, pudemos analisar sua interação com a matéria e observar eventos que causam absorção e difração da luz. Focando nos fenômenos de Reflexão e Refração obtemos o comportamento mostrado na Figura 3.

Quando a luz passa de um meio para outro com índice de refração diferente, ela pode sofrer dois fenômenos principais: refração e reflexão. A refração ocorre quando

Figura 3 – Refração e Reflexão da luz



Demonstração gráfica do efeito de refração e reflexão da luz entre dois meios. Fonte: Autor

a luz muda de direção ao atravessar a interface entre os meios, devido à variação da velocidade da luz nesse novo ambiente, seguindo a Lei de Snell. Se o novo meio tiver um índice de refração maior, a luz se aproxima da normal; se for menor, ela se afasta. Já a reflexão acontece quando parte da luz não atravessa a interface e retorna ao meio original, obedecendo à Lei da Reflexão, onde o ângulo de incidência é igual ao ângulo de reflexão.

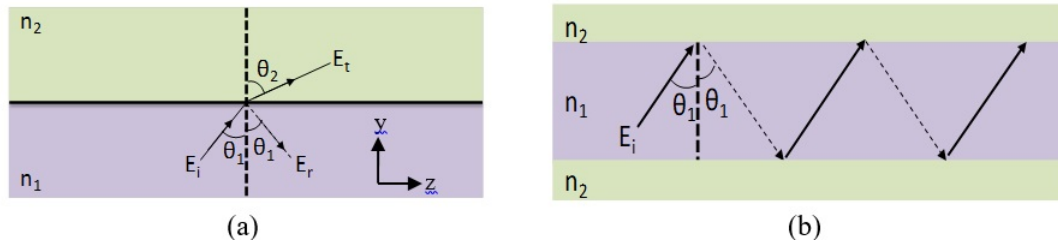
Com base nestes fenômenos e a partir da Lei de Snell que os relaciona matematicamente, encontramos uma situação ideal onde a parte refratada da luz é nula. Podemos observar esse comportamento resolvendo a equação da segunda lei da refração de Snell (Equação 1) fazendo $\phi = \pi/2$ (Ângulo da parte refratada). Um guia de onda nada mais é que um dispositivo que utiliza destas características para propagar uma onda em seu interior, colocando-se 3 camadas de materiais diferentes (com índices de refração diferentes), buscando confinar a luz no material central.

Analisamos um modelo simples de um guia de ondas planar por meio de geometria óptica simples, mostrado na Figura 4(a). Nesta figura temos que um raio de luz (E_i) incide e se propaga por um material com índice de refração n_1 , alcançando um outro material de índice de refração n_2 e ângulo θ_1 , onde é parcialmente transmitida para o segundo material (E_t) com ângulo θ_2 e parcialmente refletida (E_r).

É conhecido que as relações entre os índices de refração e os ângulos associados é descrita pela Lei de Snell:

$$n_1 \sin \theta_1 = n_2 \sin \theta_2 \quad (1)$$

Figura 4 – Guia de onda e reflexão interna total



(a) Raio de luz refratada e refletida na interface dos dois meios. (b) Reflexão total interna nas interfaces, demonstrando o conceito de guia de onda. Fonte: adaptado de (BAREA, 2010)

Onde podemos notar que:

$$\sin\theta_2 = (n_1/n_2)\sin\theta_1 \quad (2)$$

E também:

$$\cos\theta_2 = \sqrt{1 - (n_1^2/n_2^2)\sin^2\theta_1} \quad (3)$$

Supondo que na Figura 4(a) temos uma combinação de materiais onde o índice de refração $n_1 > n_2$ observa-se que (pela Equação 1) o ângulo $\theta_2 > \theta_1$, e, evidentemente, se aumentarmos o ângulo θ_1 temos que o ângulo θ_2 se aproxima de 90° onde podemos simplificar a equação por:

$$n_1 \sin\theta_1 = n_2 \quad (4)$$

E, portanto:

$$\sin\theta_c = \frac{n_2}{n_1} \quad (5)$$

Onde θ_c é definido como ângulo crítico, isto é, o valor de θ_1 para o qual $\theta_2 = 90^\circ$. Assim, para ângulos de incidência maiores que o ângulo crítico ($\theta_1 > \theta_c$), nenhuma luz é transmitida para o segundo meio, ocorrendo o fenômeno de reflexão total interna. A Figura 4(b) exemplifica o funcionamento de um guia de onda que utiliza esta propriedade, empregando um material central (núcleo) com RI maior que os materiais de revestimento, favorecendo a reflexão total interna da luz e permitindo sua condução ao longo da estrutura.

Considerando a reflexão e a refração da onda na interface da Figura 4, sabe-se que as ondas podem ser descritas pelas equações de Fresnel. A onda refletida terá uma amplitude complexa E_r na interface e estará relacionada com a amplitude complexa E_i da onda incidente pela equação:

$$E_r = \gamma E_i \quad (6)$$

Nessa equação, γ é o coeficiente complexo da reflexão. Este coeficiente é uma função do ângulo de incidência e da polarização da luz. Considerando os casos em que o campo eletromagnético é perpendicular ao plano de incidência da onda encontramos a condição transversal elétrica (TE) definida para o campo elétrico perpendicular ao plano de incidência e a condição transversal magnética (TM) que ocorrerá quando o campo magnético for perpendicular ao plano de incidência. Dessa forma, os coeficientes de reflexão de Fresnel γ_{TE} , γ_{TM} serão dados por:

$$\gamma_{TE} = \frac{n_1 \cos \theta_1 - n_2 \cos \theta_2}{n_1 \cos \theta_1 + n_2 \cos \theta_2} \quad (7)$$

$$\gamma_{TM} = \frac{n_2 \cos \theta_1 - n_1 \cos \theta_2}{n_2 \cos \theta_1 + n_1 \cos \theta_2} \quad (8)$$

Utilizando a lei de Snell, estas equações ficam:

$$\gamma_{TE} = \frac{n_1 \cos \theta_1 - \sqrt{n_2^2 - n_1^2 \sin^2 \theta_1}}{n_1 \cos \theta_1 + \sqrt{n_2^2 - n_1^2 \sin^2 \theta_1}} \quad (9)$$

$$\gamma_{TM} = \frac{n_2^2 \cos \theta_1 - n_1 \sqrt{n_2^2 - n_1^2 \sin^2 \theta_1}}{n_2^2 \cos \theta_1 + n_1 \sqrt{n_2^2 - n_1^2 \sin^2 \theta_1}} \quad (10)$$

Destas equações observa-se que quando o ângulo de incidência é menor que o ângulo crítico, somente ocorrerá uma reflexão parcial e o coeficiente de reflexão será obrigatoriamente real. No entanto, quando o ângulo crítico é excedido, ocorrerá uma reflexão total interna e o coeficiente de reflexão se tornará complexo. Isto implicará numa mudança de fase sobre a onda refletida. Considerando o caso:

$$\gamma = |\gamma| e^{i\phi} \quad (11)$$

ϕ_{TE} e ϕ_{TM} serão dados por:

$$\phi_{TE} = 2 \tan^{-1} \frac{\sqrt{\sin^2 \theta_1 - \left(\frac{n_1}{n_2}\right)^2}}{\cos \theta_1} \quad (12)$$

$$\phi_{TM} = 2 \tan^{-1} \frac{\sqrt{\left(\frac{n_1}{n_2}\right)^2 \sin^2 \theta_1 - 1}}{\frac{n_1}{n_2} \cos \theta_1} \quad (13)$$

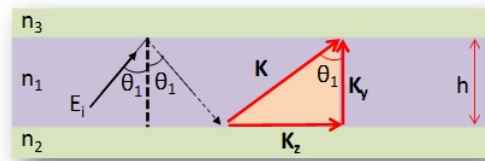
Como há interesse na potência que é refletida ou transmitida, é comum definir uma refletância R , que relaciona a potência incidente e refletida do seguinte modo:

$$R = \frac{E_r^2}{E_i^2} \quad (14)$$

Considerando que uma propagação ocorra na direção z e que a luz esteja confinada na direção y , pode-se considerar o caminho da propagação da luz como mostrado na Figura 4(b), com mais dados na Figura 5 na qual a onda se propaga através do guia com vetor de onda K ($=k_0n_1$). O diagrama no final do guia mostra a decomposição deste vetor de onda em duas componentes:

$$K_z = n_1k_0\sin\theta_1; K_y = n_1k_0\cos\theta_1 \quad (15)$$

Figura 5 – Componentes da reflexão interna total



Propagação da onda por reflexão total interna em um guia de onda de altura h . Fonte: adaptado de (BAREA, 2010)

A constante de propagação em z é chamada vetor de onda longitudinal do guia K_z e indica a taxa com que a onda se propaga na direção z (β). Dessa forma, pode-se interpretar uma onda propagando na direção z e outra em y , que reflete em cada interface do guia. A onda propagando em y é uma onda estacionária transversal ao guia de onda. Com este tratamento, é possível somar todas as mudanças de fase introduzidas em uma ida e volta completa através do guia com distância transversal $2h$, obtendo:

$$\phi_h = 2k_y h = 2k_0 n_1 h \cos\theta_1 \quad (16)$$

Estas mudanças de fase deverão ser introduzidas nos limites inferiores e superiores do guia de onda. Logo, podemos denominar estas mudanças de fase de ϕ_i e ϕ_s , respectivamente, e dessa forma, o deslocamento de fase total será dado por:

$$\phi_t = 2k_0 n_1 h \cos(\theta_1 - \phi_s - \phi_i) \quad (17)$$

Para preservar a onda no guia, devemos considerar este deslocamento de fase múltiplo de 2π . Assim:

$$2k_0 n_1 h \cos(\theta_1 - \phi_s - \phi_i) = 2m\pi \quad (18)$$

Analisando o guia de onda planar mostrado e observando os índices de refração, podemos concluir que podem ocorrer duas situações: se os índices de refração n_2 e n_3 forem iguais, este guia de onda será dito simétrico, enquanto se eles forem diferentes, este

guia de onda será assimétrico. Para o primeiro caso, as mesmas condições de contorno se aplicam nas duas interfaces, o que significa que $\phi_i = \phi_s$. Dessa forma, substituindo as equações 15 na 18, a equação dos modos para cada polarização fica:

$$TE : \tan\left[\frac{k_0 n_1 h \cos\theta_1}{2} - m\pi\right] = \frac{-\sqrt{n_1^2 \sin^2\theta_1 - n_2^2}}{n_1 \cos\theta_1} \quad (19)$$

$$TM : \tan\left[\frac{k_0 n_1 h \cos\theta_1}{2} - m\pi\right] = \frac{-n_1^2 \sqrt{n_1^2 \sin^2\theta_1 - n_2^2}}{n_2^2 n_1 \cos\theta_1} \quad (20)$$

A única variável nestas equações é θ_1 . Portanto, a solução desta equação dará o ângulo de propagação para um determinado modo \mathbf{m} . No estudo feito até o momento, foi utilizado $m=0$ nas equações, pois o termo na raiz quadrada será sempre positivo e real. Isso ocorre porque θ_1 será sempre maior que θ_c , e por isso, sempre será permitido um modo de menor ordem. Dessa forma, um guia simétrico sempre terá pelo menos um modo propagante e nunca estará interrompido.

O método geométrico fornece uma interpretação física intuitiva do mecanismo de confinamento e da condição de formação dos modos guiados. Entretanto, quando as dimensões do guia são da ordem do comprimento de onda, como ocorre em plataformas de fotônica integrada, a descrição rigorosa da propagação exige a formulação eletromagnética completa baseada nas equações de Maxwell.

As equações de Maxwell representam um dos resultados mais significativos do século XIX. Elas descrevem o comportamento dos campos elétrico e magnético e podem ser expressas na forma diferencial como:

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{D} &= \rho, & \nabla \cdot \mathbf{B} &= 0, \\ \nabla \times \mathbf{E} &= -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, & \nabla \times \mathbf{H} &= \mathbf{J} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} \end{aligned} \quad (21)$$

Nessas equações, \mathbf{E} e \mathbf{H} representam as amplitudes dos campos elétrico e magnético, respectivamente. Já \mathbf{D} e \mathbf{B} correspondem às densidades de fluxo elétrico e magnético, que se relacionam com os campos \mathbf{E} e \mathbf{H} por meio das relações constituintes:

$$\mathbf{B} = \mu \mathbf{H}, \quad \mathbf{D} = \varepsilon \mathbf{E} \quad (22)$$

onde μ é a permeabilidade magnética do meio e ε a permissividade elétrica. As unidades utilizadas seguem o sistema MKS (metro-quilograma-segundo).

No contexto de guias de ondas dielétricos, assumimos um meio sem cargas livres ($\rho = 0$) e sem correntes livres ($\mathbf{J} = 0$), linear (ε e μ independentes de \mathbf{E} e \mathbf{H}) e isotrópico, ou seja, com propriedades independentes da orientação espacial. Para a maioria dos dielétricos utilizados em fotônica integrada, como o nitreto de silício, a permeabilidade magnética μ pode ser considerada aproximadamente igual a μ_0 . Assim, as equações de Maxwell se simplificam para:

$$\begin{aligned}\nabla \cdot \mathbf{E} &= 0, & \nabla \cdot \mathbf{B} &= 0, \\ \nabla \times \mathbf{E} &= -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, & \nabla \times \mathbf{H} &= \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}\end{aligned}\quad (23)$$

Essas equações estão fortemente acopladas. Utilizando técnicas de cálculo vetorial para meios homogêneos, chegamos à equação de onda para os campos elétrico e magnético:

$$\nabla^2 \mathbf{E} - \mu\varepsilon \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} = 0, \quad \nabla^2 \mathbf{H} - \mu\varepsilon \frac{\partial^2 \mathbf{H}}{\partial t^2} = 0 \quad (24)$$

No caso de um guia de ondas planar, consideramos a polarização TE na direção x . Supondo que o guia seja infinito na direção x , o campo deve ser uniforme nessa dimensão e depender apenas de y e z . Além disso, devido à homogeneidade da estrutura na direção z , a amplitude do campo não varia nessa direção, apenas sua fase. Assim, podemos expressá-lo como:

$$E_x = E_x(y)e^{-i\beta z}e^{i\omega t} \quad (25)$$

Substituindo essa expressão na equação de onda e considerando a dependência harmônica no tempo e na direção z , obtemos:

$$\frac{d^2 E_x}{dy^2} + (k_0^2 n_j^2 - \beta^2) E_x = 0 \quad (26)$$

onde

$$k_0 = \frac{\omega}{c} \quad (27)$$

$$k_{yj}^2 = \beta^2 - k_0^2 n_j^2. \quad (28)$$

O índice j indica a região do guia onde a equação é aplicada: para $j = 1$ refere-se ao núcleo; para $j = 2$ e $j = 3$ corresponde aos revestimentos inferior e superior, respectivamente.

A solução geral pode ser escrita como:

$$E_x(y, z, t) = E_{xj}(y)e^{-j\beta z}e^{j\omega t} \quad (29)$$

No entanto, a constante transversal k_{yj} assume diferentes formas em cada região do guia. No núcleo ($j = 1$), para que haja guiamento, deve-se satisfazer:

$$n_1 k_0 > \beta > n_2 k_0, \quad (30)$$

o que implica que:

$$k_{y1}^2 = k_0^2 n_1^2 - \beta^2 > 0, \quad (31)$$

resultando em k_{y1} real e comportamento oscilatório do campo no núcleo. Nos revestimentos, k_{y2} e k_{y3} são reais positivos, indicando decaimento exponencial do campo fora do núcleo. Essa distinção está associada à condição de confinamento por reflexão interna total.

Assim, as amplitudes do campo nas diferentes regiões do guia podem ser escritas como:

$$E_{x1}(y) = E_1 e^{-iK_{y1}y}, \quad -\frac{h}{2} \leq y \leq \frac{h}{2} \quad (32)$$

$$E_{x2}(y) = E_2 e^{-k_{y2}(y+h/2)}, \quad y \leq -\frac{h}{2} \quad (33)$$

$$E_{x3}(y) = E_3 e^{-k_{y3}(y-h/2)}, \quad y \geq \frac{h}{2} \quad (34)$$

Por fim, as condições de contorno na interface entre as regiões impõem que:

- a) A componente tangencial do campo elétrico \mathbf{E} deve ser contínua.
- b) A componente tangencial do campo magnético \mathbf{H} deve ser contínua.

Essas condições garantem a correta propagação e confinamento do campo no guia de ondas dielétrico.

Aplicando as condições descritas acima, a componente E_x é transversa na interface, permitindo que a primeira condição seja facilmente aplicada. Para garantir a continuidade do campo magnético, é necessário expressar sua componente tangencial em função do campo elétrico. Considerando que os campos são harmônicos, o campo magnético pode ser expresso como:

$$\mathbf{H} = -\frac{1}{i\omega\mu} \nabla \times \mathbf{E}. \quad (35)$$

Expandindo o rotacional em suas componentes individuais, a componente transversa (na direção z) será dada por:

$$H_z = \frac{i}{\omega\mu} \frac{\partial E_x}{\partial y}. \quad (36)$$

Como não há componente E_y devido à estrutura planar infinita nesta direção, conclui-se que essa equação representa completamente a relação entre os campos elétrico e magnético.

Dado que μ e ω são idênticos em todos os meios, a continuidade do campo magnético só será garantida se H_z deve ser contínua nas interfaces $y = \pm h/2$. Aplicando essa condição juntamente com a continuidade de E_x , obtêm-se:

$$\begin{cases} E_3 = E_1 e^{-iK_{y1} \frac{h}{2}} \\ E_2 = E_1 e^{iK_{y1} \frac{h}{2}} \end{cases} \quad (37)$$

e

$$\begin{cases} E_3 = i \frac{K_{y1}}{K_{y3}} E_1 e^{-iK_{y1} \frac{h}{2}} \\ E_2 = i \frac{K_{y1}}{K_{y2}} E_1 e^{iK_{y1} \frac{h}{2}} \end{cases} \quad (38)$$

A aplicação simultânea dessas condições de continuidade conduz a uma equação de autovalores para as constantes de propagação do guia:

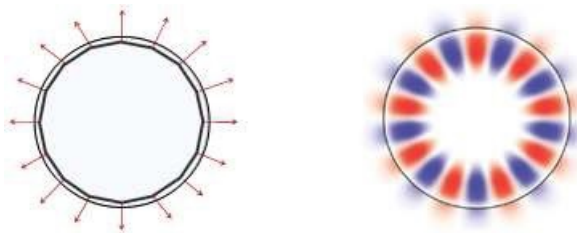
$$\tan^{-1}\left[\frac{K_{y2}}{K_{y1}}\right] + \tan^{-1}\left[\frac{K_{y3}}{K_{y1}}\right] = [K_{y1}h + m\pi]. \quad (39)$$

Essa equação é equivalente à condição modal obtida anteriormente pelo método geométrico. A principal diferença é que, nesta abordagem eletromagnética, obtêm-se diretamente as expressões completas dos campos, permitindo determinar rigorosamente os modos guiados e suas respectivas constantes de propagação β .

2.2 Microcavidades Ópticas e Moléculas Fotônicas

Nos microressonadores ópticos encontra-se uma propriedade fundamental: o confinamento da luz devido à diferença de índice de refração entre os materiais que compõem a estrutura. Esse confinamento ocorre predominantemente por reflexão interna total na interface entre o núcleo da cavidade e o meio circundante, permitindo que a energia eletromagnética permaneça circulando no interior da estrutura. Em microdiscos e microanéis, esse fenômeno está associado à presença dos chamados modos WGM (ORAEVSKY, 2002), conforme ilustrado na Figura 6(b).

Figura 6 – Distribuição de energia e potência em um microdisco



(a) Distribuição da energia eletromagnética planar de um microdisco e a trajetória poligonal do fóton no interior da cavidade. (b) Distribuição de potência WGM calculada sobre a superfície de um microdisco. Fonte: adaptado de (BAREA, 2010)

Aplicando o conceito de reflexão interna total a essa geometria curva, pode-se interpretar, sob uma abordagem geométrica aproximada, a trajetória da luz como um caminho poligonal fechado no interior da cavidade, conforme mostrado na Figura 6(a). No entanto, uma descrição mais rigorosa exige a solução das equações de Maxwell com

as devidas condições de contorno na interface cavidade/ar, levando à equação vetorial de Helmholtz para os campos eletromagnéticos.

Assumindo que os modos estejam bem confinados no interior da cavidade e que as perdas radiativas sejam desprezíveis, a condição necessária para que ocorra ressonância é que o campo reproduza sua própria fase após uma volta completa na cavidade. Essa condição pode ser expressa por:

$$m\lambda_m = n_{ef} 2\pi R \quad (40)$$

onde m é um número inteiro (ordem azimutal do modo), λ_m é o comprimento de onda ressonante, n_{ef} é o índice de refração efetivo do modo guiado e R é o raio da cavidade. Essa relação representa a condição de fase para formação dos modos ressonantes do tipo WGM.

Quando um guia de onda é posicionado próximo à microcavidade, ocorre acoplamento evanescente entre os campos do guia e da cavidade. A energia óptica pode então ser transferida do guia para os modos ressonantes da cavidade. Se múltiplas cavidades forem acopladas entre si ou a uma cavidade externa, forma-se uma PM, na qual os modos individuais interagem, produzindo uma resposta espectral combinada e mais complexa.

A principal vantagem dessa combinação de cavidades reside na possibilidade de engenharia espectral, incluindo a obtenção de um FSR efetivamente reduzido ou modulado, sem necessidade de aumentar significativamente o raio das cavidades. Esse efeito é explorado, por exemplo, em configurações do tipo Vernier, conforme ilustrado esquematicamente na Figura 7.

No esquema apresentado na Figura 7(a), as cavidades internas possuem ressonâncias alinhadas (ressonantes) com a cavidade externa, enquanto na Figura 7(b) as ressonâncias não coincidem, resultando em uma dinâmica espectral distinta. As microcavidades destacadas indicam aquelas responsáveis pelas ressonâncias na região espectral de interesse.

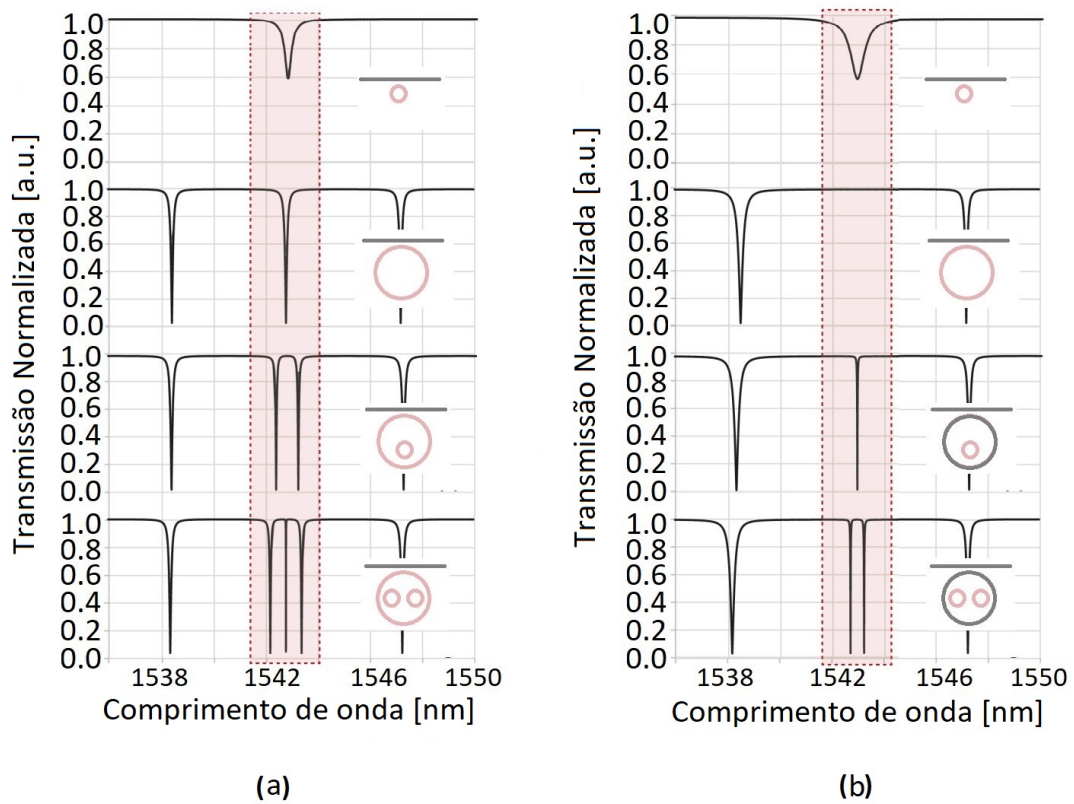
Para o projeto de dispositivos ópticos integrados baseados em microcavidades acopladas, é fundamental analisar o comportamento do campo quando este é acoplado entre o guia e as cavidades. Uma abordagem amplamente utilizada para essa análise é o método da matriz de transferência, conforme apresentado por (YARIV, 2000). Para um guia dielétrico acoplado a uma cavidade anelar, como mostrado na Figura 8, a relação entre os campos pode ser descrita por:

$$\begin{bmatrix} a_2 \\ b_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} t & ik \\ ik^* & t^* \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ b_2 \end{bmatrix} \quad (41)$$

onde:

- a_1 e a_2 representam as amplitudes complexas do campo no guia de onda (entrada e saída);

Figura 7 – Dinâmica espectral em moléculas fotônicas



(a) Caso em que as ressonâncias das cavidades internas estão alinhadas (ressonantes) com a cavidade externa, resultando em forte interação modal e modulação espectral característica. (b) Caso em que as ressonâncias das cavidades internas não coincidem com as da cavidade externa, produzindo uma resposta espectral distinta. As figuras inseridas em cada gráfico esquematizam as moléculas fotônicas correspondentes, sendo as microcavidades destacadas em vermelho aquelas relacionadas aos comprimentos de onda na região espectral de interesse. Fonte: Adaptado de (BAREA, 2014)

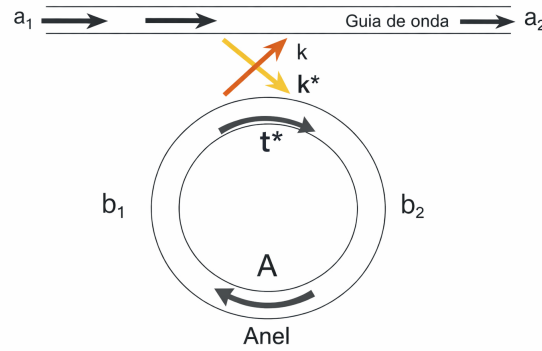
- b_1 e b_2 representam as amplitudes do campo dentro do anel;
- t e t^* são os coeficientes complexos de transmissão;
- k e k^* são os coeficientes de acoplamento entre o guia e o anel.

Admitindo ausência de perdas na região de acoplamento e considerando que o ressonador apresenta atenuação pequena ($A \approx 1$), a potência transmitida na saída do guia pode ser expressa por:

$$|a_2|^2 = \frac{A^2 + |t|^2 - 2A|t|\cos(\eta + \delta_t)}{1 + A^2 + |t|^2 - 2A|t|\cos(\eta + \delta_t)} \quad (42)$$

onde η representa a fase acumulada após uma volta completa na cavidade e δ_t está associado à fase do coeficiente de transmissão. A condição de ressonância ocorre quando

Figura 8 – Acoplamento óptico em cavidade anelar



Demonstração dos caminhos ópticos em um acoplamento entre um guia de onda retangular e uma cavidade anelar. Fonte: Autor

$\eta + \delta_t = m \cdot 2\pi, m \in \mathbb{Z}$. A fase acumulada pode ser escrita como $\eta' = \eta + \delta_t = \omega T$, onde T é o tempo necessário para que a onda complete uma volta na cavidade. Com essas definições, a amplitude transmitida pode ser escrita como:

$$a_2 = \frac{t - Ae^{i\omega T}}{1 - tAe^{i\omega T}} \quad (43)$$

De forma mais geral, quando há múltiplas cavidades internas acopladas a uma cavidade externa (sem acoplamento direto entre si), a saída da molécula fotônica pode ser expressa por (BAREA, 2010):

$$a_2 = \frac{t - (Ae^{i\omega T}) * N}{1 - (tAe^{i\omega T} * N)} \quad (44)$$

onde o termo N representa a contribuição combinada das cavidades internas:

$$N = \prod_{p=1}^n \left[\frac{t_{p'} - A_{p'} e^{i\omega T_{p'}}}{1 - t_{p'} A_{p'} e^{i\omega T_{p'}}} \right] \quad (45)$$

Essa expressão evidencia que a resposta espectral da molécula fotônica resulta da multiplicação das contribuições individuais das cavidades internas, permitindo controle refinado sobre o formato espectral, posição das ressonâncias e largura de linha. Esse comportamento é fundamental para aplicações em sensoriamento diferencial, nas quais pequenas variações no índice de refração modificam seletivamente as condições de fase em cavidades específicas da molécula.

O gráfico da Figura 9 apresenta o espectro de transmissão simulado utilizando a Equação 44 para um MRR atuando como filtro óptico (BARWICZ et al., 2004; ZHENG; CHEN; POON, 2006), composto por um guia de onda acoplado a um anel ressonante de raio $R = 12,5 \mu\text{m}$. A partir desse espectro, é possível extrair parâmetros fundamentais

do dispositivo, tais como a largura de meia altura da ressonância $\Delta\lambda_{FWHM}$, o índice de grupo n_g , o (FSR) e o fator de extinção (FE), definidos pelas seguintes equações:

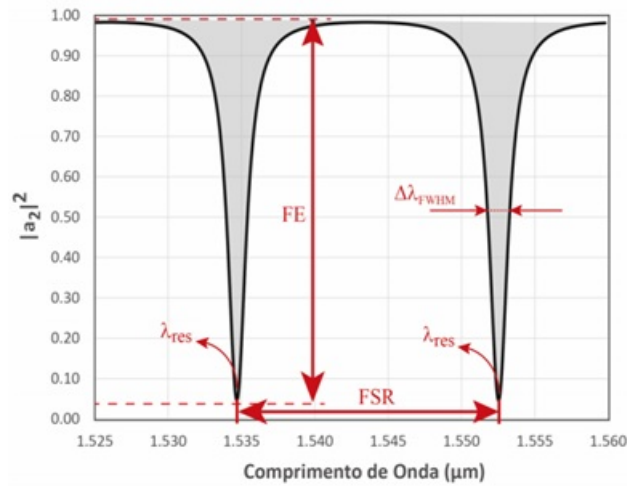
$$\Delta\lambda_{FWHM} = \frac{1}{\pi n_g L} \frac{1 - |A| |t|}{\sqrt{|A| |t|}} \lambda_{res}^2 \quad (46)$$

$$n_g = n_{ef} - \lambda_o \frac{dn_{ef}}{d\lambda} \quad (47)$$

$$FSR = \frac{\lambda_{res}^2}{n_g L} \quad (48)$$

$$FE = \frac{(|t| + A)^2 (1 - |t|A)^2}{(|t| - A)^2 (1 + |t|A)^2} \quad (49)$$

Figura 9 – Espectro de transmissão em uma cavidade anelar



Espectro de transmissão resultante de um filtro óptico contendo um guia de onda e um anel de raio 12.5 μm . Fonte: Autor

Além dos parâmetros explicitamente indicados no espectro da Figura 9, outros dois parâmetros relevantes podem ser determinados: a Finesse (\mathcal{F}) e o fator- Q . A Finesse relaciona o espaçamento espectral livre com a largura de linha da ressonância, enquanto o fator de qualidade quantifica o grau de confinamento energético do modo ressonante. Esses parâmetros são dados por:

$$F = \frac{FSR}{\Delta\lambda_{FWHM}} = \frac{\pi\sqrt{|A| |t|}}{(1 - |t|A)} \quad (50)$$

$$Q = \frac{\lambda_{res}}{\Delta\lambda_{FWHM}} = \frac{\pi L n_g \sqrt{|A| |t|}}{\lambda_{res} (1 - |t|A)} \quad (51)$$

Observa-se que tanto a Finesse quanto o fator de qualidade dependem diretamente do balanço entre perdas internas (representadas por A) e acoplamento externo (representado por t), evidenciando a importância do regime de acoplamento (subacoplado, criticamente acoplado ou superacoplado) no desempenho espectral do dispositivo (BAREA et al., 2013a).

2.3 Sensores Ópticos baseados em PMs

Sensores ópticos baseados em microcavidades ressonantes exploram o deslocamento do comprimento de onda ressonante induzido por variações no RI do meio externo. Entretanto, essa mesma condição de ressonância também é sensível a variações térmicas, o que introduz um termo de sensibilidade cruzada que pode comprometer a confiabilidade da medição. Nesta seção, desenvolve-se formalmente a teoria da sensibilidade espectral em microcavidades isoladas e, em seguida, a formulação diferencial aplicada à PM ilustrada na Figura 2 pela qual apresenta uma PM composta por duas cavidades concêntricas acopladas: uma cavidade interna parcialmente exposta ao analito por meio de uma área sensora controlada e uma cavidade externa blindada que atua como referência. O espectro característico dessa estrutura evidencia duas famílias de ressonâncias, associadas às duas cavidades, cuja separação espectral constitui a variável monitorada na leitura diferencial.

2.3.1 Sensibilidade em um Microrressonador Isolado

A condição de ressonância de uma cavidade anelar é dada pela Equação 43. Para pequenas perturbações, obtemos:

$$m d\lambda = L dn_{ef} + n_{ef} dL \quad (52)$$

Dividindo pela própria condição de ressonância, chega-se a:

$$\frac{d\lambda}{\lambda} = \frac{dn_{ef}}{n_{ef}} + \frac{dL}{L} \quad (53)$$

Essa equação evidencia que o deslocamento espectral possui duas origens físicas distintas:

- 1 Variação do índice efetivo do modo guiado
- 2 Variação geométrica do comprimento óptico

A variação geométrica pode ser associada à dilatação térmica:

$$\frac{dL}{L} = \alpha dT \quad (54)$$

onde α é o coeficiente de expansão térmica linear.

O índice efetivo, por sua vez, depende da distribuição espacial do campo óptico. Em sensores de RI, parte do campo evanescente se estende para o meio externo. Assim, o índice efetivo pode ser expresso como uma média ponderada:

$$n_{ef} = \Gamma_{core} n_{core} + \Gamma_{clad} n_{clad} + \Gamma_{analito} n_{analito} \quad (55)$$

Os coeficientes Γ_i , denominados fatores de confinamento modal, representam a fração da energia óptica total confinada em cada região e são definidos por:

$$\Gamma_i = \frac{\int_{V_i} \varepsilon |E|^2 dV}{\int_{V_{total}} \varepsilon |E|^2 dV} \quad (56)$$

sendo:

$$\Gamma_{core} + \Gamma_{clad} + \Gamma_{analito} = 1 \quad (57)$$

A variação do índice efetivo pode então ser escrita como:

$$dn_{ef} = \Gamma_{analito} dn_{analito} + \frac{dn_{ef}}{dT} dT \quad (58)$$

Substituindo na expressão diferencial da ressonância:

$$\frac{d\lambda}{\lambda} = \frac{\Gamma_{analito}}{n_{ef}} dn_{analito} + \left(\frac{1}{n_{ef}} \frac{dn_{ef}}{dT} + \alpha \right) dT \quad (59)$$

Define-se, portanto, a sensibilidade espectral ao índice do analito como:

$$S = \frac{d\lambda}{dn_{analito}} = \lambda \frac{\Gamma_{analito}}{n_{ef}} \quad (60)$$

Essa expressão mostra explicitamente que a sensibilidade depende diretamente da fração modal exposta ao analito. Entretanto, no caso de um único anel, o deslocamento induzido por temperatura é indistinguível do deslocamento induzido pelo analito, pois ambos afetam a posição absoluta da ressonância.

2.3.2 Extensão da Análise para Moléculas Fotônicas

Na proposta de sensor baseado em PM apresentada na Figura 2, a presença de duas cavidades permite transformar o problema em uma leitura diferencial. Denotando por λ_s a ressonância associada à cavidade sensora e por λ_r a ressonância associada à cavidade de referência, os deslocamentos individuais podem ser escritos como:

$$\Delta\lambda_s = S_s \Delta n + S_{T,s} \Delta T \quad (61)$$

$$\Delta\lambda_r = S_{T,r} \Delta T \quad (62)$$

onde:

$$S_s = \lambda \frac{\Gamma_{\text{analito}}}{n_{ef}} \quad (63)$$

$$S_{T,j} = \lambda \left(\frac{1}{n_{ef}} \frac{dn_{ef}}{dT} + \alpha \right)_j \quad (64)$$

onde j indica qual cavidade da molécula fotônica está sendo considerada. A medida experimental não é feita monitorando separadamente λ_s e λ_r , mas sim o espaçamento espectral entre elas:

$$\Delta\lambda_{\text{diff}} = \lambda_s - \lambda_r \quad (65)$$

A variação desse espaçamento é:

$$\delta(\Delta\lambda_{\text{diff}}) = \Delta\lambda_s - \Delta\lambda_r = S_s \Delta n + (S_{T,s} - S_{T,r}) \Delta T \quad (66)$$

Observa-se que, se as duas cavidades estiverem sujeitas às mesmas variações térmicas globais e apresentarem coeficientes térmicos equivalentes, então:

$$S_{T,s} \approx S_{T,r} \quad (67)$$

resultando em

$$\delta(\Delta\lambda_{\text{diff}}) \approx S_s \Delta n \quad (68)$$

Esse é o princípio físico da compensação térmica diferencial e uma das vantagens desse tipo de sensor baseado em PM. No entanto, a compensação térmica não é perfeita, originando o resíduo térmico diferencial, discutido a seguir.

2.3.3 Resíduo Térmico Diferencial

A compensação térmica não é perfeita, uma vez que, conforme discutido na introdução, o coeficiente termo-óptico dos materiais apresenta ordem de grandeza 10^{-5}K^{-1} , enquanto a dilatação térmica estrutural é tipicamente 10^{-6}K^{-1} . Assim, o deslocamento térmico é dominado pela variação termo-óptica do índice efetivo.

Na PM da Figura 2, a cavidade sensora possui uma área de detecção parcial, enquanto a cavidade de referência permanece protegida. Essa diferença estrutural implica que:

$$\Gamma_{\text{analito}}^{(\text{sensor})} > 0 \quad (69)$$

$$\Gamma_{\text{analito}}^{(\text{ref})} = 0 \quad (70)$$

Consequentemente, o coeficiente termo-óptico efetivo da cavidade sensora incorpora a contribuição térmica do analito, enquanto a cavidade de referência não. Essa assimetria gera:

$$S_{T,s} \neq S_{T,r} \quad (71)$$

produzindo um termo residual proporcional a $(S_{T,s} - S_{T,r}) \Delta T$.

A redução da extensão angular da área sensora diminui Γ_{analito} , aproximando os coeficientes térmicos das duas cavidades e reduzindo o resíduo térmico diferencial. Entretanto, como a sensibilidade espectral é proporcional a Γ_{analito} , essa redução também diminui S_s .

2.3.4 Relação entre Sensibilidade, Fator-Q, FSR e Faixa de variação máxima detectável

A avaliação do desempenho do sensor baseado na PM apresentada na Figura 2 não se restringe à análise isolada da sensibilidade espectral. Conforme discutido ao longo da dissertação, o comportamento do dispositivo deve ser compreendido a partir da interação simultânea entre múltiplas métricas: sensibilidade espectral S, Q, FSR, MDVR e resíduo térmico diferencial.

A sensibilidade espectral foi anteriormente deduzida a partir da condição de ressonância da cavidade e definida como a derivada do comprimento de onda ressonante em relação ao índice do analito. Sua forma analítica foi apresentada na seção anterior, evidenciando sua dependência direta do fator de confinamento modal Γ_{analito} . Fisicamente, essa grandeza expressa o deslocamento do comprimento de onda ressonante por unidade de variação do índice de refração do analito (nm/RIU). Entretanto, a capacidade prática de detectar pequenas variações de índice não depende apenas da magnitude de S. Ainda que o deslocamento espectral seja elevado, a resolução da medida estará limitada se a ressonância apresentar largura espectral significativa.

A largura de linha da ressonância, $\Delta\lambda_{\text{FWHM}}$, apresentada na Equação 46, determina a nitidez espectral do dispositivo. Essa largura está diretamente relacionada ao fator Q, definido na Equação 51, o qual quantifica o grau de confinamento energético do modo óptico. Valores elevados de Q correspondem a ressonâncias mais estreitas e, portanto, maior capacidade de discriminar pequenos deslocamentos espectrais.

A periodicidade espectral da cavidade é estabelecida pelo FSR, cuja expressão foi apresentada na Equação 48. O FSR determina o espaçamento entre ressonâncias consecutivas e define o intervalo espectral dentro do qual a resposta do sensor pode ser considerada não ambígua.

2.3.5 Definição Matemática da Faixa de variação máxima detectável (MDVR)

Faixa de variação máxima detectável é definida como a faixa máxima de variação do índice de refração do analito que pode ser medida de forma confiável e sem ambiguidade pelo dispositivo. A definição da MDVR parte da interpretação de que a faixa espectral útil do sensor é limitada pelo FSR do microrressonador de referência. Esse FSR estabelece a janela espectral máxima dentro da qual uma ressonância de detecção pode ser identificada de forma não ambígua, uma vez que ressonâncias adjacentes tornam-se indistinguíveis fora desse intervalo. Dessa forma, o FSR da cavidade de referência define, em primeira aproximação, a largura total disponível para a detecção.

Entretanto, essa janela espectral não pode ser utilizada integralmente, pois regiões próximas às ressonâncias — tanto de referência quanto de detecção — apresentam sobreposição espectral e limitações associadas à largura finita dos picos ressonantes. Essas regiões de exclusão são determinadas pela largura espectral das ressonâncias, usualmente representada pela largura à meia altura ($\Delta\lambda_{FWHM}$) ou, de forma equivalente, pelo fator de qualidade Q , além de fatores adicionais (ϑ_1 e ϑ_2) que incorporam limitações instrumentais e de processamento. Assim, a faixa espectral efetivamente utilizável é obtida pela subtração dessas margens do FSR de referência. Por fim, essa faixa espectral é convertida para o domínio de índice de refração por meio da sensibilidade S , resultando na definição da MDVR em unidades de RIU. Assim, a MDVR é obtida convertendo uma faixa espectral efetiva em uma faixa de índice via a sensibilidade S , resultando em unidades de RIU:

$$MDVR = \frac{FSR_{ref} - \vartheta_1 \frac{\lambda_{ref}}{Q_{ref}} - \vartheta_2 \frac{\lambda_{deteccao}}{Q_{deteccao}}}{S} \quad (72)$$

ϑ_1 e ϑ_2 atuam como fatores de margem que permitem incorporar limitações instrumentais e do processamento, que agregam efeitos de:

- resolução do interrogador (passo de varredura, calibração),
- SNR/ruído do ajuste,
- estabilidade térmica instantânea durante a varredura,
- algoritmo de *tracking* (*peak finding* vs *fitting*),
- eventuais assimetrias do pico (*splitting*, *backscattering*).

2.3.6 Interdependência entre Sensibilidade, Q e MDVR

O limite mínimo detectável de variação de RI depende simultaneamente da sensibilidade espectral e da largura de linha da ressonância. Uma estimativa simplificada do limite de detecção (LOD) pode ser escrita como proporcional a:

$$LOD \propto \frac{\Delta\lambda_{FWHM}}{S} \quad (73)$$

Utilizando a definição do fator- Q (Equação 51), pode-se reescrever:

$$LOD \propto \frac{\lambda_{res}}{Q S} \quad (74)$$

Essa expressão mostra que:

- Aumentar Q reduz o limite mínimo detectável;
- Aumentar S amplifica o deslocamento por unidade de índice;
- Ambos os parâmetros contribuem simultaneamente para a resolução do sensor.

Contudo, na arquitetura diferencial dos sensores de PM, o tamanho da área sensora influencia diretamente:

- O fator de confinamento $\Gamma_{analito}$ e, portanto, S ;
- O coeficiente termo-óptico efetivo da cavidade sensora;
- O resíduo térmico diferencial;
- O Q , devido à modificação do confinamento modal;
- A MDVR, por meio da dependência inversa com S .

Reduzir a área sensora tende a diminuir $\Gamma_{analito}$, reduzindo a sensibilidade espectral e aumentando a MDVR. Simultaneamente, aproxima os coeficientes térmicos efetivos das duas cavidades, diminuindo o resíduo térmico diferencial. Por outro lado, ampliar a área sensora aumenta a interação luz-analito, elevando S , mas reduz a faixa dinâmica operacional e pode ampliar o termo térmico residual.

Dessa forma, o projeto geométrico da molécula fotônica não afeta isoladamente uma única métrica de desempenho, mas altera de maneira interdependente todo o conjunto de parâmetros que governam a resposta do sensor. A otimização dessas métricas conflitantes constitui o problema central investigado nos capítulos seguintes.

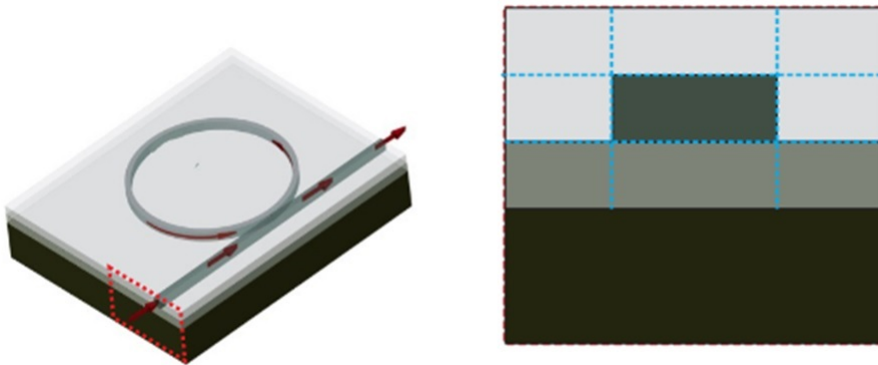
2.4 Metodologia de Modelagem com Redução Dimensional 3D→2D

A abordagem mais direta para prever a resposta espectral e a distribuição de campo em estruturas fotônicas integradas consiste na simulação eletromagnética tridimensional completa por meio do método de Finite-Difference Time-Domain (FDTD).

Entretanto, simulações 3D apresentam custo computacional elevado, pois a discretização espacial ocorre em três direções, resultando em número de células proporcional ao volume do domínio, enquanto o passo temporal é limitado por critérios de estabilidade numérica. Para guias integrados com alto contraste de índice e presença de campos evanescentes, torna-se necessário utilizar malhas refinadas, aumentando simultaneamente o consumo de memória e o tempo de execução. Considerando que este trabalho envolve a varredura de múltiplos parâmetros geométricos e materiais, incluindo variações na largura do guia, dimensões da área sensora e propriedades do analito, a utilização exclusiva de simulações tridimensionais tornaria o processo inviável. Assim, adotou-se uma metodologia de redução dimensional baseada no Effective Index Method (EIM), conforme descrito por Fonstad (2003), permitindo mapear a seção transversal 3D do guia para um modelo bidimensional equivalente.

O procedimento inicia-se com a definição completa da seção transversal tridimensional, incluindo núcleo, substrato, sobrecamadas e meio superior. Essa seção é particionada em uma malha 3x3, totalizando nove regiões, conforme ilustrado na Figura 10.

Figura 10 – Seção transversal em um guia de onda.



Modelo 3D de uma molécula fotônica destacando sua seção transversal segregada em uma malha 3x3. Fonte: Autor

A partir dessa partição, definem-se três colunas verticais que originam três slab waveguides equivalentes, conforme mostrado na Figura 11.

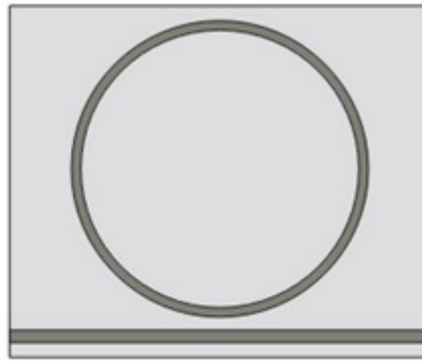
Para cada slab waveguide realiza-se uma simulação modal ao longo do intervalo espectral analisado, obtendo-se três índices efetivos intermediários $n_{\text{eff,slab}}$. Esses valores são então utilizados para construir um slab lateral equivalente, sobre o qual realiza-se nova simulação modal, obtendo-se o índice efetivo final do modelo reduzido, denotado por $n_{\text{eff,2D}}$. Esse índice passa a representar o comportamento eletromagnético da seção transversal tridimensional original em um modelo bidimensional equivalente, conforme ilustrado na Figura 12.

Figura 11 – Partição da seção transversal em Slabguides.



Segregação da seção transversão em slabguides. Fonte: Autor

Figura 12 – Modelo 2D de uma cavidade anelar.



Exemplificação do layout 2D do dispositivo. Fonte: Autor

Para validar a metodologia de redução dimensional, utilizou-se como estudo de caso o sensor em plataforma SOI reportado por Moras et al. (2022). Nesse dispositivo, o meio superior do guia pode assumir três condições: encapsulamento em SiO_2 , contato com os analitos de teste alvo.

Como o intuito é detectar variações no analito uma abordagem a ser utilizada é variar o índice de refração do analito por meio da adição de outro composto também conhecido. Para o trabalho Moras et al. (2022) os analitos de teste alvo foram escolhidos como Água e solução aquosa de Etileno Glicol EG. A concentração de EG não é introduzida diretamente no modelo eletromagnético. Inicialmente, para cada concentração considerada (5%, 10%, 15%, 20% e 25%), determina-se o RI correspondente da solução aquosa, utilizando dados experimentais da literatura (SAUNDERS et al., 2016) que relacionam concentração volumétrica de EG com RI no comprimento de onda de interesse. Esse valor de índice é então atribuído como parâmetro óptico do meio superior na simulação modal.

Assim, a variável física efetivamente utilizada nas simulações é o índice de refração do analito n , enquanto a concentração de EG funciona como parâmetro intermediário que determina esse índice.

Para cada valor de índice do meio superior, realiza-se:

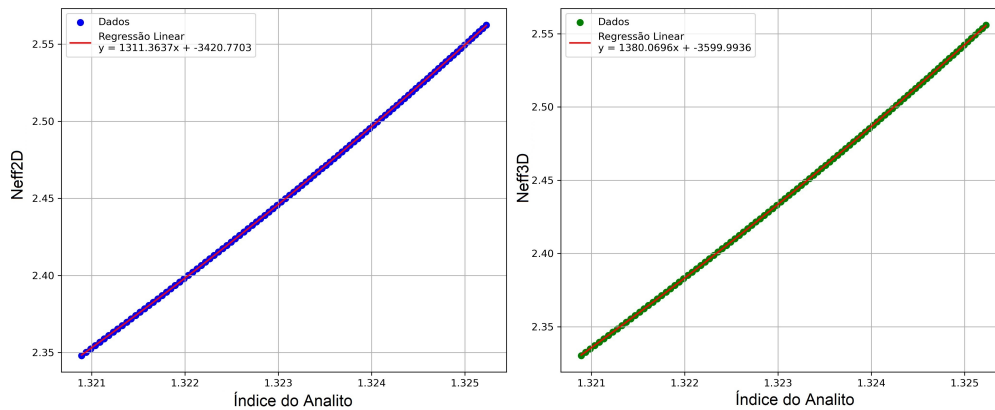
- Simulação modal tridimensional da seção transversal original, obtendo-se $n_{\text{eff},3D}$;
- Aplicação completa do procedimento de redução para obtenção de $n_{\text{eff},2D}$.

A validação do modelo não se restringe à comparação do valor absoluto de n_{eff} , mas concentra-se principalmente na comparação da sensibilidade modal ao analito, isto é, na derivada:

$$\frac{dn_{\text{eff}}}{dn} \quad (75)$$

Para cada conjunto de dados (2D e 3D), ajusta-se uma regressão polinomial de segundo grau de n_{eff} em função do índice do analito n . A Figura 13 apresenta um exemplo dessa regressão para solução aquosa de EG a 5% de concentração.

Figura 13 – Neff2D e Neff3D: valores simulados para solução de Etilenoglicol em 5% de concentração



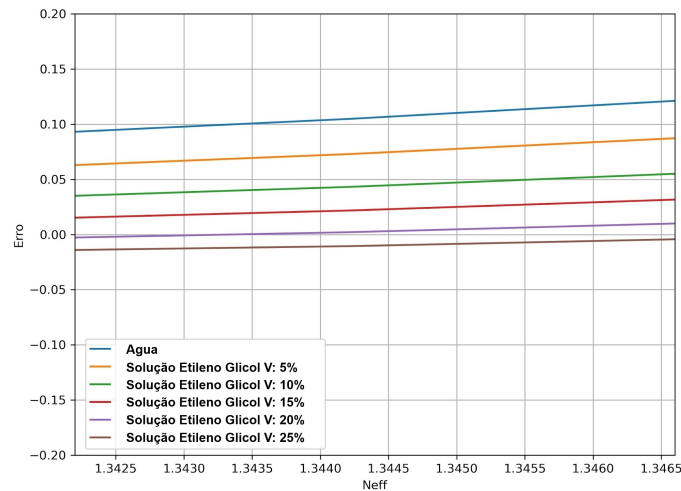
Regressão polinomial de grau 2 para os resultados obtidos durante a redução 2D de um guia de onda envolto em uma solução aquosa de Etileno glicol em concentração de 5% apresentando o resultado para: Neff2D e Neff3D em função do índice de refração da solução. Fonte: Autor

O erro associado à redução dimensional é definido como a diferença entre as derivadas das curvas ajustadas:

$$Erro(n) = \frac{dn_{\text{eff},2D}}{dn} - \frac{dn_{\text{eff},3D}}{dn} \quad (76)$$

Essa métrica avalia diretamente se o modelo reduzido preserva a sensibilidade modal ao analito, que é a grandeza relevante para aplicações em sensoriamento óptico.

Figura 14 – Neff2D e Neff3D: Erro diferencial observado.



Erro obtido pela redução 2D em função do índice de refração do analito considerando solução aquosa de Etileno glicol em 5%, 10%, 15%, 20% e 25% de concentração. Fonte: Autor

A Figura 14 apresenta o erro diferencial observado para diferentes concentrações de EG (5%, 10%, 15%, 20% e 25%).

Os resultados demonstram que o modelo bidimensional preserva não apenas o valor absoluto de n_{eff} , mas principalmente sua dependência com o índice do analito, validando sua aplicação nas análises paramétricas desenvolvidas nos capítulos seguintes.

Capítulo 3

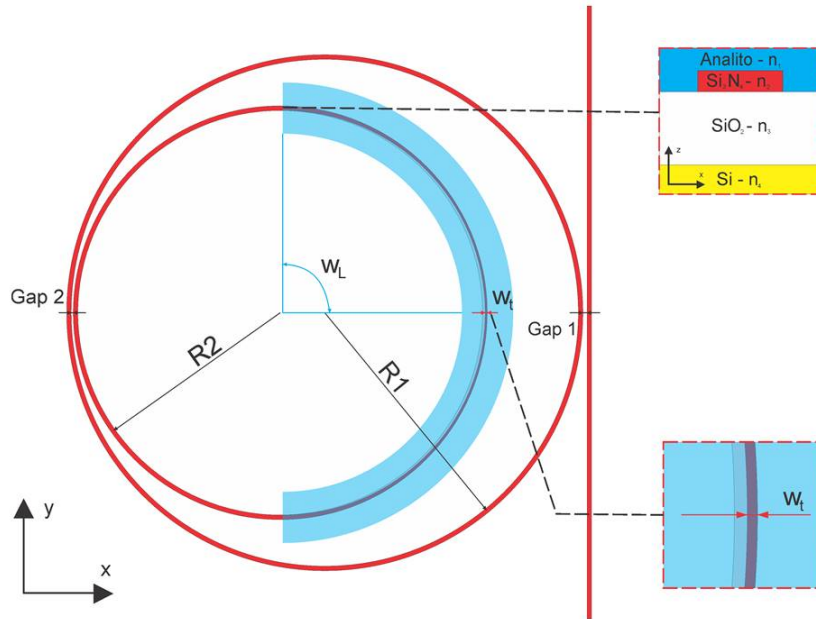
Metodologia

Este capítulo apresenta a metodologia empregada no desenvolvimento do sensor óptico baseado em PMs. O estudo foi estruturado por meio de um fluxo sistemático e incremental, organizado em etapas sucessivas que compreendem a modelagem teórica do dispositivo, a implementação de simulações eletromagnéticas e o pós-processamento automatizado dos resultados. Essa organização permitiu garantir rastreabilidade entre as decisões de projeto, as condições de simulação e as métricas extraídas. A estratégia metodológica foi concebida para possibilitar a exploração controlada do espaço de parâmetros geométricos e materiais do dispositivo, mantendo consistência entre modelo analítico, implementação numérica e critérios de comparação. O procedimento adotado inclui a definição da arquitetura do sensor, a seleção de ferramentas computacionais apropriadas, a configuração dos parâmetros de simulação e a estruturação de rotinas de extração automática das grandezas de interesse. Para a análise do comportamento térmico, foram consideradas condições de operação próximas à temperatura ambiente. O dispositivo foi avaliado em cinco temperaturas discretas (20 °C, 25 °C, 30 °C, 35 °C e 40 °C), permitindo estabelecer um conjunto padronizado de cenários para comparação entre diferentes configurações geométricas. Essa variação controlada de temperatura foi incorporada ao fluxo metodológico de forma sistemática, assegurando que todas as combinações de parâmetros fossem analisadas sob as mesmas condições térmicas. Nos tópicos seguintes, são detalhadas as ferramentas utilizadas, os critérios de parametrização adotados e as etapas que compõem o fluxo completo de modelagem, simulação e análise.

3.1 Arquitetura do sensor e parâmetros de varredura geométrica

A arquitetura investigada baseia-se em um arranjo de microcavidades em configuração de microrings acoplados, conforme o layout apresentado na Figura 15.

Figura 15 – Layout proposto para o sensor óptico baseado em molécula fotônica (PM).



Layout proposto para o Sensor óptico com detecção por índice de refração com estrutura baseada em microrings sob uma plataforma de nitreto de silício sobre isolante, baseado em uma PM constituída de dois anéis com raios R_1 e R_2 externo e interno respectivamente, com estrangulamento W_t e com abertura W_L medida em ângulo. Fonte: Autor

A Figura 15 apresenta o layout esquemático do dispositivo, destacando as variáveis geométricas consideradas no processo de otimização. São indicados os raios dos anéis externo e interno (R_1 e R_2), o comprimento angular da área de detecção (W_L) e o estrangulamento local do guia na região sensora (W_t). A estratégia metodológica prioriza modificações estruturais passivas, concentradas em dois graus de liberdade geométricos diretamente associados ao compromisso entre sensibilidade e estabilidade térmica:

- 1 Comprimento angular da área de detecção (W_L)** A área de detecção é definida como um arco do anel interno, medido em graus, ao longo do qual o guia permanece exposto ao analito. Esse parâmetro determina o comprimento efetivo de interação entre o campo evanescente do modo guiado e o meio superior durante a propagação na cavidade sensora. O comprimento linear correspondente à região exposta pode ser relacionado ao ângulo da janela por meio da expressão:

$$L_{\text{exposto}} = 2\pi R_2 \left(\frac{W_L}{360} \right) \quad (77)$$

onde R_2 é o raio do anel interno e W_L é o ângulo da janela expresso em graus. Dessa forma, a fração do perímetro do anel que interage com o analito é simplesmente:

$$\frac{L_{\text{exposto}}}{2\pi R_2} = \frac{W_L}{360} \quad (78)$$

Essa relação evidencia que a variação de W_L modifica diretamente a fração do caminho óptico sujeita à perturbação do índice de refração externo, impactando o deslocamento espectral observado. Para manter consistência física, considera-se que a largura da região de detecção seja suficiente para abranger mais de 90% da intensidade associada ao campo evanescente (no caso sem estrangulamento), assegurando que o efeito do analito seja efetivamente capturado. Essa condição evita subestimação da interação modal e garante que a variação do índice de refração do meio superior seja devidamente refletida na resposta espectral do dispositivo.

2 Estrangulamento na região sensorial (W_t) Além da variação da extensão angular da área de detecção, foi introduzida uma modificação estrutural local denominada *estrangulamento*, que consiste na redução controlada da largura do guia na região exposta ao analito. Enquanto o restante do anel mantém a largura nominal do guia, a região sensora assume valores menores definidos por W_t . A redução da largura promove menor confinamento lateral do modo óptico, aumentando a fração de campo evanescente na janela de detecção e, conseqüentemente, intensificando a interação luz-analito. Entretanto, essa modificação também pode influenciar as perdas ópticas e o fator-Q, justificando sua análise conjunta com o parâmetro W_L .

A metodologia foi organizada para avaliar o dispositivo em uma matriz bidimensional de configurações (W_L, W_t), permitindo isolar o impacto individual de cada parâmetro e investigar seus efeitos combinados. Essa abordagem assegura comparabilidade entre diferentes geometrias e estabelece uma base sistemática para a análise das métricas de sensibilidade e estabilidade térmica apresentadas nos capítulos seguintes.

3.2 Ferramentas de simulação e estratégia computacional

As etapas de modelagem, simulação e análise foram conduzidas por meio de uma estratégia computacional híbrida, integrando (i) ferramentas de simulação eletromagnética para obtenção das respostas ópticas do dispositivo e (ii) uma camada de automação e processamento de dados em *Python*, responsável pela organização, análise e otimização dos resultados.

Essa arquitetura computacional foi adotada com o objetivo de conciliar fidelidade física na representação dos fenômenos ópticos com reprodutibilidade e escalabilidade na

varredura do espaço de projeto. A separação entre a etapa de simulação e a etapa de pós-processamento permitiu estruturar um fluxo rastreável, no qual cada geometria simulada é associada às respectivas métricas extraídas.

3.2.1 Simulação eletromagnética e modelagem do dispositivo

As simulações do dispositivo foram realizadas com o auxílio de ferramentas comerciais de modelagem eletromagnética e de dispositivos fotônicos integrados, com destaque para o *RSoft*, disponível no Laboratório de Pesquisa em Dispositivos (LPD) da Universidade Estadual de Campinas. Esse software disponibiliza diferentes módulos, permitindo selecionar o método mais adequado conforme o nível de detalhe físico requerido e o custo computacional admissível em cada etapa do estudo.

Foram utilizados principalmente dois módulos:

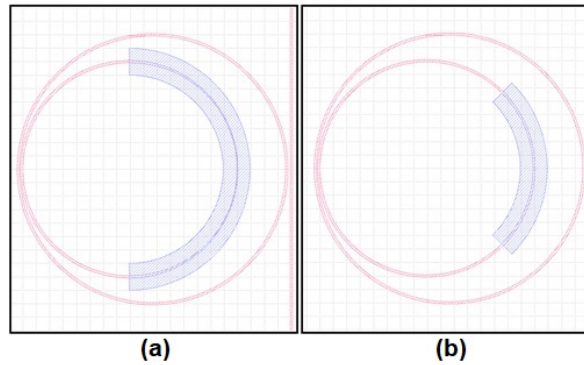
- **FullWAVE:** baseado no método FDTD, empregado para simulações eletromagnéticas vetoriais completas. Esse módulo foi utilizado na obtenção da resposta espectral de estruturas ressonantes, permitindo capturar efeitos de acoplamento, interferência e redistribuição modal em geometrias complexas com alto grau de fidelidade física.

- **BeamPROP:** baseado no *Beam Propagation Method* (BPM), utilizado em análises auxiliares de propagação e em etapas exploratórias nas quais aproximações de menor custo computacional eram suficientes para orientar decisões preliminares de projeto. No contexto deste trabalho, o módulo foi empregado para obtenção de propriedades modais dos guias, incluindo a determinação dos índices de refração efetivos utilizados na construção do modelo reduzido e na análise comparativa entre diferentes configurações geométricas.

O desenho geométrico e a geração dos *layouts* foram realizados no ambiente CAD *KLayout*, conforme ilustrado na Figura 17. Essa etapa garantiu consistência dimensional entre as diferentes variações do dispositivo e permitiu a geração sistemática das combinações geométricas investigadas (por exemplo, diferentes valores de W_L e W_t , mostrados nas Figuras 16(a) e 16(b)).

Os *layouts* gerados foram exportados para o formato *GDSII* e integrados ao ambiente de simulação, assegurando rastreabilidade entre a estrutura projetada e os resultados obtidos. Essa integração foi fundamental para manter coerência entre parâmetros geométricos definidos no CAD e aqueles utilizados nas simulações eletromagnéticas.

Figura 16 – Modelos de layout do dispositivo em ambiente CAD (KLayout)



a) Layout do sensor para estrangulamento de 400 nm em uma parcela do guia de onda que forma o anel e com uma área de detecção de 50% do anel interno; b) Layout do sensor para estrangulamento de 200 nm e área de detecção de 25% do anel interno. Fonte: Autor

3.2.2 Redução dimensional 3D-2D por método do índice efetivo

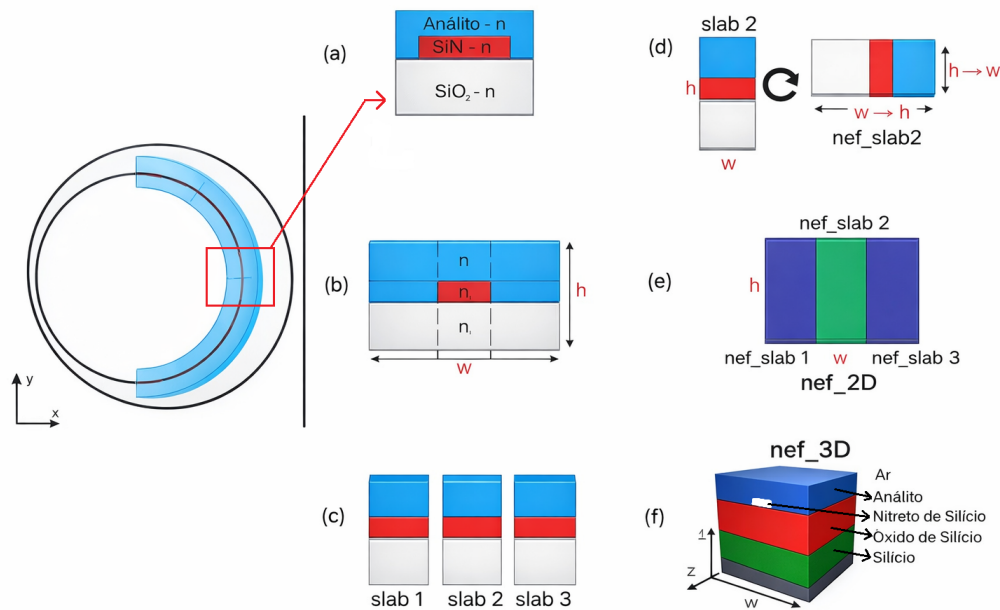
Devido ao elevado custo computacional associado a simulações tridimensionais completas, foi adotada uma aproximação baseada no EIM aplicada a guias dielétricos retangulares. Essa abordagem, discutida no Capítulo 2, permite representar uma configuração tridimensional por um modelo bidimensional equivalente, preservando coerência física suficiente para análise comparativa e otimização estrutural.

O procedimento metodológico seguiu as seguintes etapas:

1. Definição da seção transversal tridimensional para cada região relevante do dispositivo (por exemplo, guia recoberto por SiO_2 e guia em contato com analito Fig. 17(a));
2. Decomposição da seção transversal em estruturas do tipo *slab*, representando as variações verticais do índice de refração (Fig. 17(b)-(c));
3. Cálculo modal dos *slabs* ao longo do intervalo espectral de interesse, obtendo índices efetivos intermediários (Fig. 17(d));
4. Construção de um modelo bidimensional equivalente (Fig. 17(e)), no qual os índices efetivos calculados substituem a estrutura tridimensional original (Fig. 17(f)).

Antes da adoção sistemática dessa redução, a compatibilidade da aproximação foi verificada por meio de comparações com simulações de referência, contemplando diferentes condições de recobrimento do guia: (i) guia recoberto por SiO_2 , (ii) guia em contato com analito primário (analito₁) e (iii) guia em contato com analito secundário (analito₂) que serão apresentados nas próximas sessões.

Figura 17 – Etapas para a aplicação do método do índice efetivo na área de detecção do sensor



(a) Layout do sensor com estrangulamento de 400 nm em uma parcela do guia que compõe o anel interno e área de detecção correspondente a 50% do perímetro do anel interno; (b) Layout do sensor com estrangulamento de 200 nm e área de detecção correspondente a 25% do perímetro do anel interno. Fonte: Autor

Após essa etapa de verificação, o modelo bidimensional foi adotado como base para viabilizar a varredura extensiva do espaço de projeto, reduzindo significativamente o tempo computacional sem comprometer a análise comparativa entre configurações.

3.2.3 Camada computacional em Python: automação, dados e otimização

O *Python* foi empregado como camada central de orquestração do fluxo de trabalho, permitindo integrar modelagem analítica, organização de dados, extração de métricas e análise comparativa das configurações simuladas. Sua utilização foi estruturada em cinco frentes principais:

1. **Modelagem matemática do dispositivo** – Implementação do modelo analítico de transmissão do sensor, utilizado para simular tendências espectrais, orientar escolhas iniciais de parâmetros (como raios e condições de acoplamento) e reduzir a dependência de simulações numéricas de alto custo em fases exploratórias.

2. **Gerenciamento do banco de dados das simulações** – Criação de uma estrutura padronizada de diretórios e metadados, associando cada execução às respectivas condições geométricas e físicas (por exemplo, W_L , W_t , temperatura e índice do analito). Essa organização permitiu consolidar os resultados em arquivos estruturados, garantindo rastreabilidade e possibilidade de reprocessamento.
3. **Análise de dados e extração de métricas** – Desenvolvimento de rotinas para leitura automática dos espectros de transmissão, filtragem e normalização dos sinais, identificação das características relevantes e cálculo das métricas de desempenho. Nessa etapa foram obtidos deslocamentos espectrais, diferenças entre respostas e parâmetros utilizados na quantificação da sensibilidade e da estabilidade térmica.
4. **Detecção automatizada de ressonâncias** – Implementação de algoritmos numéricos para identificação automática das ressonâncias associadas ao anel de detecção. Considerando a presença de múltiplas ressonâncias no espectro e sua variação com temperatura e índice do analito, foram adotados critérios de busca e correspondência para localizar mínimos/picos, rejeitar detecções espúrias e garantir a consistência no pareamento das ressonâncias ao longo das diferentes condições simuladas.
5. **Varredura paramétrica e visualização** – Execução sistemática de varreduras no espaço (W_L , W_t), acompanhadas da geração de gráficos comparativos, espectros sobrepostos e curvas de desempenho. Essa etapa permitiu investigar o compromisso entre aumento de interação evanescente (sensibilidade) e mitigação da dependência termo-óptica (estabilidade), apoiando decisões de otimização estrutural.

De forma integrada, essa camada em *Python* atuou como o componente responsável por transformar os resultados brutos das simulações em informação quantitativa comparável entre configurações. Em particular, a automação da detecção de ressonâncias e o cálculo sistemático das métricas permitiram avaliar o desempenho do sensor em diferentes temperaturas e condições de analito, sustentando a análise do *trade-off* entre aumento de interação evanescente (sensibilidade) e mitigação da dependência termo-óptica (estabilidade).

A adoção conjunta de simuladores eletromagnéticos e automação em *Python* foi essencial para viabilizar a exploração do espaço de projeto. Por um lado, as simulações numéricas fornecem a fidelidade necessária para representar acoplamentos e ressonâncias em geometrias complexas; por outro, a etapa de pós-processamento automatizado permite conduzir varreduras extensas, reduzir erros manuais, padronizar a extração de métricas e acelerar ciclos de otimização estrutural.

3.3 Fases do projeto

Para assegurar rastreabilidade, consistência metodológica e reprodutibilidade dos resultados, o desenvolvimento do sensor foi estruturado em fases sequenciais. Cada fase corresponde a um conjunto bem definido de decisões técnicas, permitindo separar modelagem conceitual, definição de materiais, implementação numérica e construção dos modelos ópticos dos analitos.

3.3.1 Fase 1 – Modelagem Matemática

Na fase inicial foi desenvolvida a modelagem matemática da PM com o objetivo de representar, de forma controlada e com baixo custo computacional, o comportamento espectral esperado do sistema.

Utilizando a linguagem *Python*, implementou-se a expressão analítica de transmissão do dispositivo (Equação 44), considerando um microring externo acoplado a uma ou mais cavidades internas, considerando acoplamento óptico apenas entre a cavidade externa e as cavidades internas, desconsiderando acoplamento direto entre cavidades internas. Essa hipótese simplificadora foi adotada para manter consistência com a arquitetura física proposta e reduzir complexidade analítica desnecessária.

Essa etapa teve como objetivos práticos: (i) prever o posicionamento e a densidade de ressonâncias, (ii) orientar a escolha inicial de raios e acoplamentos, e (iii) fornecer parâmetros iniciais realistas para as simulações eletromagnéticas. Dessa forma, a modelagem analítica atuou como etapa exploratória, reduzindo dependência inicial de simulações numéricas de alto custo.

O dispositivo projetado em plataforma SiNOI utiliza guias de onda com largura de 1000 nm de largura e 400 nm de altura, e microrresonadores com raios $R_1=100\mu\text{m}$ e $R_2=80\mu\text{m}$, com um espaçamento entre guia de onda e microrresonador (Gap1) de 600 nm e um espaçamento entre microrresonadores (Gap2) de 500 nm (parâmetros da Figura 15).

3.3.2 Fase 2 – Seleção e caracterização de materiais

Na segunda fase foram definidos os materiais estruturais do sensor e caracterizadas suas propriedades ópticas relevantes, com ênfase no índice de refração e na dependência térmica. A escolha dos materiais foi orientada por dois critérios principais:

1. representar adequadamente os fenômenos físicos envolvidos (confinamento modal, campo evanescente e resposta ressonante);
2. manter compatibilidade com plataformas de fabricação disponíveis em *foundries*, respeitando pilhas de camadas e restrições típicas de processo.

Optou-se por empregar guias de onda em nitreto de silício (Si_3N_4) sobre isolante (SiNOI). Embora o silício apresente maior contraste de índice e permita dispositivos mais compactos, seu coeficiente termo-óptico mais elevado tende a amplificar deslocamentos espectrais induzidos por temperatura. Em sensores ressonantes, essa característica pode dificultar a distinção entre variações do analito e efeitos térmicos. Assim, a escolha do Si_3N_4 foi motivada pela menor sensibilidade térmica intrínseca, favorecendo robustez térmica sem comprometer a operação na faixa de 1550nm. Adicionalmente, plataformas em Si_3N_4 apresentam baixas perdas de propagação e ampla disponibilidade comercial.

Devido ao objetivo de avaliar os sensores na faixa espectral de 1460-1620nm e no intervalo térmico de 20-40°C, é desejável dispor de um modelo do analito cuja dispersão $n(\lambda)$ e cuja dependência termo-óptica $n(T)$ sejam conhecidas de forma consistente e contínua em todo o domínio de interesse. Entretanto, a literatura não fornece até o presente momento desse estudo, de maneira unificada, um conjunto de dados de índice de refração da água simultaneamente em função do comprimento de onda e da temperatura, obtido sob o mesmo arcabouço experimental/teórico (mesmo modelo, mesma referência metrológica e mesma metodologia), o que inviabiliza a construção direta de uma superfície $n(\lambda, T)$ confiável para simulações comparativas.

Para contornar essa limitação e garantir reprodutibilidade e previsibilidade no estudo paramétrico, foi definido um material virtual análogo à água (Analito_1), construído a partir de informações teóricas e experimentais disponíveis na literatura, impondo-se continuidade e coerência física no intervalo de λ e T considerado. Essa abordagem permite controlar explicitamente a superfície $n(\lambda, T)$, reduzindo ambiguidades associadas a combinações de fontes heterogêneas e assegurando que as variações observadas nas ressonâncias sejam atribuídas, de forma rastreável, ao dispositivo (geometria/arquitetura) e não a inconsistências do modelo do analito.

Com base no Analito_1 , definiu-se o Analito_2 como uma solução aquosa obtida pela adição de baixa concentração de EG (1.25%), utilizada como uma perturbação controlada do índice de refração. A escolha dessa concentração foi fundamentada nos valores de sensibilidade reportados em Moras et al. (2022) e em simulações preliminares, as quais indicaram que tal nível de concentração produz um deslocamento espectral mensurável e consistente ao longo das diferentes combinações geométricas investigadas. Ademais, por se tratar de uma fração volumétrica reduzida, a contribuição do EG pode ser tratada, em primeira aproximação, como um termo predominantemente aditivo em n , ao passo que a dispersão e a dependência térmica do sistema permanecem governadas pelo material base (Analito_1). Dessa forma, o EG funciona como um agente de contraste refratométrico que desloca as ressonâncias de detecção sem modificar de maneira significativa o comportamento $n(\lambda, T)$ previamente estabelecido, permitindo a extração objetiva da sensibilidade dos dispositivos a partir da variação conhecida Δn entre Analito_1 e Analito_2 .

3.3.2.1 Modelagem óptica do Analito base: construção de $n(\lambda, T)$

O objetivo desta etapa foi construir uma expressão $n(\lambda, T)$ capaz de representar uma substância aquosa análoga à água na faixa espectral utilizada nas simulações (1460 nm a 1620 nm) e em temperaturas próximas às condições ambiente analisadas. Embora existam diversos estudos reportando a variação do RI da água com a temperatura ou com o comprimento de onda separadamente, são menos frequentes os trabalhos que descrevem explicitamente a dependência conjunta desses dois parâmetros.

Entre os modelos disponíveis, destaca-se o estudo de Bashkatov e Genina (2003), que propõe uma modelagem bidimensional do RI em função de λ e T . No entanto, ao comparar essa formulação com dados experimentais clássicos de Segelstein (1981), observou-se melhor concordância principalmente na região entre aproximadamente 500 nm e 1250 nm, com divergências mais pronunciadas em comprimentos de onda maiores.

Como o presente trabalho se concentra na janela espectral de 1460 nm a 1620 nm, tornou-se necessário ajustar a modelagem para a região efetivamente utilizada nas simulações. Para isso, foram adotadas como referências: (i) a formulação teórica para água a 20°C apresentada por Kedenburg et al. (2012); e (ii) os dados experimentais para água a 25°C reportados por Segelstein (1981). A partir dessas duas referências, buscou-se construir uma aproximação para $n(\lambda, T)$ em formato similar ao adotado por Bashkatov e Genina (2003), porém com melhor aderência na faixa espectral de interesse deste estudo.

O procedimento metodológico foi estruturado nas seguintes etapas:

1. Seleção do intervalo espectral comum entre as referências, priorizando a região de 1000 nm a 2000 nm;
2. Ajuste de cada conjunto de dados (água a 20°C e água a 25°C) por meio de um polinômio de terceiro grau em função de λ ;
3. Comparação dos coeficientes obtidos e construção de uma parametrização simples em temperatura, assumindo dependência linear dos coeficientes no intervalo térmico investigado;
4. Síntese de uma expressão final para o RI do Analito base na forma:

$$n(\lambda, T) = A(T)\lambda^3 + B(T)\lambda^2 + C(T)\lambda + D(T), \quad (79)$$

em que cada coeficiente segue o modelo linear:

$$X(T) = aT + b, \quad X \in \{A, B, C, D\}. \quad (80)$$

A superfície $n(\lambda, T)$ resultante apresentou comportamento contínuo e fisicamente coerente na região espectral de interesse do trabalho. Ressalta-se, contudo, que esse modelo não pretende reproduzir a água real de forma estrita; trata-se de um material virtual

distinto, construído para exibir índices de refração e tendências de dispersão semelhantes às da água em condições próximas de 25°C. No intervalo espectral de 1000-2000nm o material proposto preserva a mesma ordem de grandeza de n e o mesmo comportamento qualitativo observado para a água, assegurando previsibilidade e consistência para as análises realizadas. Os valores encontrados para esse material seguindo a Equação 79 são apresentados na Tabela 1.

Tabela 1 – Coeficientes em temperatura do Analito Base

Coeficiente	Coef. angular a	Coef. linear b
$A(t) [\mu\text{m}^{-3}]$	-8.76866×10^{-4}	4.17475×10^{-3}
$B(t) [\mu\text{m}^{-2}]$	4.01715×10^{-3}	-3.51861×10^{-2}
$C(t) [\mu\text{m}^{-1}]$	-6.42553×10^{-3}	6.21746×10^{-2}
$D(t) [-]$	2.66126×10^{-3}	1.30626×10^0

3.3.2.2 Modelagem da solução aquosa de etilenoglicol

Para a solução aquosa de EG diluído, utilizou-se como base o modelo proposto por Saunders et al. (2016), no qual é estabelecida uma relação matemática entre a concentração em massa da solução e oRI em função do comprimento de onda.

A aplicação desse modelo ao presente estudo exigiu uma etapa adicional de compatibilização, uma vez que as simulações precisam manter consistência tanto com a referência (Analito₁) previamente adotada quanto com a faixa espectral considerada.

A estratégia adotada consistiu em ajustar os parâmetros do modelo de Saunders et al. (2016) impondo como condição de coerência que, ao se fazer a concentração de EG tender a zero, a expressão resultante reproduzisse a curva $n(\lambda, T)$ de Analito₁ em 20°C obtida na etapa anterior. Dessa forma, garantiu-se continuidade entre o modelo da solução.

Com essa abordagem, obteve-se uma descrição consistente dos analitos na janela espectral e térmica investigada, permitindo que as simulações do sensor fossem conduzidas com maior confiabilidade na extração das métricas de sensibilidade ao índice de refração e estabilidade térmica.

3.3.3 Fase 3 – Simulações do modelo matemático e ajuste de parâmetros globais

Com os materiais definidos na fase anterior, iniciou-se a simulação do modelo matemático previamente parametrizado, com o objetivo de obter uma visão rápida do comportamento espectral do dispositivo e, a partir disso, estabelecer valores iniciais consistentes para o projeto físico.

Nessa etapa, os parâmetros de transmissão obtidos na Fase 1 foram implementados e avaliados considerando as propriedades ópticas reais dos materiais selecionados.

Isso permitiu explorar de forma eficiente o impacto de variáveis como raios dos anéis, coeficientes de acoplamento e perdas efetivas sobre o posicionamento, a profundidade e o espaçamento das ressonâncias. O foco foi produzir uma resposta espectral coerente na faixa de operação do sensor, especialmente na região em torno de 1550 nm.

Além do ajuste dos parâmetros físicos, esta fase incluiu a definição de critérios práticos de seleção, adotados para orientar a transição do modelo matemático para as simulações eletromagnéticas do dispositivo. Entre esses critérios destacam-se: (i) a presença de ressonâncias bem definidas e com contraste suficiente para permitir rastreamento confiável ao longo das variações de temperatura e o índice do analito; (ii) separação espectral adequada entre ressonâncias, evitando ambiguidades na correspondência entre modos; e (iii) compatibilidade com restrições de fabricação, garantindo geometrias factíveis e gaps realizáveis.

Adicionalmente, por se tratar de um estudo fortemente baseado em simulações numéricas, esta fase incorporou uma etapa de investigação e ajuste dos parâmetros computacionais do ambiente de simulação, com o objetivo de assegurar estabilidade, reprodutibilidade e viabilidade computacional. Foram analisados e ajustados, por exemplo, o número de iterações necessário para convergência, os critérios de parada e os parâmetros de discretização espacial e temporal. Em particular, a definição da malha (resolução global e refinamento local em regiões críticas, como acopladores e interfaces de alto contraste de índice) foi realizada de modo a equilibrar custo computacional e fidelidade física. Essa etapa foi essencial para evitar artefatos numéricos que poderiam mascarar deslocamentos espectrais de pequena magnitude, os quais são fundamentais para o cálculo de sensibilidade e estabilidade térmica.

Como resultado, a Fase 3 forneceu simultaneamente (i) um conjunto de parâmetros físicos iniciais consistentes para o desenho do sensor e (ii) uma configuração numérica ajustada do ambiente de simulação, servindo como base para as varreduras paramétricas e para as simulações eletromagnéticas completas do dispositivo descritas na fase seguinte.

3.3.4 Fase 4 – Simulação eletromagnética do dispositivo completo

A quarta fase consistiu na simulação eletromagnética do dispositivo completo, considerando suas variações geométricas e condições de operação. Nessa etapa, o modelo físico foi implementado no ambiente de simulação com base nos parâmetros definidos nas fases anteriores. O procedimento foi estruturado nos seguintes passos:

1. Otimização dos gaps (Gap1 e Gap2):

Realizou-se o ajuste inicial dos espaçamentos entre o guia de onda e os anéis (Gap1), bem como entre os anéis acoplados (Gap2), com o objetivo de estabelecer condições adequadas de acoplamento óptico. Essa etapa buscou garantir ressonâncias com

profundidade e contraste suficientes para permitir rastreamento confiável ao longo das variações de temperatura e índice do analito.

2. Geração do layout e preparação da simulação:

As geometrias correspondentes a cada configuração foram construídas no *KLayout*, assegurando consistência dimensional entre as variações de W_L e W_t . Os layouts foram então exportados e integrados ao ambiente de simulação eletromagnética, garantindo correspondência direta entre o projeto geométrico e o modelo numérico implementado.

3. Varredura espectral controlada:

As simulações foram realizadas no intervalo espectral de 1460 nm a 1620 nm, abrangendo a região de operação do sensor em torno de 1550 nm. Essa faixa foi escolhida de modo a incluir múltiplas ressonâncias e permitir a observação clara de deslocamentos espectrais associados a variações térmicas e de índice do analito, além de ser uma faixa espectral disponível para caracterização óptica nos laboratórios parceiros.

4. Variação sistemática de W_L e W_t :

Para cada combinação geométrica da matriz (W_L, W_t) , foram obtidas respostas espectrais em diferentes temperaturas e para cada condição de analito considerada. Essa abordagem possibilitou comparar diretamente o impacto individual e combinado das variáveis geométricas sobre o desempenho do sensor.

5. Extração de métricas de desempenho:

A partir dos espectros simulados, foram identificadas as ressonâncias associadas à cavidade de detecção, bem como suas correspondentes na cavidade de referência. Em seguida, foram calculados os deslocamentos espectrais entre diferentes temperaturas e condições de analito, permitindo quantificar sensibilidade ao índice de refração e estabilidade térmica.

Essa fase consolidou a transição do modelo analítico para a representação eletromagnética completa do dispositivo, fornecendo os dados necessários para a análise comparativa entre configurações geométricas e para a identificação de tendências no espaço de projeto.

3.3.5 Fase 5 – Construção do conjunto de variações do layout e análise automatizada

A fase anterior permitiu consolidar tanto as técnicas de simulação quanto o fluxo de pós-processamento, estabelecendo um procedimento reproduzível para extração de métricas. Com a metodologia validada, iniciou-se a etapa principal de varredura paramétrica

do estudo, na qual foram construídas múltiplas versões do layout do dispositivo, cobrindo sistematicamente diferentes combinações de W_L , W_t e temperatura.

Essa etapa correspondeu ao maior esforço computacional do projeto, resultando em um volume significativo de arquivos e dados de simulação. Diante disso, tornou-se necessária a implementação de um fluxo de análise automatizado, capaz de garantir consistência, rastreabilidade e reprodutibilidade na extração das métricas de desempenho.

Para viabilizar a análise em larga escala e evitar inconsistências associadas ao processamento manual, foi empregada uma cadeia de pós-processamento automatizada em *Python*, cuja base metodológica havia sido estruturada e validada nas fases anteriores. O fluxo automatizado foi projetado para transformar os resultados brutos das simulações em informações quantitativas comparáveis entre diferentes configurações geométricas, contemplando as seguintes operações:

❑ **Leitura e organização automática dos resultados:**

Os arquivos gerados pelo simulador foram identificados e organizados conforme uma estrutura padronizada de diretórios, associando cada execução aos respectivos metadados (valores de W_L , W_t , temperatura e condição de analito). Essa organização assegurou rastreabilidade e possibilidade de reprocessamento sistemático.

❑ **Padronização e consolidação de dados:**

Os resultados espectrais foram convertidos para formatos uniformes e armazenados em estruturas consistentes, reduzindo redundâncias e permitindo análises comparativas sem necessidade de repetição das simulações, quando aplicável.

❑ **Extração de ressonâncias e deslocamentos espectrais:**

Foram implementadas rotinas para identificação automática das ressonâncias associadas às cavidades de detecção e referência. Para cada espectro, estimaram-se os comprimentos de onda centrais das ressonâncias e calcularam-se os deslocamentos espectrais entre diferentes condições de temperatura e/ou analito.

❑ **Cálculo da sensibilidade por método diferencial:**

A sensibilidade às variações do RI foi calculada a partir da medida diferencial entre as respostas de detecção e referência, reduzindo a influência de deslocamentos espectrais globais e de variações térmicas comuns às duas cavidades. Essa abordagem permitiu isolar de forma mais robusta a contribuição associada à variação do analito.

❑ **Cálculo da estabilidade térmica:**

A estabilidade térmica foi quantificada como a taxa de variação da medida diferencial em função da temperatura, possibilitando comparar de maneira uniforme o comportamento térmico das diferentes geometrias no espaço (W_L , W_t).

Como resultado, a Fase 5 produziu um conjunto estruturado de curvas e métricas, incluindo deslocamentos espectrais, sensibilidade e estabilidade térmica, para cada variação de layout simulada. Esse conjunto de dados permitiu estabelecer comparações diretas entre configurações e fundamentou a identificação de geometrias com melhor compromisso entre desempenho sensorial e mitigação da dependência térmica.

3.3.6 Iterações do fluxo metodológico e adaptação a *foundries*

Embora as fases metodológicas descritas anteriormente sejam apresentadas de forma sequencial para fins de organização e clareza, o desenvolvimento do sensor ocorreu de maneira cíclica e iterativa. Ao longo do projeto, houve o interesse em viabilizar a fabricação dos dispositivos estudados, o que exigiu adaptar o desenho e a parametrização do sensor a diferentes *foundries* e respectivos PDKs.

Cada *foundry* impõe restrições específicas, tais como materiais disponíveis (incluindo variações na pilha de camadas dielétricas), espessuras de filmes, valores de índice efetivo, limites mínimos de gaps e larguras de guia, além de regras de projeto (*design rules*). Dessa forma, a migração entre plataformas frequentemente implicou alterações na estrutura geométrica e nas condições de simulação. Conseqüentemente, partes do fluxo metodológico precisaram ser revisadas para preservar a consistência física das comparações e manter coerência com as limitações tecnológicas de fabricação.

Sempre que houve mudança de *foundry* e, portanto, alteração de materiais, pilha tecnológica ou parâmetros de processo, tornou-se necessário reexecutar as seguintes etapas:

❑ **Fase 2 (Seleção e caracterização de materiais):**

Atualização dos índices de refração, coeficientes termo-ópticos e pilha de camadas conforme especificações do novo PDK.

❑ **Fase 3 (Simulações do modelo matemático e ajuste de parâmetros globais):**

Recalibração do modelo analítico para refletir as novas condições de confinamento modal e perdas efetivas, bem como ajustes preliminares de raios e coeficientes de acoplamento.

❑ **Fase 4 (Simulação eletromagnética do dispositivo completo):**

Reotimização de parâmetros geométricos dependentes do processo, como gaps, larguras de guia e condições de acoplamento, além de reavaliação da resposta espectral na faixa de interesse.

❑ **Parte da Fase 5 (Variações de layout e análise automatizada):**

Regeneração do conjunto de layouts e reprocessamento do banco de dados de simulações, garantindo que as métricas extraídas — ressonâncias, deslocamentos es-

pectrais, sensibilidade e estabilidade térmica — fossem consistentes com o novo conjunto de restrições tecnológicas.

Essa dinâmica caracterizou um ciclo de desenvolvimento estruturado da seguinte forma:

Definição da plataforma → atualização de materiais → recalibração do modelo → simulação do dispositivo → análise e extração de métricas → ajuste geométrico e de acoplamentos.

A incorporação dessa etapa iterativa foi essencial por dois motivos principais. Em primeiro lugar, assegurou que as configurações investigadas permanecessem fabricáveis e aderentes a restrições reais de processo, evitando otimizações que seriam inviáveis em implementação física. Em segundo lugar, permitiu avaliar a robustez do método de otimização frente a variações tecnológicas, demonstrando que o procedimento de análise de sensibilidade e estabilidade térmica pode ser reaplicado de forma consistente quando a plataforma de fabricação é alterada.

Por fim, essa estratégia iterativa também orientou decisões práticas de projeto, favorecendo a seleção de geometrias com maior tolerância a variações de processo e, conseqüentemente, melhor compromisso entre desempenho óptico e viabilidade de fabricação.

3.4 Máscaras de fabricação

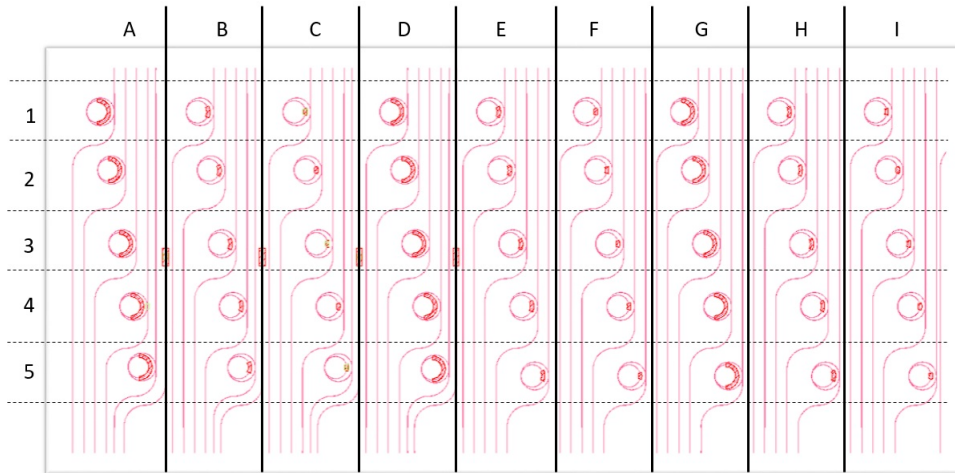
Com o objetivo de avaliar de forma sistemática o desempenho do sensor sob variações geométricas compatíveis com tolerâncias de fabricação, foi projetada uma máscara contendo um conjunto estruturado de variações do dispositivo, totalizando 45 configurações distintas.

A organização da máscara seguiu uma matriz principal disposta em blocos, com colunas identificadas por letras e linhas identificadas por números, conforme ilustrado na Figura 18. Essa organização permitiu distribuir as diferentes combinações de parâmetros geométricos de maneira sistemática e rastreável.

A estratégia adotada teve dois objetivos principais: (i) reduzir o número de tape-outs necessários para varrer parâmetros críticos do projeto, concentrando múltiplas variações em uma única execução de fabricação; (ii) permitir comparação direta entre dispositivos que diferem em apenas um parâmetro por vez, isolando o impacto individual de cada variável geométrica sobre as métricas de desempenho.

Essa abordagem possibilita avaliar experimentalmente a robustez do sensor frente a variações de processo e fornece base estruturada para correlação entre simulação e fabricação.

Figura 18 – Distribuição dos dispositivos na máscara de fabricação



Organização da máscara de fabricação do sensor contendo diferentes combinações de parâmetros geométricos investigados neste estudo. A matriz contempla variações sistemáticas de layout distribuídas em blocos, permitindo análise comparativa entre configurações sob diferentes cenários de fabricação. Fonte: Autor

3.4.1 Estratégia de variação e divisão em blocos

A máscara foi estruturada como uma varredura quase ortogonal de três parâmetros geométricos considerados mais influentes na resposta do sensor:

1. os gaps de acoplamento entre as estruturas (G_1 e G_2);
2. a área de detecção (W_L , em graus);
3. o estrangulamento do guia (W_t).

Esses parâmetros estão indicados esquematicamente na Figura 15. A organização em blocos permitiu isolar o impacto individual de cada variável, ao mesmo tempo em que viabilizou a análise combinada entre elas.

1. Variação dos gaps (G_1 e G_2)

Os dispositivos foram agrupados em três conjuntos principais, cada um com uma configuração fixa de gaps:

- ❑ Conjunto 1: $G_1 = 0,6 \mu\text{m}$ e $G_2 = 0,5 \mu\text{m}$;
- ❑ Conjunto 2: $G_1 = 0,5 \mu\text{m}$ e $G_2 = 0,5 \mu\text{m}$;
- ❑ Conjunto 3: $G_1 = 0,4 \mu\text{m}$ e $G_2 = 0,5 \mu\text{m}$.

Essa escolha permite observar o impacto do acoplamento (e, conseqüentemente, da condição de acoplamento crítico e do fator de qualidade) sobre as ressonâncias, bem como a sensibilidade do projeto a variações típicas de litografia e corrosão.

2. Variação da área de detecção (W_L)

Dentro de cada conjunto de gaps, foram considerados três valores de W_L : 90° , 45° , 30° . O parâmetro W_L representa o arco do anel interno efetivamente exposto ao analito, correspondendo à região de detecção. A escolha desses valores permite investigar diferentes frações do perímetro exposto, influenciando diretamente o comprimento efetivo de interação luz-analito.

3. Variação do estrangulamento do guia (W_t)

Para cada combinação (G_1 , G_2 , W_L), foram implementadas variações no estrangulamento W_t ao longo das linhas do bloco correspondente. A primeira linha de cada bloco não apresenta estrangulamento, mantendo a largura nominal do guia, isto é, $W_t = 1,0 \mu\text{m}$, com altura fixa de $0,4 \mu\text{m}$. As linhas subsequentes reduzem progressivamente a largura do guia segundo:

$$W_t \in \{0.6, 0.5, 0.4, 0.3\} \mu\text{m} \quad (81)$$

Essa variação permite analisar o impacto do aumento da fração de campo evanescente na região sensora, bem como seus efeitos sobre perdas e fator de qualidade.

A matriz principal mostrada na Figura 18 pode, portanto, ser descrita como:

$$N_{\text{matriz}} = N_{(G_1, G_2)} \times N_{(W_L)} \times N_{(W_t)} = 3 \times 3 \times 5 = 45 \text{ dispositivos.} \quad (82)$$

Essa estrutura assegura uma exploração sistemática do espaço de projeto, permitindo comparar geometrias que diferem em apenas um parâmetro por vez, ao mesmo tempo em que viabiliza a análise combinada entre acoplamento, área de detecção e estrangulamento.

3.4.2 Nomenclatura adotada

Para facilitar a identificação dos dispositivos durante as medições experimentais e a comparação entre amostras, foi adotada uma nomenclatura do tipo Letra-Número. Nesse sistema:

- a letra identifica o bloco, correspondente a uma combinação fixa de G_1 , G_2 e W_L ;
- o número identifica a linha, correspondente ao valor específico do estrangulamento W_t .

Assim, um dispositivo rotulado como D3, por exemplo, refere-se ao bloco D (com os valores de G_1 , G_2 e W_L definidos para esse bloco) e à linha 3 (valor de W_t associado à terceira linha da matriz). A Tabela 2 apresenta o mapeamento entre os blocos e os parâmetros geométricos fixos correspondentes. De forma análoga, a Tabela 3 relaciona as linhas da matriz aos respectivos valores de estrangulamento W_t .

Tabela 2 – Parâmetros dos blocos da máscara de fabricação

Bloco	W_L [°]	G_1 [μm]	G_2 [μm]
A	90	0.6	0.5
B	45	0.6	0.5
C	30	0.6	0.5
D	90	0.5	0.5
E	45	0.5	0.5
F	30	0.5	0.5
G	90	0.4	0.5
H	45	0.4	0.5
I	30	0.4	0.5

Tabela 3 – Parâmetros das linhas da máscara de fabricação

Linha	1	2	3	4	5
W_t [μm]	1.0	0.6	0.5	0.4	0.3

3.4.3 Motivação da estratégia

A escolha de organizar as variações geométricas em blocos e linhas foi motivada por critérios práticos de fabricação, caracterização experimental e automação da análise. Do ponto de vista experimental, a organização em matriz (bloco/linha) reduz ambiguidades na identificação visual dos dispositivos no chip e minimiza erros de rastreabilidade durante as etapas de medição. Essa padronização facilita a correlação entre posição física na máscara, parâmetros geométricos e resultados experimentais. Do ponto de vista metodológico, a estrutura matricial também simplifica a automação dos processos de análise, permitindo associar diretamente os dados medidos ou simulados à combinação específica de parâmetros (G_1 , G_2 , W_L , W_t). Em conjunto, a máscara viabiliza uma análise comparativa direta entre variações do sensor em um mesmo tape-out, fornecendo subsídios objetivos para a seleção de geometrias com melhor compromisso entre sensibilidade, estabilidade térmica, repetibilidade e viabilidade de fabricação.

3.5 Critérios de comparação e tomada de decisão

Com o intuito de analisar a influência do tamanho da área de detecção na resposta espectral do dispositivo, foram avaliados dois casos com alterações isoladas: (i) variação do tamanho da área de detecção e (ii) variação do estrangulamento do guia dentro da área de detecção.

Para a análise da área de detecção foram escolhidos três dispositivos: D1, E1 e F1. O dispositivo D1 possui $W_L = 90^\circ$, o dispositivo E1 possui $W_L = 45^\circ$ e o dispositivo F1 possui $W_L = 30^\circ$. Todos os dispositivos selecionados estão na linha 1 da máscara de fabricação, o que significa que não apresentam estrangulamento do anel interno ($W_t = 1,0 \mu\text{m}$).

A escolha desses dispositivos permite isolar o efeito da área de detecção na resposta do sensor, mantendo constantes os demais parâmetros construtivos. A sensibilidade foi avaliada a partir da resposta espectral dos dispositivos a dois analitos abordados na sessão 3.3.2. Em razão do elevado tempo computacional das simulações e considerando a conhecida linearidade da resposta no intervalo reduzido de concentração investigado, optou-se pela utilização de apenas dois pontos para estimativa da sensibilidade. A estabilidade térmica, por sua vez, foi analisada por meio da resposta espectral dos dispositivos em diferentes temperaturas, no intervalo de 20°C a 40°C.

Para a análise do estrangulamento foram escolhidos cinco dispositivos, todos pertencentes ao bloco E (E1, E2, E3, E4 e E5). A escolha do bloco E deve-se ao fato de que a área de detecção utilizada é de $W_L = 45^\circ$, condição na qual se espera, com base em estudos anteriores, uma sensibilidade intermediária e uma melhor estabilidade térmica em comparação aos demais dispositivos.

Essa escolha permite observar de forma mais clara o impacto do estrangulamento na sensibilidade, uma vez que o estrangulamento tende a aumentar a interação evanescente e, conseqüentemente, a sensibilidade do sensor. Ao utilizar um dispositivo com sensibilidade moderada como ponto de partida, torna-se possível acompanhar as variações das ressonâncias dentro da mesma janela espectral ao longo do intervalo de temperatura analisado.

A extração das ressonâncias e o cálculo da sensibilidade do sensor foram automatizados por meio de uma API desenvolvida em *Python*. Essa abordagem foi adotada para garantir reprodutibilidade, reduzir a subjetividade na identificação de picos e vales do espectro e permitir a comparação direta entre diferentes condições de analito e temperatura, mantendo uma mesma estratégia de detecção ao longo de toda a análise.

3.5.1 Carregamento e pré-processamento do espectro

Inicialmente, para cada condição experimental ou simulada, o espectro é carregado a partir dos arquivos de simulação, que contêm o comprimento de onda e as respectivas séries de transmissão.

Em seguida, aplica-se um recorte do domínio espectral, restringindo a análise a uma janela de interesse. Esse procedimento reduz a influência de regiões fora da faixa útil do sensor e aumenta a robustez da busca por ressonâncias, especialmente em janelas espectrais densas.

3.5.2 Detecção das ressonâncias (mínimos locais)

As ressonâncias aparecem no espectro de transmissão como vales (mínimos locais). Para facilitar sua identificação, o sinal é inicialmente invertido, de modo que esses vales passem a ser tratados como picos (máximos locais).

Em seguida, o sinal invertido é normalizado. Essa etapa garante que o critério de detecção seja consistente mesmo quando há variações na intensidade do espectro, causadas por mudanças de analito ou temperatura.

Com o sinal preparado, utiliza-se uma função de detecção de picos (*find_peaks*, da biblioteca *scipy.signal*) para localizar os máximos locais. Para evitar que pequenas oscilações do sinal (ruído ou variações de baixa amplitude) sejam identificadas como ressonâncias, é aplicado um critério mínimo de *prominence*. Esse parâmetro garante que apenas picos suficientemente destacados em relação à sua vizinhança sejam considerados.

Ao final desse processo, obtém-se uma lista ordenada de pontos (λ_k, T_k) , que representam as posições espectrais das ressonâncias identificadas.

3.5.3 Identificação de regiões-padrão e separação entre ressonância de referência e detecção

Após a etapa anterior, obtém-se uma lista de máximos (correspondentes aos mínimos do espectro original). No entanto, esses pontos isolados ainda não são suficientes para identificar corretamente as ressonâncias de interesse, pois não indicam qual delas pertence ao anel de referência ou ao anel de detecção.

Para resolver isso, o algoritmo busca um padrão específico no espectro. Esse padrão é composto por três ressonâncias consecutivas, organizadas de forma que a ressonância central esteja entre duas outras ressonâncias que servem como referência. Em termos práticos, procura-se sequências do tipo:

- máximo alto – máximo baixo – máximo alto, ou
- máximo baixo – máximo alto – máximo baixo.

Esse comportamento difere do primeiro para o segundo caso de acordo com o acoplamento nas microcavidades, no primeiro caso o FE da microcavidade de referência é maior que da de detecção e o oposto para o segundo caso. Isso reflete a assinatura do sensor: a ressonância de detecção aparece entre duas ressonâncias de referência dentro de uma mesma região espectral.

Na prática, esse critério funciona como um filtro estrutural, que seleciona apenas regiões do espectro que apresentam a organização esperada do dispositivo. Com isso, evita-se a escolha de ressonâncias espúrias e garante-se que a comparação entre diferentes espectros (por exemplo, para diferentes temperaturas ou analitos) seja feita sempre sobre regiões equivalentes e fisicamente consistentes.

3.5.4 Pareamento de regiões entre dois analitos ou condições

A etapa anterior é aplicada a diferentes condições de análise (por exemplo, diferentes analitos ou variações de temperatura), resultando em conjuntos distintos de regiões

válidas para cada espectro. Como essas condições provocam pequenos deslocamentos nas ressonâncias, as regiões identificadas não coincidem exatamente entre si.

Para possibilitar a comparação, é necessário realizar o pareamento entre regiões equivalentes nos diferentes espectros. Esse pareamento é feito com base na proximidade em comprimento de onda da primeira ressonância (primeiro ponto de máximo da lista), assumindo que regiões próximas correspondem à mesma ordem de ressonância do dispositivo.

Na prática, para cada região válida identificada em uma condição, busca-se a região correspondente na outra condição cujo comprimento de onda esteja dentro de um limite máximo admissível de diferença. Esse limite é definido de forma a acomodar os deslocamentos esperados no espectro, mas evitando associações incorretas com regiões vizinhas, especialmente em casos onde há repetição periódica de ressonâncias.

Esse procedimento garante que a análise acompanhe corretamente a variação da mesma ressonância de detecção entre diferentes condições, permitindo avaliar, de forma consistente, os efeitos da mudança de analito ou da temperatura sobre a resposta do sensor.

3.5.5 Escolha da ressonância de referência e extração da ressonância de detecção

Cada região válida identificada apresenta um padrão formado por três ressonâncias consecutivas: uma de referência, seguida pela ressonância de detecção, e então outra de referência. No entanto, para o cálculo dos parâmetros diferenciais, é necessário utilizar apenas uma única ressonância de referência.

Para isso, adota-se uma convenção fixa ao longo de toda a análise, escolhendo sempre a mesma posição dentro da região (por exemplo, a ressonância mais à esquerda ou mais à direita) como referência. Essa escolha é configurável na API, mas permanece constante para garantir consistência entre diferentes condições analisadas.

Uma vez definida a ressonância de referência (λ_{ref}), a ressonância de detecção (λ_{det}) é automaticamente identificada como o mínimo adjacente correspondente (a ressonância central do padrão). Dessa forma, cada região válida fornece um par consistente de comprimentos de onda ($\lambda_{\text{ref}}, \lambda_{\text{det}}$). A partir desse par, calcula-se o deslocamento espectral diferencial.

Para converter esse deslocamento em sensibilidade, é necessário determinar o índice de refração do analito no comprimento de onda da ressonância de detecção, isto é, $n(\lambda_{\text{det}})$. A API implementa duas abordagens equivalentes para essa estimativa:

1. **Equação do índice no arquivo de simulação:** quando disponível, a expressão analítica do índice de refração é lida diretamente do arquivo de layout e avaliada em λ_{det} , fornecendo $n(\lambda_{\text{det}})$ de forma direta.

2. **Interpolação a partir de dados tabelados:** quando o índice é fornecido em formato tabulado (por exemplo, arquivos `.txt` ou `.dat`), realiza-se um ajuste polinomial (tipicamente de grau 2 porém configurável) na faixa espectral de interesse. O polinômio ajustado é então avaliado em λ_{det} para obter $n(\lambda_{\text{det}})$.

Em ambos os casos, o objetivo é estimar de forma consistente o RI do analito no ponto espectral associado à ressonância de detecção, permitindo a correta avaliação da sensibilidade do sensor.

3.5.6 Cálculo da Sensibilidade

A sensibilidade é calculada comparando duas condições distintas proveniente das respostas espectrais ao utilizar Analito_1 e Analito_2 definidos em 3.3.2. Para cada região pareada, obtêm-se dois deslocamentos espectrais ($\Delta\lambda_1$ e $\Delta\lambda_2$) e dois índices correspondentes (n_1 e n_2), avaliados nos respectivos comprimentos de onda de detecção. A sensibilidade é então expressa como:

$$S = \frac{|\Delta\lambda_2 - \Delta\lambda_1|}{|n_2 - n_1|}, \quad (83)$$

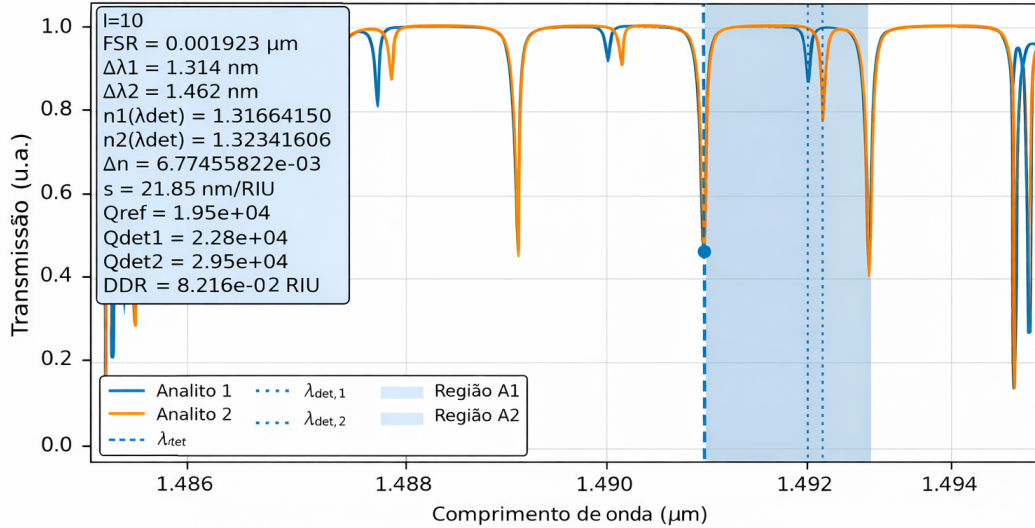
com conversão de unidade apropriada para nm/RIU, quando necessário.

A aplicação dessa métrica em múltiplas regiões do espectro gera um conjunto de valores de sensibilidade, permitindo avaliar estatisticamente o comportamento do sensor (valor máximo, mínimo e médio) e verificar a consistência do resultado ao longo da janela espectral analisada.

A Figura 19 demonstra o procedimento automatizado empregado para rastrear ressonâncias e calcular métricas de desempenho a partir de espectros de transmissão simulados. Para o dispositivo D1 a 20 °C, a API identifica uma região espectral válida (como exemplo a região $i = 10$ analisada). A partir de uma âncora fixa definida pela ressonância de referência λ_{ref} , o algoritmo seleciona as ressonâncias de detecção adjacentes $\lambda_{\text{det},1}$ e $\lambda_{\text{det},2}$, permitindo calcular os deslocamentos $\Delta\lambda_1$ e $\Delta\lambda_2$ dentro de cada espectro.

Em seguida, os índices de refração n_1 e n_2 são avaliados nos respectivos λ_{det} , viabilizando o cálculo da sensibilidade S pela Eq. 83. Adicionalmente, a figura apresenta parâmetros complementares extraídos na mesma região — como FSR, fatores-Q das ressonâncias de detecção e a MDVR — que suportam a avaliação conjunta do desempenho do sensor e a rastreabilidade do processo de decisão do algoritmo, validando visualmente o pareamento e a coerência dos deslocamentos espectrais associados à variação do RI do analito.

Figura 19 – Diagnóstico do algoritmo de pareamento espectral e cálculo de sensibilidade (D1, 20 °C)



Comparação dois analitos: Analito₁ e solução aquosa de EG a 1,25% (Analito₂), para a região $i = 10$ reconhecida pela API. São mostrados os espectros de transmissão e a região válida identificada automaticamente (faixa sombreada), utilizada para o pareamento entre condições. A ressonância de referência λ_{ref} (linha tracejada) e as ressonâncias de detecção $\lambda_{\text{det},1}$ e $\lambda_{\text{det},2}$ (linhas pontilhadas) definem os deslocamentos $\Delta\lambda_1$ e $\Delta\lambda_2$. A caixa de texto resume os parâmetros extraídos na região: FSR, $\Delta\lambda_1$, $\Delta\lambda_2$, $n_1(\lambda_{\text{det},1})$, $n_2(\lambda_{\text{det},2})$, sensibilidade S , fatores-Q das ressonâncias e a MDVR estimada. Fonte: Autor

3.5.7 Cálculo da estabilidade térmica

A estabilidade térmica do sensor foi estimada a partir do deslocamento diferencial entre as ressonâncias do anel de detecção e do anel de referência, avaliando-se como essa diferença varia com a temperatura. Para essa etapa, analisou-se um dispositivo por vez. Inicialmente, foram carregadas todas as curvas espectrais simuladas para os dois analitos, contemplando todas as temperaturas disponíveis na simulação. Em seguida, a mesma rotina de extração automática empregada no cálculo da sensibilidade foi aplicada para identificar as regiões espectrais válidas e parear, em cada região, uma ressonância de detecção com sua respectiva ressonância de referência.

Para cada região válida i , e para cada temperatura T_k , a API armazenou em um *dataframe* os comprimentos de onda das ressonâncias extraídas, $\lambda_{\text{det},i}(T_k)$ e $\lambda_{\text{ref},i}(T_k)$. A partir desses valores, calculou-se o espaçamento diferencial (ou separação espectral) entre

as ressonâncias:

$$\Delta\lambda_i(T_k) = \lambda_{\text{det},i}(T_k) - \lambda_{\text{ref},i}(T_k). \quad (84)$$

A estabilidade térmica em cada região foi definida como a taxa de variação de $\Delta\lambda_i$ com a temperatura, isto é, a derivada:

$$\text{TS}_i(T) = \frac{d}{dT} [\Delta\lambda_i(T)] = \frac{d}{dT} [\lambda_{\text{det},i}(T) - \lambda_{\text{ref},i}(T)], \quad (85)$$

onde TS (do inglês, *thermal stability*) representa o *drift* térmico diferencial. Na prática, como os dados são amostrados em temperaturas discretas, a derivada foi estimada numericamente ao longo do conjunto de temperaturas $\{T_k\}$. Uma forma direta é utilizar diferenças finitas entre pontos consecutivos:

$$\left. \frac{d\Delta\lambda_i}{dT} \right|_{T_k} \approx \frac{\Delta\lambda_i(T_{k+1}) - \Delta\lambda_i(T_k)}{T_{k+1} - T_k}. \quad (86)$$

Por fim, para cada comprimento de onda observado (isto é, para cada linha do *dataframe*, que representa o acompanhamento de uma mesma região ao longo das temperaturas), calculou-se a média das estimativas da derivada ao longo de toda a faixa térmica simulada:

$$\overline{\text{TS}}_i = \frac{1}{N_T - 1} \sum_{k=1}^{N_T-1} \frac{\Delta\lambda_i(T_{k+1}) - \Delta\lambda_i(T_k)}{T_{k+1} - T_k}, \quad (87)$$

em que N_T é o número de temperaturas simuladas. O valor $\overline{\text{TS}}_i$ fornece uma métrica única de estabilidade térmica para a região i , preservando o sinal (positivo ou negativo) associado ao sentido do deslocamento diferencial com a temperatura.

Quando necessário, os resultados foram convertidos para pm/°C, considerando que 1 nm = 10³ pm, de modo que valores inicialmente obtidos em nm/°C foram multiplicados por 10³.

Apesar de $\overline{\text{TS}}_i$ fornecer uma métrica objetiva do *drift* térmico diferencial medido, é importante notar que esse valor não é, em geral, uma propriedade exclusivamente intrínseca do dispositivo. Em sensores refratométricos, parte do deslocamento térmico pode ser induzida indiretamente pela variação do índice de refração do analito com a temperatura, isto é, pelo seu coeficiente termo-óptico dn_a/dT . Assim, para um mesmo sensor, diferentes analitos (com diferentes dn_a/dT) podem resultar em diferentes valores de estabilidade térmica medida, o que dificulta a comparação direta do desempenho térmico do dispositivo quando a aplicação-alvo envolve fluidos distintos.

Para tornar a análise mais interpretável e transferível, pode-se decompor a estabilidade térmica medida em dois termos: (i) um termo intrínseco do dispositivo, associado às variações termo-ópticas e termo-mecânicas do chip e do modo guiado, e (ii) um termo associado ao analito, proporcional à sensibilidade e ao coeficiente termo-óptico do fluido. Considerando, inicialmente, uma aproximação linear de primeira ordem, a contribuição

total pode ser escrita como

$$\left(\frac{d\Delta\lambda_i}{dT}\right)_{\text{med}} = \left(\frac{\partial\Delta\lambda_i}{\partial T}\right)_{\text{chip}} + \left(\frac{\partial\Delta\lambda_i}{\partial n_a}\right) \frac{dn_a}{dT}, \quad (88)$$

em que o subscrito “med” denota o valor efetivamente obtido pelo procedimento descrito nesta seção para $\overline{\text{TS}}_i$, e n_a representa o índice de refração do analito. O primeiro termo da soma,

$$\text{RTC}_i \equiv \left(\frac{\partial\Delta\lambda_i}{\partial T}\right)_{\text{chip}}, \quad (89)$$

é denominado aqui Residual Thermal Coefficient (RTC), e quantifica o *drift* diferencial que ocorreria mesmo na ausência de variação do índice do analito com a temperatura. O segundo termo representa a contribuição termo-óptica do analito modulada pela sensibilidade refratométrica do sensor.

Como $\partial\Delta\lambda_i/\partial n_a$ corresponde, por definição, à sensibilidade refratométrica diferencial na região i , pode-se escrever

$$S_i \equiv \frac{\partial\Delta\lambda_i}{\partial n_a} \quad [\text{nm/RIU}], \quad (90)$$

o que permite reescrever (88) como

$$\overline{\text{TS}}_i = \text{RTC}_i + S_i \frac{dn_a}{dT}. \quad (91)$$

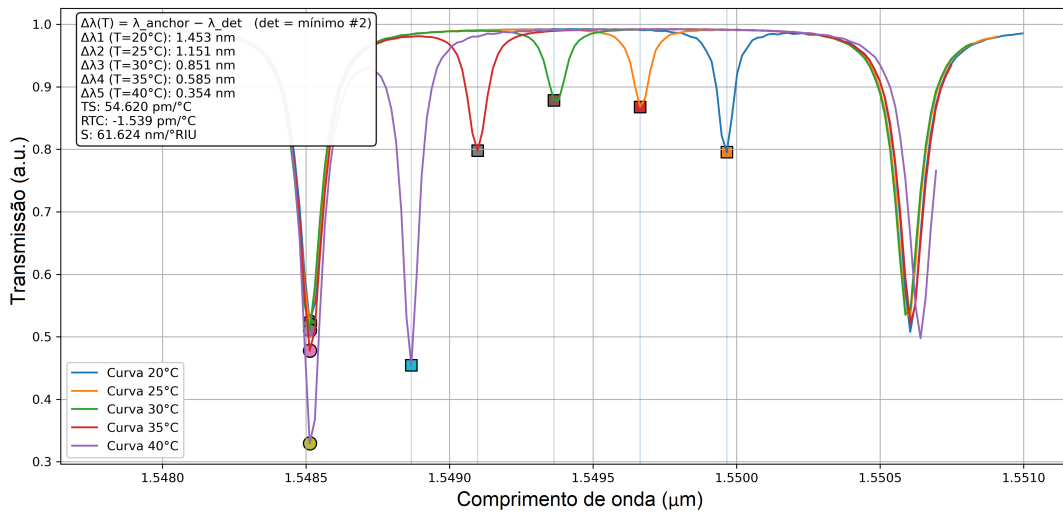
Dessa forma, uma estimativa do termo intrínseco do dispositivo pode ser obtida diretamente a partir de grandezas medidas/simuladas ($\overline{\text{TS}}_i$ e S_i), desde que dn_a/dT do analito seja conhecido:

$$\boxed{\text{RTC}_i = \overline{\text{TS}}_i - S_i \frac{dn_a}{dT}} \quad (92)$$

A Equação (92) fornece uma métrica mais apropriada para comparação entre dispositivos (ou entre geometrias) quando o objetivo é caracterizar a robustez térmica intrínseca do sensor, independente do fluido em teste. Uma vez conhecido RTC_i , o *drift* esperado para um analito arbitrário pode ser previsto por

$$\left(\overline{\text{TS}}_i\right)_{\text{prev}} = \text{RTC}_i + S_i \left(\frac{dn_a}{dT}\right)_{\text{analito}}. \quad (93)$$

Figura 20 – Cálculo da estabilidade térmica via API (E3)



curvas de transmissão em diferentes temperaturas alinhadas por uma âncora (λ_{anchor}), identificação da ressonância de detecção (λ_{det} , mínimo selecionado) e cálculo do deslocamento. A partir de $\Delta\lambda(T)$, são estimados TS e RTC , e o valor de S é reportado para a região analisada. Fonte: Autor

A Figura 20 apresenta um exemplo representativo do resultado gerado automaticamente pela API em Python ao aplicar o procedimento descrito para uma dada região espectral. Para uma melhor visualização as curvas de transmissão simuladas em diferentes temperaturas foram alinhadas em torno de uma âncora (λ_{anchor}), porém esse alinhamento não faz parte do cálculo. A API mapeia as ressonâncias de detecção (λ_{det}) em cada temperatura, permitindo calcular o deslocamento $\Delta\lambda(T) = \lambda_{\text{anchor}} - \lambda_{\text{det}}$. A partir da variação de $\Delta\lambda(T)$ com T , a API estima a estabilidade térmica TS e, em conjunto com a sensibilidade S , obtém também o termo residual RTC , conforme definido anteriormente.

Capítulo 4

Resultados e Discussões

Este capítulo apresenta e discute os resultados obtidos para os sensores baseados em PMs, com ênfase na relação entre as variações geométricas investigadas e o desempenho do dispositivo. A análise é estruturada a partir de três eixos complementares: (i) a sensibilidade à variação do RI do analito, (ii) a resposta térmica e a robustez do sensor frente a variações de temperatura e (iii) a correlação inerente entre sensibilidade e estabilidade, que orienta a otimização do projeto.

Inicialmente, são apresentados os resultados de sensibilidade, incluindo um exemplo ilustrativo do procedimento de seleção de uma região espectral válida e do pareamento automático das ressonâncias de detecção e referência. Em seguida, a sensibilidade é analisada ao longo do espectro (1460–1620 nm), permitindo avaliar tendências e dispersões espectrais, bem como quantificar o impacto específico do tamanho da área de detecção e do estrangulamento sobre a interação luz–analito.

Na sequência, são discutidos os resultados associados à resposta térmica do sensor, explorando o deslocamento diferencial entre as ressonâncias de detecção e referência e sua dependência com a temperatura. Essa abordagem permite separar, de forma prática, a contribuição térmica residual do dispositivo da contribuição associada ao analito e às condições de confinamento óptico, evidenciando o papel da leitura diferencial na mitigação de *drift*. Por fim, os resultados são sintetizados em termos de compromisso entre sensibilidade e robustez térmica, culminando em recomendações de projeto para aplicações que exigem alta precisão e estabilidade.

4.1 Resultados de sensibilidade ao índice de refração

Nesta seção são apresentados e discutidos os resultados de sensibilidade do sensor à variação do RI do analito. A sensibilidade é interpretada como a capacidade do dispositivo em converter pequenas variações de RI em deslocamentos mensuráveis no comprimento de onda das ressonâncias associadas ao anel de detecção, sendo, portanto, uma figura de mérito diretamente relacionada ao grau de interação luz–analito e ao confinamento modal na região sensora.

A análise foi conduzida a partir dos espectros simulados na faixa de 1460–1620 nm, nos quais as ressonâncias foram identificadas automaticamente e organizadas em regiões espectrais válidas. Para cada região, a rotina de processamento realiza o pareamento entre uma ressonância do anel de detecção e uma ressonância do anel de referência, assegurando consistência na comparação entre diferentes analitos e variantes geométricas. Em seguida, a sensibilidade é estimada a partir do deslocamento da ressonância de detecção entre os dois analitos considerados, normalizado pela diferença de RI correspondente, conforme definido na Seção 3.5.6.

4.1.1 Efeito do tamanho da área de detecção na sensibilidade

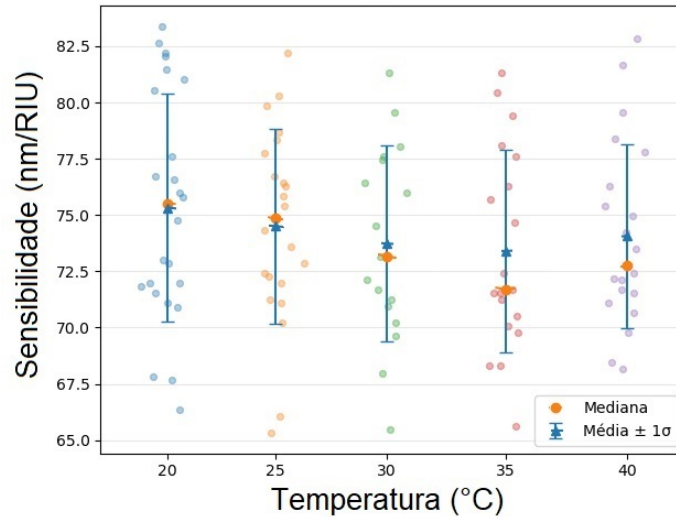
Nesta subseção investiga-se o impacto do tamanho da área de detecção na sensibilidade do sensor, isolando-se esse parâmetro dos demais fatores geométricos e de acoplamento. Para tal, foram avaliados três dispositivos representativos (D1, E1 e F1), mantendo-se constantes as demais dimensões do guia e as condições de acoplamento, e variando-se apenas a extensão angular da área de detecção W_L : 90° para D1, 45° para E1 e 30° para F1. Essa variação altera diretamente a fração do caminho óptico do anel de detecção exposta ao analito e, portanto, o grau de interação do campo evanescente com o meio externo.

A sensibilidade foi obtida a partir da leitura diferencial entre o anel de detecção e o anel de referência, conforme a Eq. 83, de modo a reduzir componentes comuns de deslocamento espectral e enfatizar a contribuição associada ao analito na região sensora. O cálculo foi repetido para cinco temperaturas (20, 25, 30, 35 e 40 °C), e para cada condição foram considerados todos os pares de ressonâncias válidos identificados automaticamente na janela de 1460–1620 nm. Assim, cada temperatura produz uma distribuição de valores de S , permitindo avaliar simultaneamente (i) o valor típico (média/mediana) e (ii) a dispersão espectral associada às diferentes regiões ressonantes.

A variação da sensibilidade com a temperatura é apresentada para os dispositivos D1 (Fig. 21), E1 (Fig. 22) e F1 (Fig. 23). Observa-se, primeiramente, uma separação clara entre os dispositivos: D1 apresenta os maiores valores de sensibilidade, seguido por E1 e, por fim, F1, confirmando que o aumento de W_L eleva o deslocamento efetivo da ressonância do anel de detecção para uma mesma variação de RI. Em termos físicos, uma

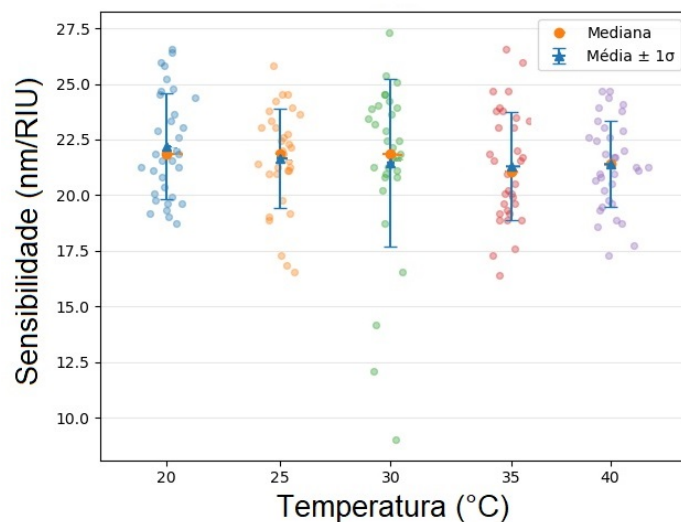
maior região exposta aumenta a sobreposição modal com o analito e amplia a perturbação efetiva do índice de refração modal, resultando em maior conversão $\Delta n \rightarrow \Delta \lambda$.

Figura 21 – Variação da sensibilidade com a temperatura para o dispositivo D1.



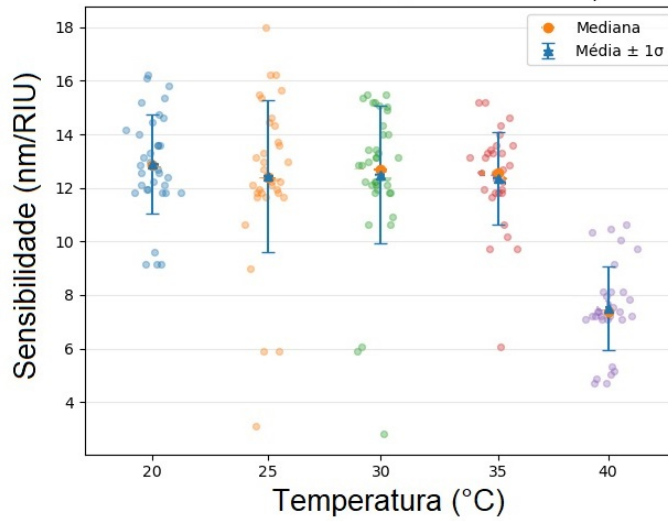
Os pontos representam os valores de sensibilidade obtidos para cada ressonância identificada na janela espectral analisada, em cada temperatura. Fonte: Autor.

Figura 22 – Variação da sensibilidade com a temperatura para o dispositivo E1 e F1.



Os pontos representam os valores de sensibilidade obtidos para cada ressonância identificada na janela espectral analisada, em cada temperatura. Fonte: Autor.

Figura 23 – Variação da sensibilidade com a temperatura para o dispositivo F1.



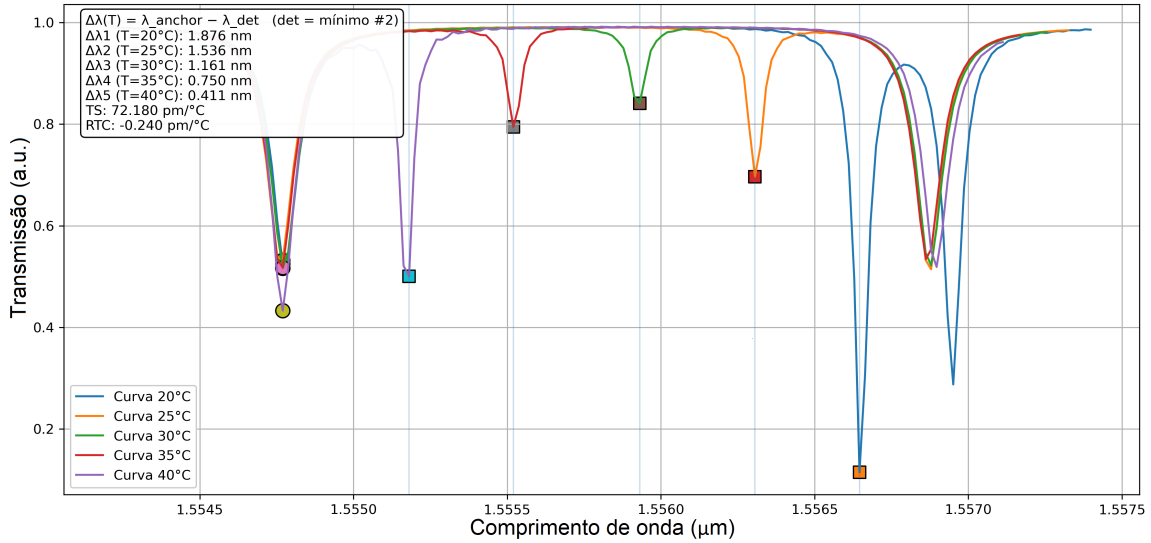
Os pontos representam os valores de sensibilidade obtidos para cada ressonância identificada na janela espectral analisada, em cada temperatura. Fonte: Autor.

No dispositivo D1, os valores médios de sensibilidade variam de forma relativamente moderada ao longo do intervalo de 20–40 °C (Tabela 4), permanecendo tipicamente em torno de 75 nm/RIU. Entretanto, a Figura 21 revela uma dispersão significativa entre valores mínimos e máximos em cada temperatura, indicando que S não é uniforme ao longo das diferentes regiões espectrais avaliadas. Essa dispersão decorre do caráter intrínseco do comportamento espectral de PMs juntamente do método de leitura diferencial: como a sensibilidade é estimada a partir do deslocamento relativo entre as ressonâncias de detecção e referência, $\Delta\lambda(\lambda) = \lambda_{\text{det}} - \lambda_{\text{ref}}$, a proximidade espectral entre esses modos pode intensificar o acoplamento e modificar a resposta observada.

Tabela 4 – Sensibilidade calculada para o dispositivo D1.

Temperatura °C	Máxima (nm/RIU)	Mínima (nm/RIU)	Média (nm/RIU)
20	83.3884	66.3396	75.3291
25	82.5016	67.5288	74.5857
30	81.3298	67.6842	74.0076
35	81.4888	68.1360	73.6533
40	82.9857	68.1431	73.7251

Figura 24 – Distorção espectral por aproximação entre ressonâncias de detecção e referência (D1).



Espectros de transmissão normalizados do dispositivo D1 para $T = \{20, 25, 30, 35, 40\}$ °C, após aplicação de deslocamento no eixo x para alinhar a ressonância de detecção selecionada em todas as temperaturas. Os marcadores indicam os mínimos (ressonâncias) identificados automaticamente e destacam as posições espectrais associadas ao pareamento com a referência. O quadro de anotações apresenta $\Delta\lambda(T) = \lambda_{\text{anchor}} - \lambda_{\text{det}}$ e os parâmetros derivados (TS_i e RTC_i) para a região analisada. A distorção observada em $T = 20$ °C ilustra a condição de maior proximidade entre ressonâncias de detecção e referência, podendo alterar localmente o FSR e aumentar a variabilidade do deslocamento diferencial. Fonte: Autor.

Como ilustrado no diagrama conceitual da Figura 8, quando ressonâncias do anel de detecção e do anel de referência se aproximam, ocorre interação modal mais pronunciada, que pode resultar não apenas em alterações no deslocamento efetivo das ressonâncias, mas também em distorções do perfil espectral e, em situações de sobreposição, no surgimento de novas características ressonantes. Conseqüentemente, regiões do espectro em que λ_{det} e λ_{ref} estão mais próximas tendem a apresentar maior variabilidade de S ao se comparar diferentes pares de ressonância dentro da mesma janela espectral.

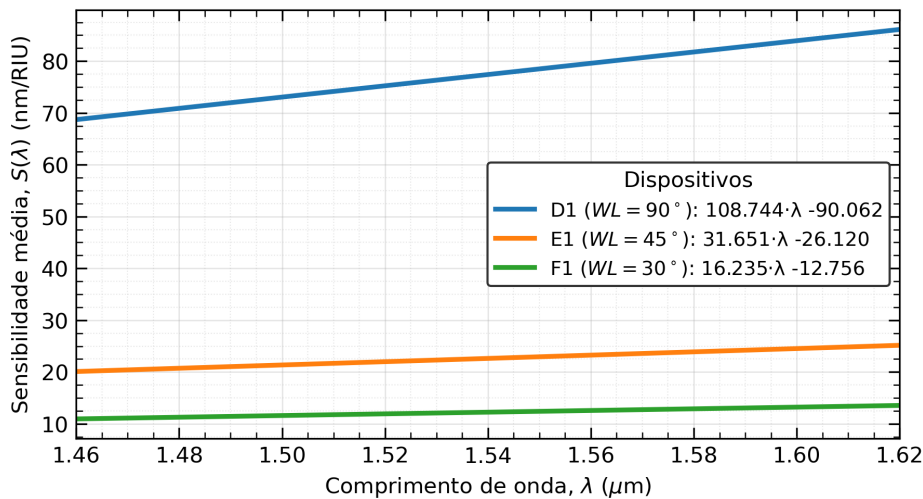
Esse efeito pode ser observado de forma clara na Figura 24, que evidencia o deslocamento da ressonância de detecção com a temperatura. Nessa figura, aplicou-se um deslocamento no eixo x para alinhar as ressonâncias de referência de todos os espectros, facilitando a comparação visual do comportamento térmico. Nota-se que, para $T = 20$ °C, a ressonância de detecção encontra-se particularmente próxima de uma ressonância do anel de referência, o que leva a uma distorção local do traço espectral e a uma alteração aparente do FSR na região. Esse tipo de condição aumenta a sensibilidade do cálculo diferencial a pequenas variações espectrais e contribui para a ampliação da dispersão

observada na Figura 21.

Para o dispositivo E1, a distribuição de S se apresenta mais concentrada em torno do valor central (Figura 22), sugerindo menor influência de interações espectrais fortes (aproximações frequentes entre λ_{det} e λ_{ref}) dentro da faixa avaliada. Esse comportamento é consistente com um regime em que a resposta diferencial é mais uniforme ao longo do espectro, reduzindo a dispersão estatística sem alterar a tendência principal imposta por W_L .

Já o dispositivo F1 mantém valores aproximadamente constantes até 35 °C, porém apresenta uma queda pronunciada em 40 °C (Figura 23), sendo, para este caso específico, uma recorrência em todo o espectro do comportamento exemplificado na Figura 24.

Figura 25 – Regressões lineares da sensibilidade média $S(\lambda)$ (1.46–1.62 μm) para diferentes áreas de detecção.



Retas obtidas por regressão linear representando a média agregada das temperaturas. Observa-se aumento de S com W_L em toda a faixa espectral analisada. Fonte: Autor.

Para complementar a análise estatística das Figuras Fig.21,22, e 23 e explicitar a dependência espectral média, a sensibilidade média no intervalo 1.46–1.62 μm (após remoção de *outliers* e agregação das temperaturas) foi aproximada por regressões lineares. A Figura 25 apresenta essas regressões e reforça o ordenamento esperado $S_{D1} > S_{E1} > S_{F1}$ ao longo de toda a faixa espectral

A Tabela 5 resume as métricas médias obtidas para os dispositivos D1, E1 e F1, permitindo avaliar não apenas o ganho de sensibilidade com o aumento da área de detecção, mas também a consequente restrição na faixa operacional do sensor. Em particular, o parâmetro MDVR fornece uma estimativa direta da excursão máxima de índice de refração que pode ser medida de forma unívoca dentro de um mesmo FSR, funcionando como uma “janela” de operação do analito. Como o FSR permanece praticamente cons-

tante entre os dispositivos (aproximadamente 2.00 nm), a variação de MDVR é dominada principalmente pela sensibilidade: quanto maior S , menor é a variação Δn necessária para deslocar a ressonância de detecção ao longo do FSR, reduzindo a faixa de índices de refração que pode ser detectada antes que ocorra ambiguidade no pareamento das ressonâncias. Esse comportamento é claramente observado na tabela: D1, que apresenta a maior sensibilidade, também possui o menor MDVR (2.46×10^{-2} RIU), enquanto F1, com menor sensibilidade, exibe a maior faixa operacional (1.43×10^{-1} RIU).

Tabela 5 – Métricas médias obtidas na variação da Área de Detecção

Dispositivo	S [nm RIU ⁻¹]	FSR [nm]	MDVR [RIU]
D1	78.37	2.003	2.46×10^{-2}
E1	22.92	2.002	8.32×10^{-2}
F1	13.21	2.001	1.43×10^{-1}

4.1.2 Efeito do estrangulamento na sensibilidade

Nesta subseção avalia-se o impacto do estrangulamento do guia de onda do anel de detecção na sensibilidade do sensor, mantendo-se fixa a área de detecção ($W_L = 45^\circ$). Para essa análise, considerou-se a família de dispositivos E1–E5, na qual o parâmetro geométrico W_t foi progressivamente reduzido (de 1000 nm até 300 nm). Essa variação altera o confinamento lateral do modo guiado e, portanto, a fração de campo evanescente que interage com o analito, sendo esperada uma elevação de S à medida que o guia se torna mais estreito.

Os resultados obtidos evidenciam uma tendência bem definida: a redução de W_t aumenta significativamente a sensibilidade do sensor. Em termos de valores médios (ordem de grandeza), observa-se um crescimento em patamares ao longo da série: E1 ($W_t = 1000$ nm) apresenta sensibilidade média da ordem de 21–22 nm/RIU; E2 (600 nm) aumenta para aproximadamente 45–46 nm/RIU; E3 (500 nm) atinge 59–60 nm/RIU; E4 (400 nm) alcança 75–77 nm/RIU; e E5 (300 nm) chega a cerca de 94 nm/RIU. Assim, a comparação direta E1→E5 corresponde a um ganho superior a 4× em sensibilidade, confirmando o estrangulamento como um parâmetro possível de elevar a sensibilidade nesta arquitetura com $W_L = 45^\circ$.

Esse comportamento é consistente com o mecanismo físico esperado para sensores baseados em MRR: ao reduzir W_t , o confinamento lateral do modo é enfraquecido e a distribuição do campo óptico se expande para a vizinhança do analito, aumentando a sobreposição modal com o meio externo. Como consequência, a variação do índice de refração do analito provoca uma variação mais intensa no índice efetivo modal, amplificando o deslocamento da ressonância do anel de detecção e elevando a sensibilidade $S = \Delta\lambda_{\text{det}}/\Delta n$. Em outras palavras, o estrangulamento atua como um mecanismo de “ganho” de interação luz–analito, sem necessidade de ampliar a área de detecção.

Um aspecto relevante observado nesta família é a limitação prática associada ao aumento de sensibilidade. Para E4 e E5 foi necessário restringir o conjunto de temperaturas analisadas nos cálculos estatísticos devido a poucas ocorrências de regiões válidas nas temperaturas, pois em geometrias que tenham alto valor de S o deslocamento das ressonâncias de detecção entre os analitos torna-se suficientemente grande para que, em determinadas temperaturas, a ressonância correspondente migre para fora da faixa de pareamento imposta pelo FSR do anel de referência. Nessa condição, perde-se a correspondência entre ressonâncias de referência e detecção dentro da mesma janela espectral, inviabilizando a extração correta de S naquela temperatura. Assim, foram considerados 25–35 °C para E4 e apenas 30–35 °C para E5 para os cálculos estatísticos de médias devido ao alto índice de outliers nas demais temperaturas.

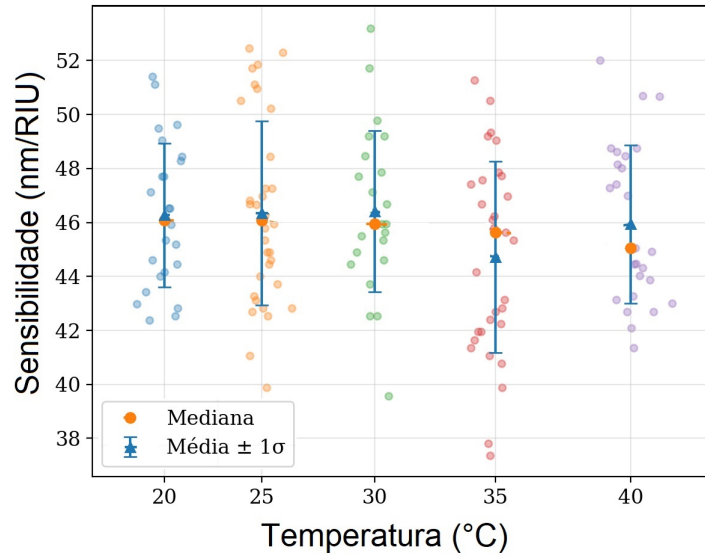
Apesar dessa restrição, no intervalo de temperaturas em que a análise foi possível e nos poucos pontos válidos nas demais, os valores centrais (média e mediana) (Figuras 26, 27, 28 e 29) apresentam baixa dependência térmica quando comparados ao ganho imposto pelo estrangulamento. Em E1 e E3, por exemplo, observa-se que o nível médio permanece praticamente constante entre 20 e 40°C. Quantitativamente, os boxplots (Figuras 22, 26 e 27) mostram que, para E1, E2 e E3, a variação entre os valores mínimo e máximo situa-se entre aproximadamente ± 2 no melhor caso e ± 5 nm/RIU no pior, reforçando a baixa dependência térmica nessa faixa para a Sensibilidade S . Em E2 aparece uma leve queda pontual do valor médio em 35 °C com recuperação parcial em 40 °C, comportamento compatível com mudanças na seleção de janelas espectrais válidas e com a variabilidade espectral do sensor. Para E4 (Figura 28) e E5 (Figura 29), mesmo com o conjunto reduzido de temperaturas, os valores médios permanecem próximos entre si (diferenças pequenas entre 30 e 35 °C em E5 e entre 25 e 35 °C em E4), sugerindo que o estrangulamento atua majoritariamente como fator de ganho de sensibilidade, enquanto a temperatura, nesse recorte, influencia mais fortemente o posicionamento espectral e o pareamento das ressonâncias do que o nível médio de S .

A Figura 30 apresenta as regressões lineares ajustadas para a sensibilidade média $S(\lambda)$ no intervalo de 1.46–1.62 μm para a família E1–E5, na qual apenas o estrangulamento do guia de onda é modificado por meio da redução de W_t . Observa-se que todas as curvas exibem crescimento aproximadamente linear de S com o comprimento de onda dentro da janela analisada, porém com níveis médios claramente distintos entre os dispositivos. Em particular, a redução progressiva de W_t desloca as curvas para valores mais elevados de sensibilidade em toda a faixa espectral, provando que o estrangulamento atua como um mecanismo de amplificação da interação luz–analito.

Esse comportamento é consistente com a maior fração de campo evanescente nas geometrias mais estreitas, aumentando a variação do índice efetivo modal diante de uma mesma variação do índice externo. Em termos quantitativos, os dados indicam um aumento sistemático de E1 para E5, refletindo uma resposta mais intensa e mais dependente

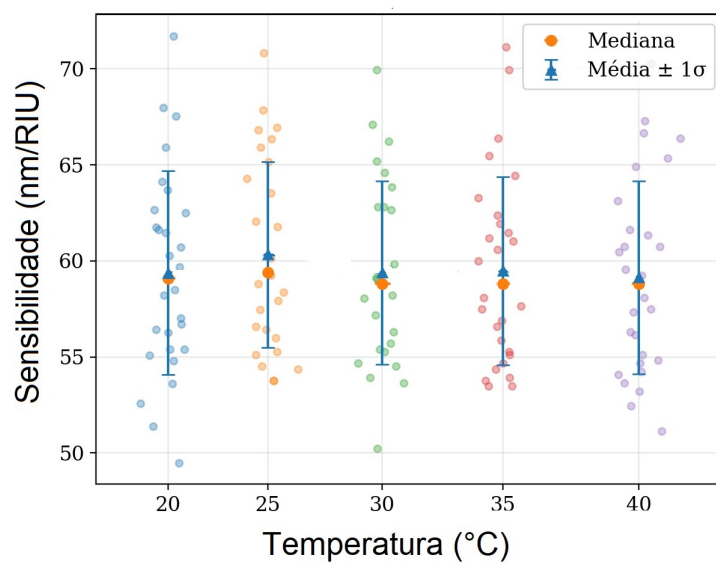
do espectro à medida que W_t diminui. Assim, o gráfico evidencia, de forma compacta, o ordenamento $S_{E5} > S_{E4} > S_{E3} > S_{E2} > S_{E1}$ ao longo de toda a janela de operação.

Figura 26 – Variação da sensibilidade com a temperatura para o dispositivo E2.



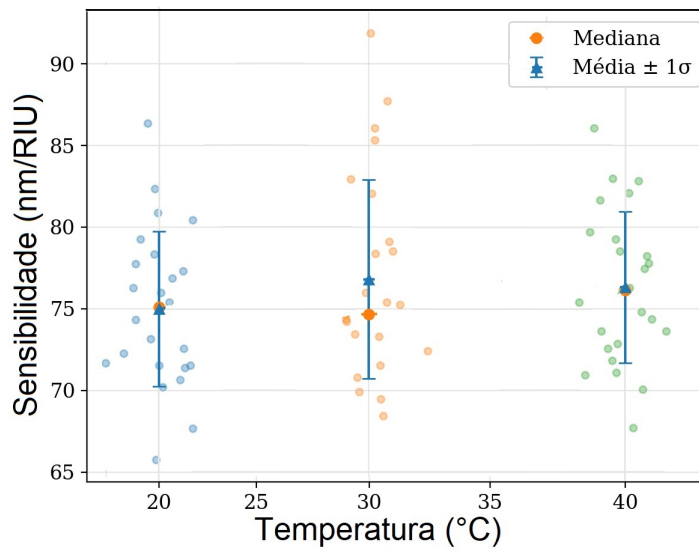
Os pontos representam os valores de sensibilidade obtidos para cada ressonância identificada na janela espectral analisada, em cada temperatura. Fonte: Autor.

Figura 27 – Variação da sensibilidade com a temperatura para o dispositivo E3.



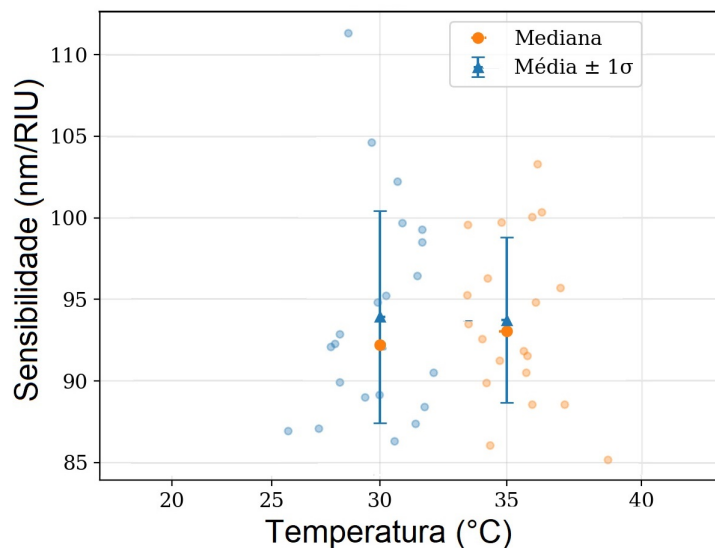
Os pontos representam os valores de sensibilidade obtidos para cada ressonância identificada na janela espectral analisada, em cada temperatura. Fonte: Autor.

Figura 28 – Variação da sensibilidade com a temperatura para o dispositivo E4.



Os pontos representam os valores de sensibilidade obtidos para cada ressonância identificada na janela espectral analisada, em cada temperatura. Fonte: Autor.

Figura 29 – Variação da sensibilidade com a temperatura para o dispositivo E5.

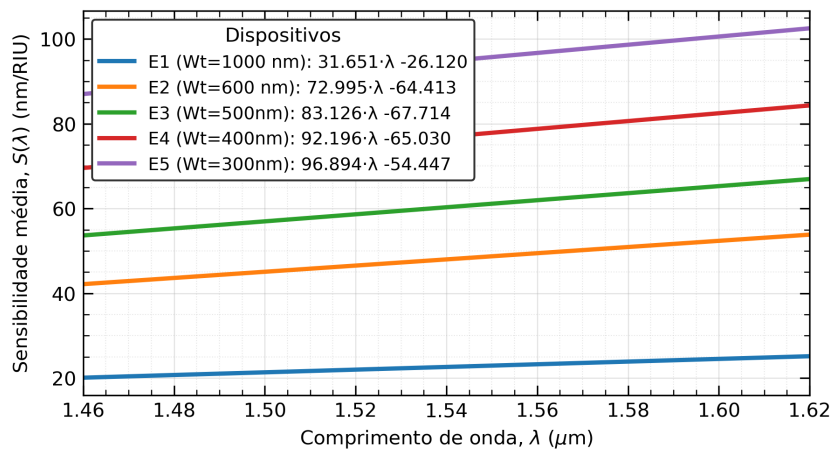


Os pontos representam os valores de sensibilidade obtidos para cada ressonância identificada na janela espectral analisada, em cada temperatura. Fonte: Autor.

A Tabela 6 apresenta as métricas médias obtidas para a família E1–E5, evidenciando o efeito do estrangulamento (redução de W_t) simultaneamente sobre a sensibilidade

e sobre a faixa operacional do sensor. Assim como descrito na sessão anterior, o parâmetro MDVR é particularmente informativo por quantificar a excursão máxima de RI detectável de forma não ambígua dentro de um mesmo FSR, permitindo inferir a região de operação do analito para cada geometria. Sendo assim, E5 apresenta a maior sensibilidade (93.93 nm/RIU), porém a menor MDVR (1.98×10^{-2} RIU), enquanto E1 opera com sensibilidade menor (22.92 nm/RIU) e uma faixa dinâmica mais ampla (8.32×10^{-2} RIU).

Figura 30 – Regressões lineares da sensibilidade média $S(\lambda)$ (1.46–1.62 μm) para diferentes estrangulamentos.



Retas obtidas por regressão linear representando a média agregada das temperaturas. Observa-se aumento de S com Wt em toda a faixa espectral. Fonte: Autor.

Tabela 6 – Métricas médias obtidas na variação do Estrangulamento

Dispositivo	S [nm RIU ⁻¹]	FSR [nm]	MDVR [RIU]
E1	22.92	2.002	8.32×10^{-2}
E2	47.33	2.003	3.94×10^{-2}
E3	59.39	2.003	3.16×10^{-2}
E4	76.81	2.004	2.45×10^{-2}
E5	93.93	2.003	1.98×10^{-2}

4.1.3 Resumo comparativo e implicações para projeto

Os resultados obtidos nas subseções anteriores permitem comparar, de forma direta, as duas estratégias geométricas empregadas para aumentar a sensibilidade do sensor: (i) ampliar a área de detecção por meio do aumento de W_L e (ii) intensificar a interação luz-analito via estrangulamento do guia no anel de detecção, reduzindo W_t . Em ambos os casos, observou-se incremento significativo em S , confirmando que essas modificações

atuam como mecanismos efetivos para aumentar a contribuição do analito no deslocamento da ressonância de detecção λ_{det} . Assim, a principal distinção entre as abordagens consiste em como cada uma impacta a dispersão dos valores estimados e a robustez do processo de extração quando a temperatura varia.

No conjunto de dispositivos D1, E1 e F1, em que apenas W_L é modificado, verifica-se o ordenamento esperado $S_{D1} > S_{E1} > S_{F1}$, indicando que expor uma fração maior do anel de detecção ao analito aumenta a sobreposição modal e a resposta refratométrica. Entretanto, os dados também mostram que o aumento de W_L pode elevar a variabilidade dos valores de S dentro da janela analisada devido ao incremento da sensibilidade causar uma recorrência maior de interações entre ressonâncias de detecção e de referência. Esse regime favorece interação modal mais pronunciada e pode distorcer localmente o traço espectral, tornando o deslocamento diferencial mais sensível às pequenas variações de pareamento.

A Figura 24 ilustra essa condição para D1 em $T = 20\text{ }^\circ\text{C}$, onde a proximidade entre detecção e referência está associada a uma distorção local e a uma alteração aparente do comportamento espectral, contribuindo para a dispersão observada na Figura 21. Desse modo, embora W_L maior aumente o nível médio de sensibilidade, ele pode também exigir maior cuidado na seleção de regiões válidas ou o analito a ser testado, sobretudo em cenários de variação térmica.

Para a família E1–E5, na qual W_L é mantido fixo e apenas W_t é reduzido, a elevação de S é ainda mais expressiva, com ganhos superiores a $4\times$ entre E1 e E5. Esse resultado confirma que o estrangulamento é um mecanismo eficiente para amplificar a interação luz–analito sem a necessidade de ampliar a área exposta: ao reduzir W_t , o confinamento lateral do modo diminui e a fração de campo evanescente no analito aumenta, intensificando a perturbação do índice efetivo. Contudo, esse ganho vem acompanhado de uma limitação prática relevante: em geometrias muito sensíveis, o deslocamento induzido pelo analito pode tornar-se grande o suficiente para comprometer o pareamento entre ressonâncias de detecção e referência em determinadas temperaturas. Esse efeito foi observado principalmente em E4 e E5, para os quais foi necessário restringir o intervalo de temperaturas analisadas para preservar a consistência do critério de regiões válidas. Portanto, na arquitetura diferencial adotada, a sensibilidade máxima pode ser limitada pelo FSR.

À luz desses resultados, podem-se estabelecer diretrizes práticas para o projeto do sensor com o intuito de maximizar a sensibilidade:

- **Aumentar W_L como estratégia primária de ganho:** ampliar a área de detecção eleva S por aumentar diretamente a sobreposição modal com o analito.
- **Estrangulamento como estratégia de alto ganho:** reduzir W_t é a abordagem mais eficiente para elevar S mantendo W_L fixo, permitindo ganhos substanciais

mesmo em áreas de detecção moderadas.

- **Projeto orientado por viabilidade de extração:** a escolha de W_L e W_t deve considerar não apenas o valor típico de S , mas também a janela espectral disponível dado pelo FSR e do analito alvo que se deseja utilizar, tal característica pode ser estimada por meio da MDVR (Tabelas 5 e 6). Na prática, isso implica evitar regimes em que a proximidade entre as ressonâncias de detecção–referência distorce a resposta e garantir margem de pareamento suficiente para que a ressonância de detecção permaneça associada à referência ao longo do intervalo de temperaturas de interesse.

4.2 Resultados de resposta térmica e robustez do sensor

Nesta seção são apresentados e discutidos os resultados relacionados à resposta térmica do sensor e à sua robustez frente a variações de temperatura. A análise parte do deslocamento diferencial das ressonâncias, utilizado para quantificar a estabilidade térmica (TS) e comparar, de forma direta, o impacto das modificações geométricas entre os dispositivos. Em seguida, é introduzido o coeficiente térmico residual (RTC) como métrica complementar para isolar a contribuição intrínseca do *chip* e separar a parcela associada ao analito, permitindo uma avaliação mais consistente da robustez térmica do sensor.

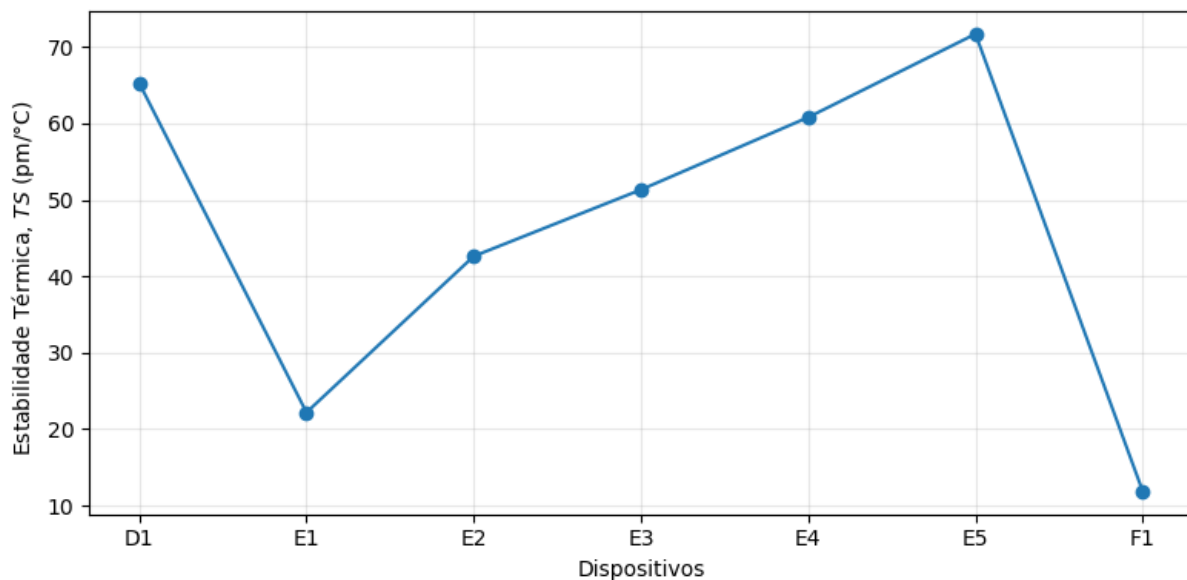
4.2.1 Deslocamento diferencial e estabilidade térmica (TS):

A estabilidade térmica (TS) do sensor foi quantificada a partir do deslocamento térmico das ressonâncias de detecção, expresso em $\text{pm}/^\circ\text{C}$, obtido por regressão linear do comprimento de onda ressonante em função da temperatura. Para facilitar a comparação direta entre as geometrias, a Figura 31 apresenta um resumo em termos de um valor representativo de TS, observado em regiões detectadas próximas a 1550 nm, para cada dispositivo, permitindo visualizar de forma compacta como as modificações geométricas afetam a sensibilidade cruzada à temperatura.

Observa-se inicialmente o efeito da variação da área de detecção: ao reduzir W_L de 90° (D1) para 45° (E1) e, em seguida, para 30° (F1), o valor de TS diminui de maneira acentuada, passando de aproximadamente $65 \text{ pm}/^\circ\text{C}$ (D1) para cerca de $22 \text{ pm}/^\circ\text{C}$ (E1) e atingindo o menor patamar, em torno de $12 \text{ pm}/^\circ\text{C}$ (F1). Esse resultado confirma que a redução da fração do anel exposta ao analito (e, conseqüentemente, a alteração da distribuição modal na região sensora) é uma estratégia eficaz para mitigar o *drift* térmico, aumentando a robustez do dispositivo frente a variações de temperatura.

Em contraste, quando W_L é mantido fixo em 45° e varia-se apenas o estrangulamento (dispositivos E1–E5), a tendência é oposta: a redução de W_t eleva progressivamente TS. A Figura 31 evidencia esse comportamento em acendente e linear, com TS aumentando de ~ 22 pm/°C (E1) para ~ 42 pm/°C (E2), ~ 51 pm/°C (E3), ~ 61 pm/°C (E4) e atingindo o maior valor em torno de ~ 72 pm/°C (E5). Esse aumento sistemático indica que o estrangulamento, ao reduzir o confinamento do modo e intensificar a participação do campo em regiões de maior resposta termo-óptica efetiva, tende a amplificar a sensibilidade cruzada à temperatura.

Figura 31 – Comparação da estabilidade térmica (TS) entre dispositivos com variação de W_L e W_t .



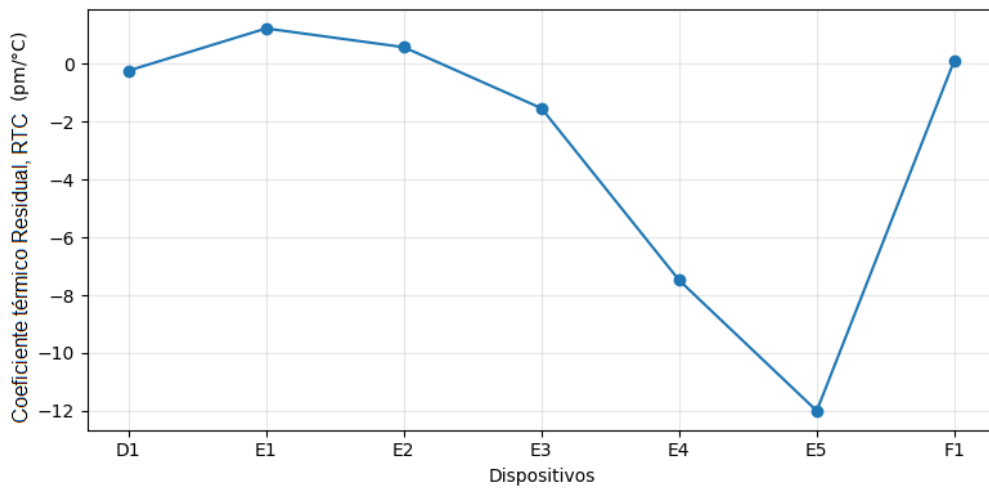
Valores representativos de estabilidade térmica TS (pm/°C) para cada dispositivo, extraídos de regiões de detecção localizadas próximas de $\lambda \approx 1.55 \mu\text{m}$, nas quais o pareamento entre ressonâncias de detecção e referência é válido. Fonte: Autor.

4.2.2 Coeficiente térmico residual: RTC

Conforme discutido na Seção 3.5.7, a estabilidade térmica medida \overline{TS}_i incorpora duas contribuições distintas: (i) um termo intrínseco do dispositivo, associado às variações termo-ópticas do *chip* e à distribuição modal, e (ii) um termo associado ao analito, proporcional à sensibilidade e ao coeficiente termo-óptico do fluido. Para separar essas parcelas e permitir uma comparação mais justa entre geometrias, foi estimado o RTC que quantifica o *drift* diferencial que ocorreria mesmo se o RI do analito não variasse com a temperatura, representando, portanto, uma aproximação métrica de robustez térmica intrínseca do sensor e que pode ser estimada pelo TS por meio da Equação 92.

A Figura 32 sintetiza os valores representativos de RTC obtidos para os dispositivos avaliados, extraídos de regiões de detecção próximas de $\lambda \approx 1.55 \mu\text{m}$. Observa-se que, para as geometrias associadas à variação da área de detecção (D1, E1 e F1), os valores de RTC permanecem próximos de zero, indicando que a contribuição intrínseca do *chip* para o *drift* diferencial é pequena nessas condições. Em particular, D1 apresenta um residual levemente negativo, enquanto E1 e F1 permanecem muito próximos de zero (com pequena variação de sinal). Assim, pela decomposição apresentada na Eq. (91), quando $\text{RTC}_i \approx 0$ o *drift* térmico diferencial medido é predominantemente determinado pelo termo associado ao analito, $S_i dn_a/dT$, e o valor de $\overline{\text{TS}}_i$ passa a refletir, de forma dominante, essa contribuição termo-óptica do fluido modulada pela sensibilidade do sensor.

Figura 32 – Coeficiente térmico residual (RTC) para diferentes geometrias do sensor.



Valores representativos de RTC (pm/°C) para cada dispositivo, obtidos a partir da análise diferencial entre as ressonâncias de detecção e referência. Os pontos apresentados foram extraídos de regiões de detecção próximas de $\lambda \approx 1.55 \mu\text{m}$, assegurando comparabilidade entre as geometrias. Fonte: Autor.

Em contraste, ao considerar a família com estrangulamento (E1–E5), nota-se uma tendência clara de crescimento em módulo do residual térmico à medida que W_t é reduzido. Enquanto E1 e E2 permanecem próximos de zero ou ligeiramente positivos, a partir de E3 o RTC torna-se negativo e cresce rapidamente em magnitude, atingindo os menores valores em E4 e, principalmente, em E5. Esse comportamento evidencia que o estrangulamento introduz uma assimetria térmica efetiva no deslocamento diferencial $\Delta\lambda$: ao modificar o confinamento modal no anel de detecção, aumenta-se a fração modal em regiões cuja resposta termo-óptica efetiva difere daquela do anel de referência, reduzindo a capacidade de cancelamento térmico intrínseco nesta família geométrica. O fato de o residual tornar-se negativo indica que, após remover a contribuição termo-óptica do analito, o chip tende a induzir um deslocamento diferencial com sinal oposto ao esperado a partir do termo

$S_i dn_a/dT$, reforçando que a distribuição modal e o balanço de contribuições termo-ópticas do dispositivo passam a se tornar mais relevantes em geometrias mais estranguladas.

4.3 Correlação entre S, TS e RTC

Os resultados obtidos permitem discutir de forma consolidada como as escolhas geométricas afetam simultaneamente a sensibilidade S e a robustez térmica do sensor. Ao comparar D1 e E1, a redução de aproximadamente 50% da área sensora ($W_L = 90^\circ \rightarrow 45^\circ$) levou a uma queda de sensibilidade da ordem de 70%, evidenciando que a interação luz-analito, controlada principalmente pela sobreposição modal na área exposta, é fortemente governada pela extensão da área de detecção. Em seguida, ao introduzir o estrangulamento ($W_t = 400$ nm), observou-se um aumento de sensibilidade de aproximadamente 70%, recuperando valores próximos aos obtidos em D1. Considerando apenas S e a estabilidade térmica medida \overline{TS} , esse comportamento sugere, à primeira vista, uma correlação direta entre as grandezas: sempre que S aumenta, \overline{TS} se desloca de forma consistente, o que poderia indicar — em uma análise simplificada — que a estabilidade térmica seria majoritariamente determinada pela sensibilidade.

Entretanto, essa leitura não se sustenta quando a contribuição termo-óptica do analito é removida explicitamente. A Equação (91) apresenta uma forma simplificada da decomposição de TS de modo que o coeficiente térmico residual possa ser isolado (Equação 92) com a parcela intrínseca do chip associada ao *drift* diferencial, isto é, aquela que persistiria mesmo na ausência de variação de índice do analito com a temperatura.

Ao analisar RTC, observa-se que a geometria altera significativamente o *drift* residual mesmo após a compensação do analito: de D1 para E1, RTC aumenta em torno de 121%, passando de -0.24 pm/°C para 1.22 pm/°C, ao passo que a implementação do estrangulamento reduz RTC em aproximadamente 97%, deslocando-o de -0.24 pm/°C para -7.5 pm/°C. Esses resultados evidenciam que não é possível atribuir \overline{TS} apenas à sensibilidade: dispositivos que atingem sensibilidades similares podem apresentar contribuições residuais distintas, determinadas pela distribuição modal, pelo balanço térmico entre as cavidades e pelas assimetrias introduzidas pela geometria.

Em termos físicos, \overline{TS} contém uma parcela naturalmente correlacionada com S , pois o termo $S(dn_a/dT)$ traduz a contribuição termo-óptica do analito modulada pela interação luz-analito. Entretanto, os resultados de RTC mostram que existe uma parcela adicional, de origem geométrica/dispositiva, associada a como o *chip* impõe o deslocamento diferencial entre o anel de detecção e o anel de referência. Assim, o controle de \overline{TS} requer simultaneamente (i) engenharia da interação com o analito (que define S) e (ii) engenharia do *drift* intrínseco da arquitetura diferencial. Esse ponto é particularmente relevante do ponto de vista de otimização: embora a melhoria observada em termos de estabilidade térmica total entre geometrias com sensibilidade semelhante (por exemplo, D1

e E4) seja modesta, os resultados demonstram que é possível preservar níveis de sensibilidade comparáveis e ainda assim modificar o *drift* residual apenas por ajustes geométricos. Em outras palavras, a geometria não apenas determina quanto o sensor é sensível ao analito, mas também determina como a arquitetura cancela (ou amplifica) o *drift* térmico intrínseco, abrindo espaço para otimização conjunta de desempenho e robustez térmica.

Com base nesses resultados, podem-se estabelecer diretrizes práticas para o projeto do sensor visando minimizar perturbações térmicas sem comprometer a operação refratométrica:

- **Reduzir W_L como estratégia primária de robustez térmica:** diminuir a área de detecção reduz a sobreposição modal com o analito e, conseqüentemente, limita S . Como a estabilidade térmica medida contém o termo $S (dn_a/dT)$, a redução de W_L atua diretamente na mitigação da contribuição termo-óptica do fluido, diminuindo a sensibilidade cruzada à temperatura.
- **Aplicar estrangulamento moderado como estratégia de recuperação de sensibilidade:** a redução de W_t é o mecanismo mais eficiente para recuperar (ou elevar) S mantendo W_L fixo, permitindo ganhos substanciais mesmo em áreas de detecção moderadas. Contudo, como o estrangulamento também pode aumentar a contribuição intrínseca do dispositivo (capturada por RTC), o valor de W_t deve ser selecionado de forma conservadora, buscando um ponto de compromisso em que S seja recuperada sem deslocar RTC para patamares elevados em módulo.

4.4 Validação do modelo térmico estendido

Nesta seção propõe-se uma extensão do modelo térmico diferencial aplicado à molécula fotônica, com o objetivo de reproduzir simultaneamente: (i) a tendência observada para a estabilidade térmica $TS(\lambda)$ e (ii) a forte dependência geométrica do termo residual $RTC(\lambda)$, particularmente em função do estrangulamento do guia (largura efetiva w).

Para a validação, empregam-se dados amostrais obtidos previamente nas simulação, restringindo o espaço de teste às geometrias da família E com estrangulamento (E2-E5), pois permitem balizar, de forma controlada, os ganhos em sensibilidade e as variações do comportamento térmico. A avaliação é realizada em duas regiões espectrais distintas, centradas aproximadamente em $\lambda \approx 1460$ nm e $\lambda \approx 1550$ nm.

A Tabela 7 resume os resultados simulados para os dispositivos E2–E5, contemplando as métricas $RTC(\lambda)$, $TS(\lambda)$ e sensibilidade $S(\lambda)$ nas duas regiões espectrais analisadas.

Tabela 7 – Resultados simulados para E2–E5 nas regiões espectrais $\lambda \approx 1460$ nm e $\lambda \approx 1550$ nm.

Dispositivo	$\lambda \approx 1460$ nm			$\lambda \approx 1550$ nm		
	RTC (pm/°C)	TS (pm/°C)	S (nm/RIU)	RTC (pm/°C)	TS (pm/°C)	S (nm/RIU)
E2	1.046	37.42	40.989	0.572	46.72	43.209
E3	-1.311	47.16	54.513	-1.539	54.62	61.624
E4	-5.186	56.98	70.138	-7.483	63.66	78.008
E5	-13.317	62.32	85.398	-12.000	73.22	93.504

4.4.1 Modelagem empírica do termo residual $RTC(\lambda)$

Para estimar $RTC(\lambda)$ de forma compacta, aproxima-se a relação obtida a partir da Eq. 92 por um modelo empírico de potência em função do estrangulamento:

$$RTC_{\text{teo}}(w) = RTC_0 + B \left(\frac{w_0}{w} \right)^p, \quad (94)$$

em que w representa a largura efetiva adotada no estrangulamento e w_0 é a largura de referência (fixada como $w_0 = 600$ nm).

O ajuste numérico foi realizado na região $\lambda \approx 1550$ nm (escolhida por estar mais próxima do centro do espectro analisado), resolvendo-se um sistema com três incógnitas a partir de três amostras do conjunto E2–E5. Os parâmetros obtidos foram:

$$RTC_0 = 6.90617, \quad B = -6.33417, \quad p = 1.57763.$$

Aplicando-se a Eq. (94), obtém-se a comparação entre RTC simulado e RTC_{teo} indicada na Tabela 8.

Tabela 8 – Comparação entre RTC simulado e RTC_{teo} .

Dispositivo	$\lambda \approx 1460$ nm			$\lambda \approx 1550$ nm		
	RTC (pm/°C)	RTC_{teo} (pm/°C)	Erro (%)	RTC (pm/°C)	RTC_{teo} (pm/°C)	Erro (%)
E2	1.046	0.572	-45.320	0.572	0.572	0.000
E3	-1.311	-1.539	17.390	-1.5390	-1.539	0.000
E4	-5.186	-5.10254	-1.610	-7.483	-5.102	-31.810
E5	-13.317	-12.000	-9.890	-12.000	-12.000	0.000

4.4.2 Reconstrução de $TS(\lambda)$ a partir de $S(\lambda)$ e $RTC(\lambda)$

A decomposição de $TS(\lambda)$ apresentada na Eq. 91 permite definir uma estimativa teórica:

$$TS_{\text{teo}}(\lambda) = a S(\lambda) + RTC_{\text{teo}}(\lambda), \quad (95)$$

em que a é o coeficiente termo-óptico do analito (aproximação linear local). Nas simulações, utilizou-se o analito virtual descrito na Seção 3.3.2.1, definido pela Eq. 79 a partir dos coeficientes da Tabela 1, conforme detalhado anteriormente. A partir de dois pontos em $\lambda \approx 1.55 \mu\text{m}$ (por exemplo, $T = 20^\circ\text{C}$ e $T = 25^\circ\text{C}$), obtém-se $a \approx 9.1 \times 10^{-4}$.

A Tabela 9 apresenta a comparação entre TS simulado e TS_{teo} calculado pela Eq. (95).

Tabela 9 – Comparação entre TS simulado e TS_{teo} .

Dispositivo	$\lambda \approx 1460 \text{ nm}$			$\lambda \approx 1550 \text{ nm}$		
	TS (pm/°C)	TS_{teo} (pm/°C)	Erro (%)	TS (pm/°C)	TS_{teo} (pm/°C)	Erro (%)
E2	37.42	37.87199	1.21	46.72	39.89219	-14.61
E3	47.16	48.06783	1.92	54.62	55.45388	-0.15
E4	56.98	58.72304	3.06	63.66	65.88474	3.49
E5	62.32	65.71218	5.44	73.22	73.08864	-0.18

4.4.3 Análise dos resultados

Os resultados evidenciam que o modelo de potência da Eq. (94) é capaz de interpolar com boa exatidão a região $\lambda \approx 1550 \text{ nm}$ para os pontos utilizados no ajuste (erro nulo em E2, E3 e E5). Esse comportamento, embora esperado por construção (três incógnitas ajustadas por três equações), é útil para verificar coerência dimensional e tendência funcional de RTC com w , em um modelo empírico de engenharia e ajustado localmente. Entretanto, a discrepância observada para E4 em $\lambda \approx 1550 \text{ nm}$ (erro de -31.81%) indica que o conjunto completo não é perfeitamente descrito por uma lei de potência única com parâmetros globais, sugerindo ao menos uma das seguintes hipóteses físicas/modelares:

- **Dependência espectral não capturada:** RTC pode apresentar variação adicional com λ (ou com o modo excitado) que não é absorvida pela forma funcional escolhida.
- **Mudança de regime geométrico:** o estrangulamento pode alterar a distribuição modal e o acoplamento entre cavidades de maneira não monótona, produzindo um desvio local (como em E4) em relação a uma lei simples.
- **Sensibilidade do ajuste a ruído e incertezas numéricas:** Hipótese mais provável. Como os parâmetros são inferidos a partir de um conjunto reduzido de amostras, pequenas incertezas em RTC propagam-se de forma não linear para os parâmetros do modelo (especialmente B e p), podendo induzir variações relevantes. Adicionalmente, existem incertezas intrínsecas ao próprio espectro de resposta, associadas (i)

à interação e eventual hibridização entre ressonâncias do anel de detecção e do anel de referência (o que pode deslocar/alterar a identificação de mínimos), e (ii) ao uso de métricas agregadas (p. ex., médias/derivadas médias em regiões espectrais) em vez de valores pontuais, o que tende a suavizar a resposta e introduzir viés quando a curva apresenta dispersões locais.

Na região $\lambda \approx 1460$ nm, a utilização dos mesmos parâmetros calibrados em $\lambda \approx 1550$ nm resulta em erros mais dispersos entre os dispositivos (por exemplo, -45.32% em E2 e -1.61% em E4), evidenciando que a extrapolação espectral do termo residual com parâmetros fixos possui aplicabilidade limitada. Em outras palavras, um ajuste realizado em 1550 nm não assegura, de forma geral, a predição quantitativa de RTC em outra janela espectral; ainda assim, o modelo preserva a tendência global e pode servir como um preditor de primeira ordem, especialmente para capturar a variação monotônica esperada com o estrangulamento.

Ao reconstruir TS via Eq. (95), observa-se que:

- Em $\lambda \approx 1460$ nm, o modelo apresenta boa concordância global (erros entre 1.21% e 5.44%), apesar de RTC_{teo} não ser particularmente preciso para todos os dispositivos. Isso sugere que, nessa região, o termo aS (com a fixo) contribui de maneira dominante para a variação de TS , tornando TS menos sensível a erros moderados em RTC_{teo} .
- Em $\lambda \approx 1550$ nm, o modelo permanece extremamente preciso para E3 e E5 (erros -0.23% e -0.18%), mas apresenta discrepância significativa em E2 (-14.61%). Como RTC_{teo} em E2 é forçado a coincidir com RTC (erro nulo), a principal fonte de desvio tende a estar na hipótese de a constante e/ou em não linearidades locais do índice do analito com a temperatura (ou ainda em efeitos modais específicos que façam TS não ser estritamente decomposto por um único a efetivo).

Em síntese, os dados validam a utilidade da decomposição $TS \approx aS + RTC$ para separar a contribuição associada ao analito (via aS) do termo residual associado ao dispositivo/cavidades (via RTC)

4.5 Caso particular: Analito Água

Como discutido na Seção 3.3.2, foi definido um material similar à água com dependência simultânea do índice de refração em função da temperatura T e do comprimento de onda λ , de modo a permitir controle e rastreabilidade completos do analito ao longo das simulações. Entretanto, o coeficiente termo-óptico efetivo obtido para esse material construído ($a \approx 9.1 \times 10^{-4}$) é aproximadamente uma ordem de grandeza superior ao coeficiente termo-óptico típico da água ($a_{\text{H}_2\text{O}} \sim 10^{-4}$). Essa diferença implica um cenário

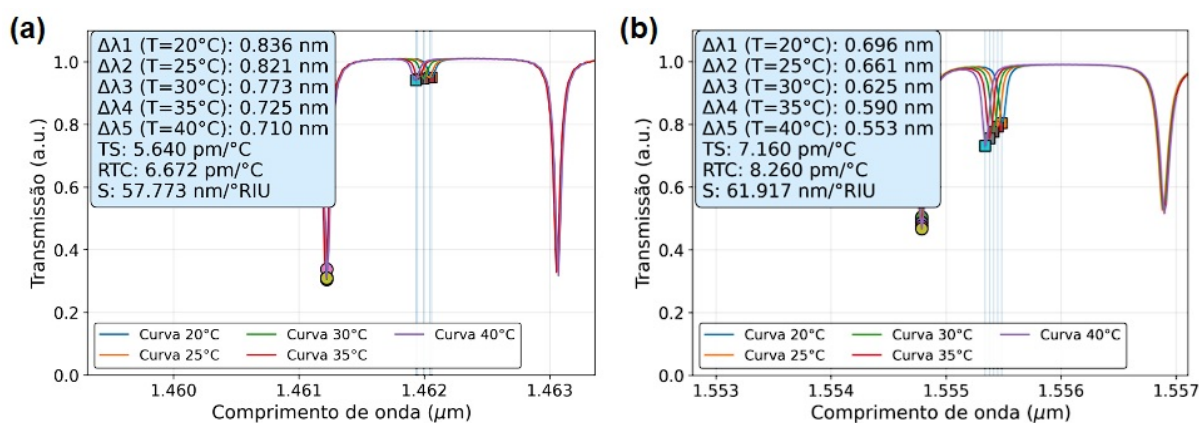
mais desafiador, uma vez que o termo do analito exerce influência direta sobre a estabilidade térmica do sensor (via componente proporcional à sensibilidade), amplificando a contribuição termo-óptica no deslocamento espectral.

Dessa forma, investigou-se um caso particular por meio de uma aproximação simplificada para a água. Para isso, adotou-se o índice de refração reportado em (KEDENBURG et al., 2012) e incorporou-se um coeficiente termo-óptico típico da água, $a \approx 1 \times 10^{-4} \text{ } ^\circ\text{C}^{-1}$, de modo a emular a dependência de n com a temperatura. Nessa configuração, o material definido para *Analito*₁ (água) também foi utilizado como base para *Analito*₂, que corresponde a uma solução aquosa de EG. Como essa modificação reduz a variação termo-óptica associada ao *Analito*₁ em comparação ao material anteriormente empregado, adotou-se para *Analito*₂ uma concentração mais elevada de EG (5%), em substituição à solução previamente considerada (1.25%).

Esse novo conjunto de parâmetros foi então empregado na estimativa dos coeficientes teóricos RTC_{teo} e TS_{teo} , utilizando como base os valores previamente obtidos nas simulações com o material virtual. Em seguida, o dispositivo E3 foi novamente simulado considerando os novos materiais definidos para *Analito*₁ e *Analito*₂, permitindo a comparação direta entre os resultados teóricos previstos e aqueles obtidos numericamente.

A Figura 33 apresenta a resposta espectral nas regiões próximas a 1460nm e 1550nm, enquanto os valores extraídos dessas simulações são apresentados na Tabela 10, juntamente com as respectivas diferenças em relação às previsões teóricas.

Figura 33 – Resposta espectral do dispositivo E3 para o cenário com analito água.



(a) Região espectral em torno de 1460nm e (b) região espectral em torno de 1550nm. As curvas correspondem às temperaturas de 20 a 40°C, evidenciando o deslocamento das ressonâncias com a variação térmica. Os valores de $\Delta\lambda$, bem como os coeficientes extraídos de estabilidade térmica (TS), coeficiente térmico residual (RTC) e sensibilidade (S), são indicados em cada gráfico. Fonte: Autor.

Observa-se que o erro associado à estabilidade térmica TS permanece reduzido, sendo da ordem de 0.5 pm/°C em 1460nm e 1.25 pm/°C em 1550nm. Esses resulta-

Tabela 10 – Comparação entre valores teóricos e simulados para 1460 nm e 1550 nm.

	1460 nm			1550 nm		
	S (nm/RIU)	TS (pm/°C)	RTC (pm/°C)	S (nm/RIU)	TS (pm/°C)	RTC (pm/°C)
Teórico	53.726	7.179	-2.4916	60.525	8.403	-2.4916
Simulado	57.773	6.672	5.64	61.917	7.16	8.313
Diferença	-4.05	0.51	-8.13	-1.39	1.24	-10.80

dos indicam que a aproximação adotada, conforme descrita pelo modelo da Equação 93, fornece uma estimativa consistente como primeira aproximação para a previsão do comportamento térmico do dispositivo quando submetido a diferentes analitos.

Por outro lado, verifica-se que o erro associado ao RTC é significativamente mais elevado. Esse resultado evidencia limitações da abordagem empregada, particularmente na modelagem simplificada dos efeitos térmicos associados à estrutura do dispositivo em um único termo constante Equação 89. Tal discrepância sugere que contribuições adicionais, como a distribuição espacial de temperatura, as propriedades termo-ópticas dos materiais estruturais e os efeitos de acoplamento entre modos, não são plenamente capturadas pela constante RTC. Dessa forma, torna-se necessária uma investigação mais aprofundada desses mecanismos, visando aprimorar a capacidade preditiva do modelo.

Capítulo 5

Conclusão

Este trabalho teve como objetivo principal investigar a influência de parâmetros geométricos, especificamente a área de detecção (W_L) e o estrangulamento (W_t), no desempenho de sensores baseados em MRR e PMs. A análise focou na sensibilidade (S), na estabilidade térmica (TS) e na robustez do sensor, buscando otimizar o projeto para aplicações de sensoriamento. Os resultados obtidos fornecem uma compreensão aprofundada dos mecanismos físicos envolvidos e estabelecem diretrizes claras para o desenvolvimento de dispositivos mais eficientes e estáveis.

Os resultados obtidos por simulação demonstram que os objetivos propostos foram plenamente alcançados. Observou-se que o aumento da área de detecção (W_L) resulta em uma elevação direta da sensibilidade do sensor, com o dispositivo D1 apresentando os maiores valores de S . Contudo, essa estratégia introduz um trade-off com a dispersão espectral e a sensibilidade térmica residual. De maneira complementar, a redução do estrangulamento (W_t) mostrou-se uma abordagem altamente eficaz para amplificar a sensibilidade, com o dispositivo E5 (300 nm) atingindo um ganho superior a quatro vezes em comparação com E1. Esse comportamento é atribuído à redução do confinamento lateral do campo óptico, o que intensifica a interação com o analito. A análise da estabilidade térmica revelou que a redução de W_L melhora a robustez térmica, enquanto o estrangulamento do guia, além de aumentar a sensibilidade, eleva o coeficiente térmico residual RTC em módulo, tornando o sensor mais suscetível a variações térmicas intrínsecas e contrabalanceando tendências do analito, contribuindo, ainda que em menor magnitude, para a mitigação térmica.

As contribuições metodológicas e técnicas deste trabalho são significativas, residindo principalmente no estabelecimento de diretrizes de projeto orientadas pela viabilidade de extração e pela robustez térmica. Demonstrou-se que a escolha dos parâmetros

W_L e W_t deve ser balizada pelo FSR disponível para evitar regimes de ambiguidade no pareamento de ressonâncias e distorções espectrais por proximidade modal. Adicionalmente, validou-se um modelo térmico estendido ($TS \approx aS + RTC$) com alta precisão, apresentando erros inferiores a 6% na maioria dos casos. Este modelo permite uma compreensão mais acurada da interação entre sensibilidade e estabilidade térmica, oferecendo uma ferramenta valiosa para o projeto de sensores. Adicionalmente, a demonstração da possibilidade de atingir uma compensação térmica ($TS \approx 0$) por meio do ajuste do estrangulamento, para analitos com baixo coeficiente termo-óptico, como a água, representa um avanço importante para a mitigação de efeitos indesejados da temperatura em sistemas de sensoriamento óptico. As diretrizes de projeto estabelecidas, que consideram o balanço entre W_L e W_t para otimizar S e TS , são diretamente aplicáveis no desenvolvimento de futuras gerações de sensores.

É importante ressaltar que as limitações observadas incluem a migração de ressonâncias para fora da faixa de pareamento (FSR) em geometrias com alta sensibilidade (D1, E4, E5), o que pode restringir a faixa operacional efetiva (MDVR) dos dispositivos, especialmente sob variações de temperatura. Além disso, a proximidade espectral entre ressonâncias de detecção e referência pode introduzir distorções e incertezas na extração de dados. Essas observações delimitam o escopo de validade dos resultados e apontam para a necessidade de considerar esses fatores no projeto de sensores de alta performance.

Conclui-se que o objetivo de analisar e estabelecer critérios de projeto foi atingido na medida em que os resultados permitem justificar escolhas geométricas com base em relações de causa e efeito observadas: aumentar W_L eleva a sensibilidade, mas tende a aumentar a resposta térmica; o estrangulamento, por sua vez, é uma estratégia eficiente para recuperar sensibilidade com W_L fixo; e a estabilidade térmica resulta do balanço entre contribuição termo-óptica modulada pela interação luz-analito e contribuição residual da arquitetura diferencial. Assim, o trabalho fornece uma base tecnicamente consistente para orientar o projeto de sensores com compromisso controlado entre sensibilidade, robustez térmica e viabilidade de extração das métricas ao longo do espectro e da temperatura.

Referências

ALDUINO, A.; PANICCIA, M. Interconnects: Wiring electronics with light. **Nature Photonics**, v. 1, p. 153–155, 03 2007.

ASGHARI, A. et al. Fast, accurate, point-of-care covid-19 pandemic diagnosis enabled through advanced lab-on-chip optical biosensors: Opportunities and challenges. **Appl. Phys. Rev.**, v. 8, n. 3, p. 031313, 2021. Disponível em: <<https://doi.org/10.1063/5.0022211>>.

BAEHR-JONES, T. et al. Optical modulation and detection in slotted silicon waveguides. **Opt. Express**, Optica Publishing Group, v. 13, n. 14, p. 5216–5226, Jul 2005. Disponível em: <<https://opg.optica.org/oe/abstract.cfm?URI=oe-13-14-5216>>.

BAKER, R. **CMOS Circuit Design, Layout, and Simulation, Revised Second Edition**. [S.l.: s.n.], 2007. ISBN 978-0470229415.

BAREA, L. A. M. **Desenvolvimento de Estruturas Monolíticas de Guias de Ondas Acoplados a Micro-Cavidades**. 2010. Tese (Mestrado) – Instituto de Física Gleb Wataghin, Universidade Estadual de Campinas, Campinas-SP, Brasil.

BAREA, L. A. M. **Moléculas Fotônicas para aplicações em engenharia espectral e processamento de sinais ópticos**. 2014. Tese (Doutorado) – Instituto de Física Gleb Wataghin, Universidade Estadual de Campinas, Campinas-SP, Brasil.

BAREA, L. A. M. et al. Enhanced q with internally coupled microring resonators. In: **CLEO: 2013**. [S.l.: s.n.], 2013. p. 1–2. ISSN 2160-8989.

BAREA, L. A. M. et al. Spectral engineering with cmos compatible soi photonic molecules. **IEEE Photonics Journal**, v. 5, n. 6, p. 2202717–2202717, Dec 2013. ISSN 1943-0655.

BARWICZ, T. et al. Microring-resonator-based add-drop filters in sin: fabrication and analysis. **Optics Express**, v. 12, p. 1437–1442, 04 2004.

BASHKATOV, A. N.; GENINA, E. A. Water refractive index in dependence on temperature and wavelength: a simple approximation. In: TUCHIN, V. V. (Ed.). **Saratov Fall Meeting 2002: Optical Technologies in Biophysics and Medicine IV**. [S.l.: s.n.], 2003. (Proceedings of SPIE, v. 5068), p. 393–395.

DELI, M. A. et al. Lab-on-a-chip models of the blood–brain barrier: evolution, problems, perspectives. **Lab Chip**, The Royal Society of Chemistry, v. 24, p. 1030–1063, 2024. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1039/D3LC00996C>>.

FIBBEN, K. et al. From lab-on-a-chip to lab-on-a-chip-in-the-lab: a perspective of clinical laboratory medicine for the microtechnologist. **Lab Chip**, The Royal Society of Chemistry, v. 25, p. 2566–2577, 2025. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1039/D4LC00614C>>.

FONSTAD, C. G. **Lecture 17: Rectangular Waveguides/Photonic Crystals and Radiative Recombination (Outline)**. 2003. Course: 6.772 (Compound Semiconductor Devices), Spring 2003. Lecture notes (PDF: [lecture17v2.pdf](#)). Disponível em: <<https://ocw.mit.edu/courses/6-772-compound-semiconductor-devices-spring-2003/resources/lecture17v2/>>.

GURKAN, U. A. et al. Next generation microfluidics: fulfilling the promise of lab-on-a-chip technologies. **Lab Chip**, The Royal Society of Chemistry, v. 24, p. 1867–1874, 2024. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1039/D3LC00796K>>.

KEDENBURG, S. et al. Linear refractive index and absorption measurements of nonlinear optical liquids in the visible and near-infrared spectral region. **Optical Materials Express**, v. 2, n. 11, p. 1588–1611, 2012.

KONINCK, Y. D.; ROELKENS, G.; BAETS, R. Electrically pumped 1550 nm single mode iii-v-on-silicon laser with resonant grating cavity mirrors. **Laser & Photonics Reviews**, v. 9, n. 2, p. L6–L10, 2015. Disponível em: <<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/lpor.201400448>>.

LIANG, D.; BOWERS, J. Recent progress in lasers on silicon. **Nature Photonics**, v. 4, p. 511–517, 07 2010.

LUAN, E. et al. Silicon photonic biosensors using label-free detection. **Sensors**, v. 18, p. 3519, 2018.

MILLER, D. Rationale and challenges for optical interconnects to electronic chips. **Proceedings of the IEEE**, v. 88, n. 6, p. 728–749, June 2000. ISSN 1558-2256.

MOORE, G. Cramming more components onto integrated circuits, reprinted from electronics, volume 38, number 8, april 19, 1965, pp.114 ff. **Solid-State Circuits Newsletter, IEEE**, v. 11, p. 33 – 35, 10 2006.

MORAS, A. L. et al. Silicon nitride photonic molecules for robust sensing applications. In: LEE, B. et al. (Ed.). **Frontiers in Optics / Laser Science**. [S.l.], 2020. p. JTh4B.12.

MORAS, A. L. et al. Enhanced sensitivity photonic molecule sensor based on embedded tapered microring resonators. In: **2022 IEEE Photonics Conference (IPC)**. [S.l.: s.n.], 2022. p. 1–2.

MORAS, A. L. et al. Integrated photonic platform for robust differential refractive index sensor. **IEEE Photonics Journal**, v. 12, n. 5, p. 1–10, 2020.

- ORAEVSKY, A. N. Whispering-gallery waves. **Quantum Electronics**, v. 32, n. 5, p. 377, may 2002. Disponível em: <<https://doi.org/10.1070/QE2002v032n05ABEH002205>>.
- PADMARAJU, K.; BERGMAN, K. Resolving the thermal challenges for silicon microring resonator devices. **Nanophotonics**, v. 3, n. 4-5, p. 269–281, 2014.
- SADAGOPAN, T. et al. Carrier-induced refractive index changes in inp-based circular microresonators for low-voltage high-speed modulation. **IEEE Photonics Technology Letters**, v. 17, n. 2, p. 414–416, 2005.
- SADAGOPAN, T. et al. High-speed, low-voltage modulation in circular wgm microresonators. In: **Digest of the LEOS Summer Topical Meetings Biophotonics/Optical Interconnects and VLSI Photonics/WBM Microcavities, 2004**. [S.l.: s.n.], 2004. p. 2 pp.–.
- SAUNDERS, J. E. et al. Refractive indices of common solvents and solutions at 1550 nm. **Applied Optics**, v. 55, n. 4, p. 947–953, 2016.
- SCHWELB, O. A decade of progress in microring and microdisk based photonic circuits: a personal selection. In: KUDRYASHOV, A. V.; PAXTON, A. H.; ILCHENKO, V. S. (Ed.). **Laser Resonators and Beam Control X**. SPIE, 2008. v. 6872, p. 68720H. Disponível em: <<https://doi.org/10.1117/12.772046>>.
- SEGELSTEIN, D. J. **The Complex Refractive Index of Water**. Dissertação (M.S. Thesis) — University of Missouri–Kansas City, 1981. Disponível em: <<https://mospace.umsystem.edu/xmlui/handle/10355/11599>>.
- VLASOV, Y. A. Silicon photonics for next generation computing systems. In: **2008 34th European Conference on Optical Communication**. [S.l.: s.n.], 2008. p. 1–2. ISSN 1550-381X.
- WANLASS, F. M. **Low stand-by power complementary field effect circuitry**. 1967. United States Patent 3,356,858. Patented Dec. 5, 1967.
- YARIV, A. Universal relations for coupling of optical power between microresonators and dielectric waveguides. **Electronics Letters**, v. 36, p. 321 – 322, 03 2000.
- ZHANG, Y.-n. et al. Optical bio-chemical sensors based on whispering gallery mode resonators. **Nanoscale**, v. 10, 2018.
- ZHENG, S.; CHEN, H.; POON, A. W. Microring-resonator cross-connect filters in silicon nitride: Rib waveguide dimensions dependence. **IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics**, v. 12, n. 6, p. 1380–1387, Nov 2006. ISSN 1558-4542.