

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

Lucas Eduardo Ribeiro Duarte

Otimização da Sensibilidade de Sensores Ópticos de Índice de Refração Baseados em Guias de Onda

SÃO CARLOS - SP

2021

Lucas Eduardo Ribeiro Duarte

Otimização da Sensibilidade de Sensores Ópticos de Índice de Refração Baseados em Guias de Onda

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: Sistemas Elétricos e Eletrônicos.

Orientador: Prof. Dr. Luís Alberto Mijam Barêa

SÃO CARLOS - SP

2021



UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS

Centro de Ciências Exatas e de Tecnologia
Programa de Pós-Graduação em Engenharia Elétrica

Folha de Aprovação

Defesa de Dissertação de Mestrado do candidato Lucas Eduardo Ribeiro Duarte, realizada em 24/06/2021.

Comissão Julgadora:

Prof. Dr. Luís Alberto Mijam Barêa (UFSCar)

Prof. Dr. Giuseppe Antonio Cirino (UFSCar)

Prof. Dr. Newton Cesário Frateschi (UNICAMP)

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001.

O Relatório de Defesa assinado pelos membros da Comissão Julgadora encontra-se arquivado junto ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Elétrica.

*Dedico este trabalho a minha família
por sempre me apoiar e incentivar a cada novo desafio.*

AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente a Deus, por me dar sabedoria, persistência, paciência e perseverança durante todo o programa.

Gostaria de expressar minha mais profunda gratidão ao meu orientador, Professor Dr. Luís Alberto Mijam Barêa, por sua orientação e incentivo durante meu mestrado. Gostaria de agradecer a ele por ter me dado um direcionamento inicial para minhas pesquisas, sempre me dando liberdade para focar nas áreas acadêmicas de grande interesse. Ele sempre me recomendou algumas conferências acadêmicas para expandir minha visão acadêmica. Seus comentários positivos e oportuno sobre meus manuscritos e relatórios torna meu progresso de pesquisa bastante fluente. Cada conversa com ele é um momento agradável.

Agradeço também aos meus pais, Maria Beatriz e José Carlos pelo apoio que me deram ao longo da minha vida e ao meu irmão Carlos Antônio pela amizade. Sem o carinho, incentivo e paciência deles, não teria terminado esta dissertação.

À UFSCar e ao Programa de Pós Graduação em Engenharia Elétrica pela oportunidade oferecida em poder me proporcionar um crescimento profissional. Por fim, agradeço ao Prof. Dr. Newton Frateschi, do Laboratório de Pesquisa em Dispositivos (LPD) da Universidade Estadual de Campinas, pelo suporte computacional para as simulações apresentadas nessa dissertação.

RESUMO

A crescente demanda por plataformas de detecção óptica que sejam confiáveis e ao mesmo tempo fáceis de usar e compactas, que requerem baixo consumo de amostra e forneçam alta sensibilidade e monitoramento em tempo real, proporcionaram inovações consideráveis no projeto de sensores ópticos nos últimos anos. Dentre todos eles, destacam-se os guias de onda que utilizam o esquema de detecção baseado em intensidade, estes dispositivos têm sido objeto de grande interesse científico, pois fornecem alta sensibilidade e simplicidade no esquema de detecção. Com o avanço das técnicas de nanofabricação, o desenvolvimento de sensores ópticos baseados em nanoestruturas de guias de onda tem representado uma excelente forma de integrá-los as plataformas conhecidas como laboratório em um chip (*lab-on-a-chip*). Nesse contexto, um sensor com índice de refração baseado em detecção de intensidade de guia de onda é proposto e analisado numericamente. Basicamente, o sensor é composto por uma estrutura com um guia de onda estrangulado de Si_3N_4 sobre um substrato de SiO_2 e integrado com uma janela de detecção. O design do guia de onda estrangulado tem como objetivo ampliar área de interação do campo evanescente, com o intuito de aumentar a sensibilidade do dispositivo. A fim de verificar o desempenho do sensor e fornecer uma simulação numérica de alta fidelidade, o método de propagação de feixe semi-vetorial 3D é utilizado. A máxima sensibilidade homogênea e de superfície calculadas foram 1701 %/RIU e 1.74%/nm. Os resultados sugerem que o sensor proposto pode detectar uma mudança significativa no índice de refração e na espessura da camada de uma proteína em soluções aquosas. Adicionalmente, a presente investigação propõe um dispositivo óptico compacto, estruturalmente simples e de alto desempenho para análise bioquímica.

Palavras-chaves: Sensores ópticos, Simulação numérica, Campo evanescente, Guias de onda, Sensibilidade.

ABSTRACT

The growing demand for optical detection platforms that are reliable, yet easy to use and compact, which require low sample consumption and provide high sensitivity and real-time monitoring, have brought about considerable innovations in the design of optical sensors in recent years. Among them, the waveguides that use the detection scheme based on intensity stand out. These devices have been objects of great scientific interest, as they provide high sensitivity and simplicity in the detection scheme. With the advancement of nanofabrication techniques, the development of optical sensors based on waveguide nanostructures has represented an excellent way to integrate them into platforms known as a lab-on-a-chip. In this context, a refractive index sensor based on the intensity detection is proposed and numerically simulated. The proposed sensor is composed of a structure with a tapered waveguide of silicon nitride on a glass substrate, integrated with a sensing window. The tapered waveguide design aims to expand the interaction area of the evanescent field with the analyte, increasing the device sensitivity. In order to verify the sensor performance and provide a high fidelity numerical simulation, a 3D semi-vectorial beam propagation method is employed. Both bulk and surface maximum sensitivity was computed and the values 1701 %/RIU and 1.74 %/nm were obtained, respectively. The results suggest that the proposed sensor can detect a significant change on the refractive index and the layer thickness of a protein on aqueous solutions. Finally, the present investigation proposes an optical device that is compact, structurally simple and provides high performance for biochemical analysis.

Key-words: Optical sensors, Numerical simulation, Evanescent field, Waveguides, Sensitivity.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 – Representação esquemática de um biossensor óptico.	32
Figura 2 – Onda eletromagnética se propagando na direção do vetor de onda k , que é perpendicular ao campo elétrico E e ao campo magnético H	33
Figura 3 – Guia de onda <i>slab</i> assimétrico.	38
Figura 4 – Distribuição do campo elétrico do modo TE_0 simétrico e do modo TE_1 assimétrico. (a) Guia de onda <i>slab</i> simétrico e (b) guia de onda <i>slab</i> assimétrico.	42
Figura 5 – O modo a esquerda é um modo TE_0 guiado. O modo do meio é um modo de radiação TE_1 . O modo a direita é um modo de substrato TE_1	43
Figura 6 – Esboço da seção transversal de um guia de onda retangular em 2D.	45
Figura 7 – Distribuições de intensidade de campo elétrico dos modos (a) quasi-TE e (b) quasi-TM em um guia de onda de nitreto de silício 300×500 nm, operando com um comprimento de onda de 632 nm.	46
Figura 8 – Perfis modais investigados por simulações BPM. (a) Quasi-TM e (b) quasi-TE.	47
Figura 9 – Interação da onda evanescente com o analito.	48
Figura 10 – Princípio de detecção de sensores de guia de onda baseado em campo evanescente.	49
Figura 11 – Dois mecanismos de sensibilidade. (a) Sensibilidade de superfície e (b) sensibilidade homogênea.	51
Figura 12 – Representação esquemática tridimensional de diferentes configurações de guias de onda. (a) <i>slab</i> . (b) <i>buried</i> . (c) <i>diffused</i> . (d) <i>strip-loaded</i> . (e) <i>ridge</i> . (f) <i>rib</i>	53
Figura 13 – (a) Distribuição de intensidade do campo elétrico de uma seção transversal de um guia de onda slot imerso em $n_{clad} = 1.44$. (b) Biossensor de microcavidade baseado em slot. À esquerda: vista superior de uma microcavidade de anel ressonante de guia de onda de Si_3N_4 . À direita: imagem do microscópio eletrônico de varredura (MEV) da região de acoplamento. (c) Biossensor de micro-anéis de guia de onda baseados em <i>slots</i> . (d) Biossensor de guia de onda multi-slot. (e) Biossensor baseado em um guia de onda de <i>slot</i> cruzado.	54
Figura 14 – Imagens do MEV do (a) micro-disco suspenso e (b) guia de onda com o braço de detecção suspenso.	55

Figura 15 – Distribuições de intensidade de campo elétrico do modo TE fundamental para espessura de silício de 90 nm, calculado usando <i>MODE Solutions</i> do software Lumerical.	56
Figura 16 – Propostas de sensores ópticos. (a) Sensor de guia de onda com curva em forma de U (vista superior). (b) Sensor de guia de onda com curva em forma de U modificado (vista superior). (c) Sensor de guia de onda <i>ridge</i> curvado (vista em perspectiva)	57
Figura 17 – Sensores ópticos interferométricos. (a) Interferômetro de Mach-Zehnder. (b) interferômetro de Young. (c) Interferograma medido de um interferômetro convencional de Mach-Zehnder.	59
Figura 18 – Sensores ópticos de microcavidades ressonantes. (a) Ressonador de anel .(b) Ressonador de disco. (c) Ressonador toróide. (d) Espectro de transmissão medido do dispositivo ressonador de anel.	60
Figura 19 – Representação esquemática da configuração de Kretschmann de um sensor SPR.	62
Figura 20 – Grade de Yee em três dimensões.	66
Figura 21 – Esquema do guia de onda retangular vista em perspectiva e seção transversal do guia.	68
Figura 22 – (a) Perdas de propagação em um guia de onda, para os modos TE e TM em função da largura do guia de onda, utilizando um comprimento de guia de onda de 1 mm. (b) Perdas de propagação em um guia de onda em função do comprimento do guia, considerando $L = 0.65 \mu\text{m}$, $L = 1.00 \mu\text{m}$ e $\sigma = 5 \text{ nm}$, para polarização TE.	69
Figura 23 – (a) Simulação dos índices efetivos dos modos TE e TM em função da largura do guia de onda, mantendo a altura fixa em 300 nm. Perfis dos modos (b) TE_{00} , (c) TE_{10} , (d) TE_{20} , (e) TE_{01} , (f) TM_{00} , (g) TM_{10} e (h) TM_{01}	71
Figura 24 – Perfil dos modos ópticos para (a) fibra monomodo com $MFD = 10 \mu\text{m}$ e (b) guia de onda de nitreto de silício de $250 \times 400 \text{ nm}$, operando no modo TE com um comprimento de onda de 632 nm.	72
Figura 25 – Perfis de afinamento. (a) Acoplador linear. (b) Acoplador exponencial. (c) Acoplador quadrático	73
Figura 26 – Esquema do acoplador <i>nanotaper</i> invertido de Si_3N_4 . (a) Vista em perspectiva e (b) vista superior.	73
Figura 27 – Perda de acoplamento em função da variação da largura da extremidade do acoplador linear, para os modos TE e TM.	75
Figura 28 – Perda de acoplamento em função da variação da largura da extremidade do acoplador exponencial, para os modos TE e TM.	75

Figura 29 – Perda de acoplamento em função da variação da largura da extremidade do acoplador quadrático, para os modos TE e TM.	76
Figura 30 – Perda de acoplamento em função da variação do comprimento de afinamento do acoplador linear. Os valores das larguras da extremidade são $W_t = 30$ nm e $W_t = 10$ nm para os modos TE e TM.	77
Figura 31 – Perda de acoplamento em função da variação do comprimento de afinamento do acoplador exponencial. Os valores das larguras da extremidade são $W_t = 40$ nm e $W_t = 20$ nm para os modos TE e TM.	77
Figura 32 – Perda de acoplamento em função da variação do comprimento de afinamento do acoplador quadrático. Os valores das larguras da extremidade são $W_t = 60$ nm e $W_t = 40$ nm para os modos TE e TM.	78
Figura 33 – Perda de acoplamento em função da variação do comprimento de afinamento para os valores otimizados das larguras da extremidade com relação a diferentes perfis de afinamento (linear, exponencial e quadrático).	79
Figura 34 – Esquema do sensor de guia de onda estrangulado de Si_3N_4 . (a) Vista em perspectiva e (b) vista superior.	80
Figura 35 – Modos Fundamentais para um guia de onda estrangulado de Si_3N_4 . Polarizações (a) quasi-TE e (b) quasi-TM.	81
Figura 36 – Potência normalizada na saída em função da largura de estrangulamento para polarizações quasi-TE e quasi-TM com relação a $n_{clad} = 1.33$, $L_{waist} = 25$ μm e $L_{taper} = 15$ μm . As regiões de detecção representam o intervalo de W_{waist} , nos quais os modos sofrem maiores perturbações com o meio externo. Os modos (i), (ii), (iii), (iv), (v) e (vi), são para TE W_{waist} 115 nm, 145 nm, 200 nm, e TM W_{waist} 80 nm, 95 nm e 160 nm.	82
Figura 37 – Perfis do campo elétrico para o modo TE propagante no guia de onda, com largura $W_{waist} = 135$ nm que representa o guia de onda estrangulado e quando $W_{waist} = 1$ μm , que representa o guia sem o estrangulamento.	83
Figura 38 – Variação de potência normalizada na saída em função da largura de estrangulamento para diferentes variações do índice de refração do revestimento, com respeito a $L_{waist} = 25$ μm e $L_{taper} = 15$ μm , para polarizações (a) quasi-TE e (b) quasi-TM.	84

Figura 39 – Potência normalizada na saída em função do índice de refração do revestimento para diferentes comprimentos do estrangulamento, com respeito a $L_{taper} = 15 \mu\text{m}$. Os valores de largura de estrangulamento são $W_{waist} = 135 \text{ nm}$ e $W_{waist} = 90 \text{ nm}$ para polarizações quasi-TE (a) e quasi-TM (b).	85
Figura 40 – Potência normalizada na saída em função do índice de refração do revestimento para diferentes comprimentos de afinamento. Para os valores de $W_{waist} = 135 \text{ nm}$ e $L_{waist} = 20 \mu\text{m}$ para polarização TE (a), e $W_{waist} = 90 \text{ nm}$ e $L_{waist} = 25 \mu\text{m}$ para polarização TM (b). . . .	86
Figura 41 – Potência normalizada na saída em função do índice de refração de revestimento para diferentes variações da rugosidade da parede lateral. Para os valores de $W_{waist} = 135 \text{ nm}$, $L_{waist} = 20 \mu\text{m}$ e $L_{taper} = 55 \mu\text{m}$ para polarização TE (a), e $W_{waist} = 90 \text{ nm}$, $L_{waist} = 25 \mu\text{m}$ e $L_{taper} = 25 \mu\text{m}$ para polarização TM (b).	88
Figura 42 – Resposta do sensor de guia de onda estrangulado de Si_3N_4 otimizada. Para os valores de $W_{waist} = 135 \text{ nm}$, $L_{waist} = 20 \mu\text{m}$ e $L_{taper} = 55 \mu\text{m}$ para polarização TE, e $W_{waist} = 90 \text{ nm}$, $L_{waist} = 25 \mu\text{m}$ e $L_{taper} = 25 \mu\text{m}$ para polarização TM.	89
Figura 43 – Resposta do biossensor de guia de onda estrangulado de Si_3N_4 . Para os valores de $W_{waist} = 135 \text{ nm}$, $L_{waist} = 20 \mu\text{m}$ e $L_{taper} = 55 \mu\text{m}$ para polarização TE, e $W_{waist} = 90 \text{ nm}$, $L_{waist} = 25 \mu\text{m}$ e $L_{taper} = 25 \mu\text{m}$ para polarização TM.	91

LISTA DE TABELAS

Tabela 1	– Dimensões otimizada para acopladores <i>nanotapers</i> invertidos de Si_3N_4 para $\lambda = 632$ nm.	79
Tabela 2	– Valores calculados de sensibilidade e coeficiente de determinação para diferentes comprimentos do estrangulamento (L_{waist}). Os valores das largura de estrangulamento são $W_{waist} = 135$ nm e $W_{waist} = 90$ nm para as polarizações quasi-TE e quasi-TM.	86
Tabela 3	– Valores calculados de sensibilidade e coeficiente de determinação para diferentes comprimentos de afunilamento (L_{taper}). Para os valores de $W_{waist} = 135$ nm e $L_{waist} = 20$ μm para polarização TE, e $W_{waist} = 90$ nm e $L_{waist} = 25$ μm para polarização TM.	87
Tabela 4	– Valores calculados de sensibilidade e coeficiente de determinação para diferentes variações da rugosidade da parede lateral. Para os valores de $W_{waist} = 135$ nm, $L_{waist} = 20$ μm e $L_{taper} = 55$ μm para polarização TE, e $W_{waist} = 90$ nm, $L_{waist} = 25$ μm e $L_{taper} = 25$ μm para polarização TM.	88
Tabela 5	– Resumo do desempenho de detecção homogênea dos sensores de Si_3N_4 baseados em intensidade. EXP/SIM indica que são resultados experimentais ou de simulação.	89
Tabela 6	– Resumo do desempenho de biossensores de Si_3N_4	91

LISTA DE SIGLAS

- ADIM** – *Alternating Direction Implicit Method*
- ATR** – *Attenuated Total Reflection*
- BOX** – *Buried Oxide*
- BPM** – *Beam Propagation Method*
- CCD** – *Charge-Coupled Device*
- CMOS** – *Complementary Metal Oxide Semiconductor*
- DNA** – *Deoxyribonucleic Acid*
- ELISA** – *Enzyme-Linked Immunosorbent Assay*
- FDM** – *Finite Difference Method*
- FDTD** – *Finite-Difference Time-Domain*
- FEM** – *Finite Element Method*
- FET** – *Field Effect Transistor*
- FWHM** – *Full Width At Half Maximum*
- LRSP** – *Long Range Surface Plasmon*
- LSPR** – *Localized Surface Plasmon Resonance*
- MC** – *Microcantilevers*
- MEV** – *Microscópio Eletrônico de Varredura*
- MFD** – *Modal Field Diameter*
- QCM** – *Quartz Crystal Microbalance*
- RI** – *Refractive Index*
- SOI** – *silicon-on-insulator*
- SPR** – *Surface Plasmons Resonance*
- SPRi** – *Surface Plasmon Resonance Imaging*
- SPW** – *Surface Plasmon Wave*

TBC –*transparent boundary condition*

TE – *Transverse Electric*

TEM -*Transverse Electromagnetic*

TIR – *Total Internal Reflections*

TM – *Transverse Magnetic*

WGMs – *Whispering Gallery Modes*

iLOD – *intrinsic detection limit*

sLOD – *System Limit of Detection*

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	25
1.1	Visão Geral de Biossensores	25
1.1.1	Biossensores Elétricos	26
1.1.2	Biossensores Mecânicos	27
1.1.3	Biossensores Ópticos	27
1.2	Objetivos	28
1.3	Estrutura da Dissertação	28
2	FUNDAMENTOS TEÓRICOS	31
2.1	Sensores Ópticos Integrados de Guias de Onda	31
2.1.1	Fundamentos de Guias de Onda Dielétricos	32
2.1.1.1	Velocidade de Grupo e de Fase	36
2.1.1.2	Atenuação	37
2.1.1.3	Guias de Onda Slab	38
2.1.1.3.1	Equações de Dispersão para os Modos TE e TM	40
2.1.1.3.2	Condição de Corte	43
2.1.1.4	Guias de Onda Retangulares	44
2.1.1.5	Fator de Confinamento	46
2.1.1.6	Detecção por Onda Evanescente	47
2.1.1.7	Princípio de Detecção baseado em Onda Evanescente	48
2.1.1.8	Perdas em Guias de Onda	49
2.1.2	Métricas de Desempenho	50
2.1.2.1	Sensibilidade	50
2.1.2.2	Limite de Detecção	51
2.1.3	Configurações de Sensores Ópticos	52
2.1.3.1	Sensores baseados em Guias de Onda	52
2.1.3.1.1	Guias de Onda <i>Slot</i>	53
2.1.3.1.2	Guias de Onda Suspensos	55
2.1.3.1.3	Guias de Onda com Dimensões Reduzidas	55
2.1.3.1.4	Guias de Onda Curvados	56
2.1.3.2	Interferômetros	57
2.1.3.3	Cavidades Ressonantes	59
2.1.3.4	Ressonância de Plasmon de Superfície	61
2.2	Métodos de Simulação	62
2.2.1	Método BPM	63

		24
2.2.2	Método FDTD	65
3	SENSOR DE GUIA DE ONDA ESTRANGULADO DE NITRETO DE SILÍCIO	67
3.1	Guia de Onda	67
3.2	Acoplador e Simulação Numérica	71
3.2.1	Resultados e Discussões	74
3.2.1.1	Efeito da largura da extremidade do <i>nanotaper</i>	74
3.2.1.2	Efeito do comprimento de afunilamento do <i>nanotaper</i>	76
3.2.1.3	Efeito do perfil de afunilamento	78
3.3	Sensor e Simulação Numérica	79
3.3.1	Resultados e Discussões	81
3.3.1.1	Sensibilidade Homogênea	84
3.3.1.2	Sensibilidade de Superfície	90
4	CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTURO	93
	REFERÊNCIAS	95

CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO

A aplicação dos avanços dos processos de micro e nanofabricação na construção de dispositivos para estudar e conhecer sistemas e processos biológicos vem sendo um dos principais pilares para evolução da área de nanobiotecnologia. A extraordinária evolução na compreensão dos sistemas biológicos aliada à emergência da nanotecnologia abriu portas à possibilidade de detectar e manipular parâmetros bioquímicos e moleculares empregando dispositivos de dimensões reduzidas, que recebem o nome de biossensores. Esses dispositivos estão em ascensão no mundo e, de acordo com dados da Markets and Markets, empresa de pesquisa e consultoria norte-americana na área de tecnologia da informação, o mercado de biossensores foi avaliado em cerca de US\$ 21.2 bilhões em 2019 e pode alcançar US\$ 31.5 bilhões até 2024 (RESEARCH, 2019).

Os biossensores têm sido amplamente utilizados em muitas aplicações como diagnósticos clínicos, análise química, segurança alimentar e detecção de patógenos (XUDONG FAN; IAN M WHITE, 2011; LUAN et al., 2018; PASSARO et al., 2012). A afinidade dos biossensores depende da interação específica entre o elemento bioreceptor (enzima, antígeno ou ácido nucleico) e o analito de interesse. O mecanismo de transdução de sinal é responsável por converter a interação biomolecular em um sinal quantificável. Dependendo da natureza do mecanismo de transdução, a maioria dos biossensores pode ser categorizada como elétrico, mecânico e óptico.

1.1 Visão Geral de Biossensores

As tecnologias de biossensoriamento englobam um grande número de dispositivos distintos, cada um capaz de examinar diferentes propriedades de um analito (índice de refração, massa, absorção de luz e condutividade). No entanto, com a finalidade de caracterizá-los e compará-los, deve-se sempre utilizar medidas de desempenho similares. Um biossensor de boa performance é requerido na maioria das aplicações e possui as seguintes características: baixo custo, portabilidade, alta sensibilidade, baixo limite de detecção, ampla faixa dinâmica de operação, alta seletividade, detecção em tempo real, curto tempo de resposta, reprodutibilidade, estabilidade dentre outras (CHENG et al., 2019; LIU, I.-C. et al., 2018). Tem-se como exemplo os biossensores que

conseguem medir concentrações mínimas de analitos no sangue, como biomarcadores de câncer, anticorpos ou glicose, são indispensáveis para a detecção em estágio inicial de doenças. Por exemplo os níveis normais de glicose no sangue para uma pessoa saudável é de até 140 mg/dl, um aumento acima dessa concentração pode indicar o início de uma pré-diabete (COMMUNITY, 2019).

Além de classificar os biossensores em termos de seu esquema de transdução de sinal, uma distinção importante em biossensoriamento é se um ensaio foi realizado *label-free* ou *labeled*. Os métodos *label-free* surgiram como uma forma de evitar possíveis alterações estruturais e funcionais das moléculas alvo, proporcionando sensibilidade e seletividade aceitáveis. Embora os sensores *label-free* também dependam da afinidade de moléculas de bioreceptor com o analito alvo, eles não requerem um rótulo. Os sistemas *label-free* facilitam o monitoramento em tempo real, simplificam as etapas de ensaio necessárias e reduzem consumo de reagentes (HOMOLA; YEE; GAUGLITZ, 1999; ESTEVEZ; ALVAREZ; LECHUGA, 2012). Contudo, os sensores baseados em ensaios com *labeled* são capazes de detectar uma concentração na ordem de sub-pg/mL, porém apresentam algumas limitações como: não permite o monitoramento cinético em tempo real do analito alvo, consome reagentes adicionais e possuem etapas adicionais. (LUCHANSKY; BAILEY, 2010; WIEDERSCHAIN, 2009).

Nessa dissertação utiliza-se o esquema de detecção *label-free* em sensores ópticos de guias de ondas integrados. Na seção a seguir, mostra-se uma visão geral dos biossensores elétricos, mecânicos e ópticos .

1.1.1 Biossensores Elétricos

Dentre os vários biossensores elétricos (*e.g.* espectroscopia de impedância eletromecânica, amperometria, potenciometria, etc (LUO; DAVIS, 2013)) existem os de transistores de efeito de campo (FETs) que respondem a interações biomoleculares que alteram as propriedades elétricas de um nanofio semicondutor ou nanotubos de carbono que conectam o eletrodo da fonte (S) e o eletrodo do dreno (D) do FET. Uma tensão aplicada na porta (G) influencia a condutividade do canal entre a fonte e o dreno. Para o biossensoriamento, os eletrodos da fonte e do dreno são conectados usando um nanofio semicondutor ou nanotubos de carbono funcionalizados com um elemento bioreceptor. Quando as moléculas carregadas do analito se ligam ao nanofio ou aos nanotubos de carbonos, a mudança resultante na condutividade do canal fornece um sinal a partir do qual se pode medir a concentração da molécula alvo (KAISTI, 2017). Uma desvantagem dos biossensores FETs é o pequeno tamanho do sensor, o que resulta em um transporte de massa muito pequeno e, portanto, um tempo de ensaio demorado, às vezes da ordem de dias (ARLETT; MYERS; ROUKES, 2011). Além disso, biossensores baseados em FET também são difíceis de integrar com soluções

iônicas e buffers, devido à triagem de Debye, como a que ocorre quando íons positivos carregados selecionam as fitas de DNA carregadas negativamente (STERN et al., 2007).

1.1.2 Biossensores Mecânicos

Os biossensores mecânicos dependem da detecção de forças mecânicas, tensão superficial ou ressonâncias mecânicas para quantificar a presença de um analito. Os biossensores mecânicos mais comumente usados incluem *microcantilevers* (MCs), que podem ser operados estática ou dinamicamente, e microbalanças de cristal de quartzo (QCMs). Os MCs operados estaticamente são usados monitorando a detecção do feixe de laser conforme o analito se liga à superfície funcionalizada. A detecção do feixe de laser pode ser registrada com uma leitura piezoresistiva ou refletindo um feixe de laser em sua superfície. Os MCs operados em modo dinâmico são acionados na frequência ressonante do feixe, que muda conforme as moléculas se ligam à sua superfície. A microbalança de cristal de quartzo (QCM) também mede a mudança na frequência ressonante de um ressonador de cristal de quartzo piezoelétrico associado à adição de massa ao sensor. Os biossensores MCs e QCMs têm limites de detecção na faixa picomolar (STERN et al., 2007).

1.1.3 Biossensores Ópticos

Os biossensores ópticos funcionam monitorando a interação da luz com o meio ao seu redor e podem ser categorizados em termos das propriedades ópticas do analito, como: índice de refração, fluorescência ou absorção de luz. Os sensores baseados em índice de refração (RI, *Refractive Index*) monitoram as mudanças no RI devido à presença do analito no meio. Normalmente, as moléculas orgânicas têm um RI mais alto do que o meio circundante, de modo que afetam o perfil do campo eletromagnético. Dentre os biossensores ópticos baseados na mudança do RI, o mais estabelecido na literatura é o sensor de ressonância plasmônica de superfície (SPR, *Surface Plasmons Resonance*), que foi introduzido em 1983 por Liedberg, Nylander e Lunström (1983). Esse sensor baseia-se na geração de uma onda de plasmon de superfície em uma fina película de metal, geralmente ouro ou prata. Os plasmons de superfície são oscilações de carga geradas pelo campo evanescente de luz à medida que sofre reflexão interna total na interface com o metal. A ressonância que ocorre quando o momento da luz incidente corresponde ao da onda de plasmon, gera uma onda de superfície. Na ressonância, um feixe de luz refletido da superfície do metal exibe um mínimo de intensidade. Quando o índice de refração do meio dielétrico de saída muda devido à ligação do analito ao metal, o momento da onda de superfície também muda, levando a uma variação no ângulo de incidência da luz incidente em que o momento do feixe de luz corresponde àquele da onda de plasmon. Ao monitorar

o ângulo de incidência na ressonância, a concentração do analito ligado à superfície do metal pode ser medida (PRABOWO; PURWIDYANTRI; LIU, 2018).

A detecção de fluorescência é geralmente realizada como um teste *labeled* no qual um fluoróforo é ligado covalentemente ao analito. A radiação incidente em um comprimento de onda específico é absorvida pelo fluoróforo, estimulando um estado eletrônico singlete que então emite uma luz em um comprimento de onda mais longo. Embora os testes de fluorescência tenham excelentes resultados, eles apresentam uma série de desvantagens. A ligação do marcador ao analito adiciona complexidade à preparação da amostra e pode influenciar as propriedades do analito ao obstruir um sítio de ligação ativo ou alterar a cinética de ligação. Além disso, a detecção de fluorescência é um esquema de detecção que não monitora em tempo real. Por último, o fluoróforo pode ser destruído devido aos longos tempos de exposição e alta intensidade da radiação, um processo denominado "fotobranqueamento". Apesar desses desafios, os experimentos de fluorescência são amplamente utilizados em ensaios de triagem de alto rendimento e estudos de dinâmica molecular (DEMCHENKO, 2015). Um dos ensaios mais conhecidos na detecção por fluorescência é o ensaio de imunoabsorção enzimática (ELISA).

Os biossensores ópticos possuem algumas vantagens em relação aos biossensores mecânicos e elétricos, tais como, menores tempos de respostas, baixos valores de limite de detecção e custo-benefício. Por essas razões os sensores ópticos serão explorados nesse trabalho, a fim de alcançar o objetivo descrito a seguir.

1.2 Objetivos

De maneira geral, o objetivo dessa pesquisa é desenvolver sensores ópticos de guias de onda com estruturas simples e compactas, a fim de garantir altas taxas de sensibilidade com a otimização da geometria do guia e evitar a necessidade do emprego de complexos aparatos de caracterização, como lasers sintonizáveis sincronizados com fotodetectores.

1.3 Estrutura da Dissertação

A dissertação está dividida em 4 capítulos. No capítulo 2, apresenta-se uma visão geral sobre fundamentos teóricos de guias de onda, necessário para compreensão dos dispositivos tratados durante a dissertação. No capítulo 3, é apresentado um sensor óptico integrado baseado em guia de onda estrangulado de Si_3N_4 . Na primeira seção, é feita uma análise do dimensionamento do acoplador. O design do sensor, a simulação numérica e o princípio básico de funcionamento foram descritos na segunda seção. Em seguida, os resultados das simulações do dispositivo são mostrados no final

do capítulo, demonstrando o seu potencial para aplicações em biossensoriamento. Por fim, o último capítulo apresenta as conclusões e trabalhos futuros.

CAPÍTULO 2

FUNDAMENTOS TEÓRICOS

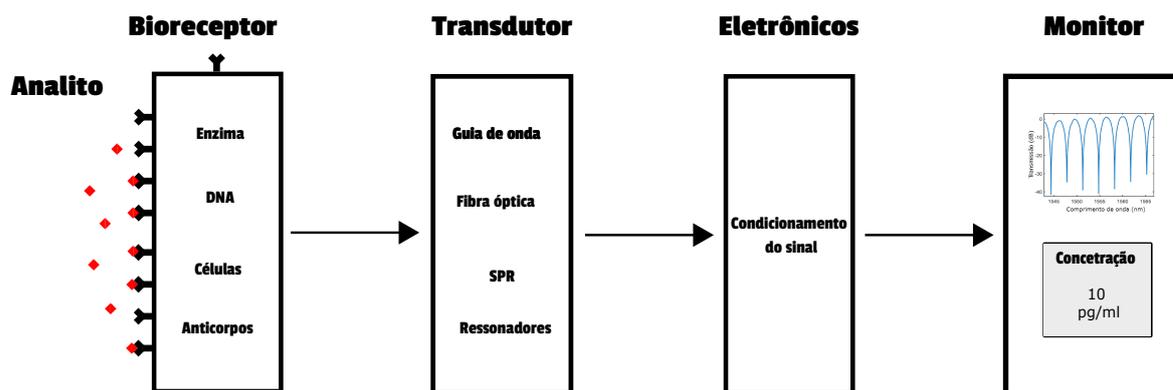
Embora o foco principal da dissertação aqui apresentada seja principalmente os resultados das simulações e a análise subsequente do sensor baseado em guia de onda, isso não é possível sem uma compreensão teórica dos sensores ópticos e métodos de simulação, que são fundamentais para análise, compreensão e otimização dos dispositivos fotônicos.

2.1 Sensores Ópticos Integrados de Guias de Onda

O biossensor óptico é um dispositivo que mede reações biológicas ou químicas, gerando sinais proporcionais à concentração de um analito na reação (BHALLA et al., 2016). O esquema de um sensor óptico típico é mostrado na Figura 1, onde apresenta-se os seguintes componentes: analito, bioreceptor, transdutor, eletrônicos e monitor.

- **Analito:** É uma substância de interesse que precisa ser detectada.
- **Bioreceptor:** A molécula que reconhece especificamente o analito é conhecida como bioreceptor, produzindo o bioreconhecimento.
- **Transdutor:** O transdutor é responsável por converter uma forma de energia em outra. Em um biossensor óptico a função do transdutor é converter a interação biomolecular em um sinal quantificável. Normalmente os transdutores produzem sinais ópticos ou elétricos que geralmente são proporcionais à quantidade de interações biomolecular.
- **Eletrônicos:** Processa o sinal convertido e o prepara para exibição. Consiste em circuitos eletrônicos que realizam condicionamento do sinal, como amplificação e conversão de sinais analógicos para digitais.
- **Monitor:** Consiste em uma combinação de hardware e software que gera resultados do sensor óptico de uma maneira amigável ao usuário. O sinal de saída no monitor pode ser numérico ou gráfico, dependendo dos requisitos do usuário final.

Figura 1 – Representação esquemática de um biossensor óptico.



Fonte: Adaptado de (BHALLA et al., 2016).

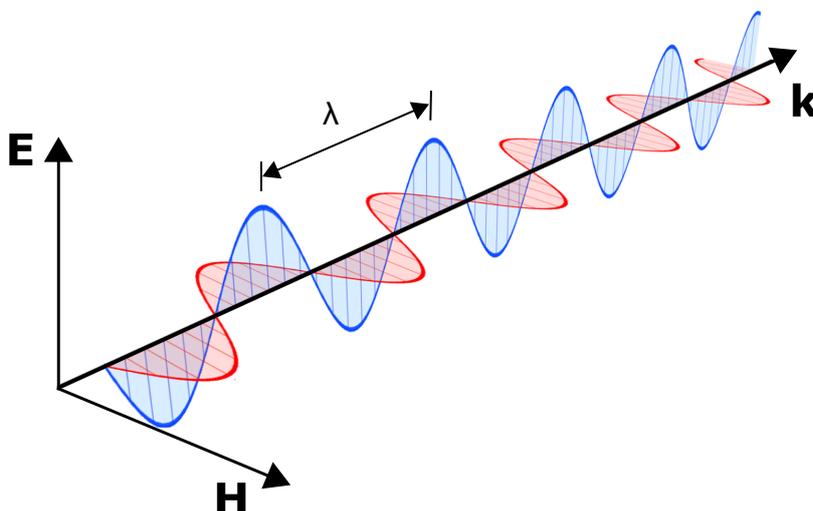
2.1.1 Fundamentos de Guias de Onda Dielétricos

O objetivo desta seção é fornecer ao leitor a base teórica necessária para compreender a física por trás dos sensores ópticos de guias de onda estudado nesta dissertação. Existem vários métodos, tanto teóricos como numéricos, que podem ser usados para descrever o comportamento da luz em estruturas de guias de onda. Como por exemplo, o movimento da luz em uma estrutura de guia de onda que pode ser facilmente compreendido e visualizado usando o modelo de raio óptico (REED; KNIGHTS, 2004). No entanto, com intuito de descrever e explicar totalmente o comportamento modal em dielétricos, as equações de Maxwell fazem um ótimo trabalho. As equações de Maxwell são um conjunto de quatro equações diferenciais parciais que, juntamente com a força de Lorentz, descrevem completamente o eletromagnetismo clássico. Por meio dessas relações, obtém-se uma boa descrição de como os campos elétrico e magnético se relacionam com suas fontes, densidade de carga e densidade de corrente, como se desenvolvem com o tempo e como interagem com a matéria (OKAMOTO, 2006; REED; KNIGHTS, 2004; KAWANO; KITO, 2001). No entanto, quando se trata de compreender e calcular propriedades características de estruturas complexas, resolver as equações de Maxwell analiticamente se torna impraticável. Nesse caso, os métodos numéricos podem fazer um trabalho melhor a fim de obter uma maior compreensão sobre como se comportam os dispositivos ópticos.

Para o propósito desta dissertação, onde o assunto se refere à propagação da luz em guias de onda *slab* (confinado em uma direção) ou retangular (confinado em duas direções), a luz é melhor descrita como uma onda eletromagnética. Como o nome sugere, uma onda eletromagnética é composta por uma parte elétrica e uma parte magnética que viajam combinadas através do espaço. Como em outras ondas, as ondas eletromagnéticas são caracterizadas por amplitude de onda, fase, velocidade e também pela sua polarização. Matematicamente, o campo eletromagnético é especificado por vetores de campo elétrico e magnético, que oscilam perpendiculares entre si e na

direção de propagação (ver Fig. 2).

Figura 2 – Onda eletromagnética se propagando na direção do vetor de onda k , que é perpendicular ao campo elétrico E e ao campo magnético H .



Fonte: O autor.

A propagação de um campo eletromagnético no meio pode ser totalmente descrito pelas equações de Maxwell, que têm a seguinte forma geral:

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad (2.1)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{J} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} \quad (2.2)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho \quad (2.3)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (2.4)$$

onde \mathbf{J} é a densidade de corrente elétrica ρ é a densidade de carga total (incluindo cargas livres), que apenas são diferentes de zero para os meios condutores, como metais. \mathbf{E} e \mathbf{H} são os vetores de campo elétrico e magnético, respectivamente. \mathbf{D} e \mathbf{B} são os vetores de deslocamento elétrico e de indução magnética, respectivamente. Para os meios lineares e isotrópicos (não necessariamente homogêneos), esses parâmetros são conectados uns aos outros através das seguintes relações:

$$\mathbf{D} = \varepsilon \mathbf{E} \quad (2.5)$$

$$\mathbf{B} = \mu \mathbf{H} \quad (2.6)$$

$$\mathbf{J} = \sigma \mathbf{E} \quad (2.7)$$

O parâmetro σ representa a condutividade do meio e os parâmetros ε e μ são conhecidos como permissividade e permeabilidade do meio e estão relacionados aos seus respectivos valores no vácuo por:

$$\varepsilon = \varepsilon_0 \varepsilon_r \quad (2.8)$$

$$\mu = \mu_0 \mu_r \quad (2.9)$$

onde ε_r e μ_r são a permissividade relativa e a permeabilidade do meio, respectivamente. Materiais não condutores com σ desprezíveis são chamados de isolantes ou dielétricos. As propriedades magnéticas e elétricas dos materiais são completamente controladas por ε_r e μ_r , uma vez que esses parâmetros descrevem como os campos elétrico e magnético afetam e são afetados pelo meio. São medidas no qual representa capacidade de um material em ser polarizado por um campo elétrico ou magnético. A velocidade da luz (v) no meio é determinada por esses dois parâmetros e pode ser calculada usando a seguinte relação:

$$v = \frac{1}{\sqrt{\varepsilon \mu}} \quad (2.10)$$

A velocidade do meio está relacionada à frequência angular, w , e comprimento de onda eletromagnética, λ , através de:

$$w = \frac{\lambda}{v} \quad (2.11)$$

Para materiais dielétricos, a razão entre a velocidade da luz no vácuo (c) e a velocidade da luz no meio (v) é conhecida como índice de refração (n):

$$n = \frac{c}{v} = \sqrt{\varepsilon_r \mu_r} \quad (2.12)$$

Na verdade, como será visto mais adiante, a permissividade e a permeabilidade são funções da frequência, o que significa que o índice de refração também dependerá da frequência ($n(w)$). Essa dependência é conhecida como dispersão do material e, como o próprio nome sugere, é uma propriedade apenas do material. A dependência de frequência desses parâmetros indica que a luz com diferentes comprimentos de onda se comporta de maneira diferente e tem velocidades diferentes ao viajar através de um meio.

Os materiais como nitreto de silício ou polímeros podem ser aproximados como meios dielétricos "sem perdas", o que significa que as equações de Maxwell, dadas na

equações 2.1, 2.2, 2.3 e 2.4 podem ser expressas de uma forma mais simplificada. Ao substituir $\mathbf{J} = \rho = 0$ (meio não condutor) e $\mu = \mu_r \mu_0 = \mu_0$ (meio não magnético) nas equações, a forma simplificada das equações de Maxwell é obtida:

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\mu_0 \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} \quad (2.13)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \varepsilon \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \quad (2.14)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = 0 \quad (2.15)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{H} = 0 \quad (2.16)$$

Usando o rotacional ($\nabla \times$) nas equações 2.13 e 2.14 e aplicando a identidade vetorial $\nabla \times (\nabla \times \mathbf{A}) = \nabla(\nabla \cdot \mathbf{A}) - \nabla^2 \mathbf{A}$, essas equações podem ser transformadas em duas equações de onda que descrevem a propagação de ondas eletromagnéticas:

$$\nabla^2 \mathbf{E} = \mu_0 \varepsilon \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} \quad (2.17)$$

$$\nabla^2 \mathbf{H} = \mu_0 \varepsilon \frac{\partial^2 \mathbf{H}}{\partial t^2} \quad (2.18)$$

Resolver as equações de ondas possibilita descrever os modos dos guias de onda. Vale ressaltar que tais equações só podem ser resolvidas com regiões e condições de contorno adequadas. Isso tem uma vantagem sobre o modelo óptico de raio de descrever os campos modais, permitindo visualizar os modos e ver como um campo se relaciona com diferentes meios, como por exemplo, em um processo de biossensoriamento. Existem várias soluções possíveis para a equação de onda, mas a mais simples está na forma de uma onda plana, ou seja, é uma onda de frequência constante, cujas frentes de onda (superfícies de fase constante) são planos infinitos, paralelos entre si, e com amplitude constante, perpendiculares à direção de propagação (REED; KNIGHTS, 2004). Como mencionado anteriormente, uma onda eletromagnética consiste em um campo magnético (\mathbf{H}) e um campo elétrico (\mathbf{E}) que oscilam perpendiculares entre si ($\mathbf{E} \cdot \mathbf{H} = 0$) e em relação à direção de propagação (\mathbf{k}). Ambas as partes terão, portanto, que ser representadas matematicamente como ondas planas na forma:

$$\mathbf{E}(r, t) = \mathbf{E}_0 e^{-j(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t + \phi_0)} \quad (2.19)$$

$$\mathbf{H}(r, t) = \mathbf{H}_0 e^{-j(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t + \phi_0)} \quad (2.20)$$

onde \mathbf{H}_0 e \mathbf{E}_0 representam os vetores de intensidade de campo (amplitude e polarização) das componentes magnéticas e elétricas, respectivamente, \mathbf{r} é o vetor posição, \mathbf{k} é o vetor de onda e ϕ_0 é o ângulo de fase. A magnitude do vetor de onda:

$$|\mathbf{k}| = k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2} \quad (2.21)$$

é conhecido como número de onda. Substituindo os campos elétrico e magnético dados nas equações 2.19 e 2.20 nas equações de onda dadas por 2.17 e 2.18, a seguinte forma de equações de onda, conhecidas como equações de Helmholtz, são obtidas:

$$\nabla^2 \mathbf{E} + k^2 \mathbf{E} = 0 \quad (2.22)$$

$$\nabla^2 \mathbf{H} + k^2 \mathbf{H} = 0 \quad (2.23)$$

Usando as equações de Helmholtz, o número de onda pode ser diretamente associado à permissividade e à frequência da luz por meio de uma relação conhecida como relação de dispersão:

$$k = w\sqrt{\mu\varepsilon} = w\sqrt{\mu_0\varepsilon_0}\sqrt{\mu_r\varepsilon_r} = k_0\sqrt{\mu_r\varepsilon_r} = k_0n = \frac{2\pi}{\lambda} = n\frac{2\pi}{\lambda_0} \quad (2.24)$$

2.1.1.1 Velocidade de Grupo e de Fase

A velocidade de grupo, v_g , é dada por (BORN; WOLF; HECHT, 2000):

$$v_g = \frac{\partial w}{\partial k} \quad (2.25)$$

Da mesma forma, uma velocidade de fase, v_f , de uma onda pode ser definida como a taxa na qual a fase da onda se propaga no espaço. Esta é a velocidade na qual a fase de qualquer componente de frequência da onda viaja. A velocidade de fase é dada por:

$$v_f = \frac{w}{k} \quad (2.26)$$

e é igual à velocidade da luz mencionada anteriormente ($v_f = v$). Em um meio não dispersivo, n é independente de w , ou seja, a velocidade da fase e a velocidade de grupo são então iguais a c/n . Contudo, em um meio dispersivo, as velocidades de grupo e de fase, em geral, são diferentes (BORN; WOLF; HECHT, 2000). Substituindo a equação 2.24 em 2.25, a expressão para a velocidade do grupo pode ser expressa

como:

$$\begin{aligned}
 v_g &= \frac{\partial \omega}{\partial k} \\
 &= \frac{\partial}{\partial k} \left(\frac{kc}{n} \right) \\
 &= \frac{c}{n} - \frac{kc}{n^2} \frac{dn}{dk} \\
 &= v_f - \lambda \frac{dv_f}{d\lambda} \\
 &= v_f \left(1 - \frac{k}{n} \frac{dn}{dk} \right)
 \end{aligned} \tag{2.27}$$

Esta forma de velocidade do grupo, em alguns casos, pode ser mais conveniente.

2.1.1.2 Atenuação

Em meios dielétricos de baixa perda, como polímeros, se tem muito pouca atenuação da onda viajante, que geralmente pode ser desprezada para curtas distâncias. Porém, em outras situações, a atenuação pode se tornar um fator significativo. Este é, por exemplo, o caso de polímeros e metais que não são transparentes ou parcialmente transparentes opticamente. Mesmo que os fatores de atenuação sejam distintos entre os dielétricos e os metais, eles ainda podem ser expresso de maneira semelhante.

A atenuação no meio se manifesta em uma constante de permissividade complexa, $\tilde{\epsilon}_r(\omega) = \epsilon'_r + j\epsilon''_r$, onde a parte real (ϵ'_r) está relacionada à energia armazenada da onda eletromagnética no meio, enquanto a parte imaginária (ϵ''_r) está relacionado à dissipação (ou perda) de energia dentro do meio. Através da relação de dispersão do material, a permissividade complexa resultará em um índice de refração complexo $\tilde{n} = n' + jn''$, que em alguns casos pode ser mais conveniente de usar do que a permissividade complexa. A parte real do índice de refração (n') determina a refração e o espalhamento, enquanto a parte imaginária (n'') descreve a absorção da luz.

Voltando à equação de Helmholtz 2.22 e 2.23, e tendo em mente a nova expressão complexa para a permissividade $\tilde{\epsilon}$, observa-se que a presença do termo imaginário em $\tilde{\epsilon}$ deve implicar em um número de onda que também possui uma parte imaginária. Este número de onda complexo é geralmente denotado por \tilde{k} .

$$\tilde{k} = k' + jk'' \tag{2.28}$$

onde k'' representa a constante de atenuação que é geralmente denotada pela letra α :

$$\alpha = \frac{\omega}{c} n'' \tag{2.29}$$

Normalmente, as equações de onda para os campos elétrico e magnético permanecem como dadas anteriormente (2.19 e 2.20), exceto que agora o número de

onda k terá que ser substituído pelo número de onda complexo \tilde{k} . Considerando uma onda eletromagnética viajando na direção z , com $\phi = 0$, agora pode ser expressa por:

$$\mathbf{E}(x, y, z, t) = \mathbf{E}_0(x, y)e^{-j(\tilde{k}z - \omega t)} = \mathbf{E}_0(x, y)e^{-\alpha z}e^{-j(k'z - \omega t)} \quad (2.30)$$

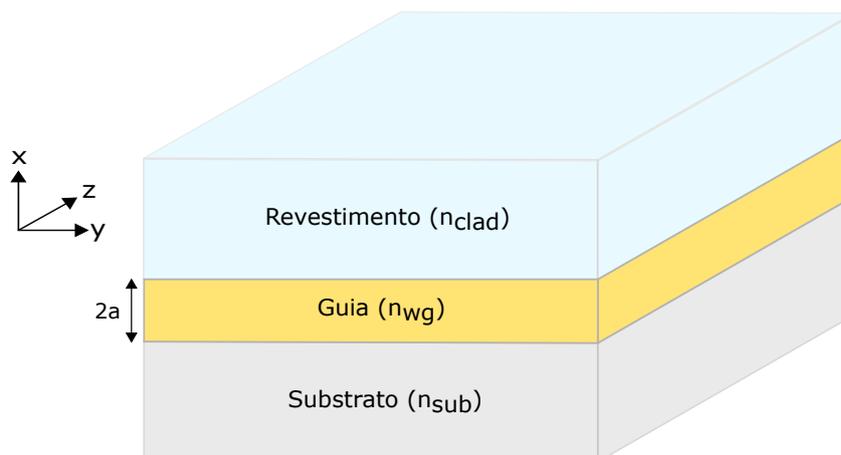
$$\mathbf{H}(x, y, z, t) = \mathbf{H}_0(x, y)e^{-j(\tilde{k}z - \omega t)} = \mathbf{H}_0(x, y)e^{-\alpha z}e^{-j(k'z - \omega t)} \quad (2.31)$$

O termo $e^{-\alpha z}$ indica que as intensidades dos campos diminui exponencialmente com a distância (z).

2.1.1.3 Guias de Onda Slab

Nesta seção, a análise da onda eletromagnética feita anteriormente será utilizada para descrever as características de propagação de onda em guias de onda *slab*. Um guia de onda *slab* conforme representado na Figura 3, às vezes referido como guia de onda planar, é um guia que apresenta três diferentes camadas: revestimento, guia ou núcleo e substrato. Além disso, para que a estrutura confine a luz, o índice de refração do guia (n_{wg}) deve ser maior do que o de revestimento (n_{clad}) e substrato (n_{sub}), satisfazendo a condição ($n_{wg} > n_{clad} > n_{sub}$). Um guia de onda desse tipo é conhecido como guia assimétrico, pois os materiais de revestimento e do substrato não têm o mesmo índice de refração. Por outro lado, uma estrutura com $n_{clad} = n_{sub}$ é referida como um guia simétrico. Essa classificação também indica que os modos guiados na estrutura tem uma natureza simétrica ou assimétrica.

Figura 3 – Guia de onda *slab* assimétrico.



Fonte: O autor.

Considerando que os modos guiados estão viajando sem perda ($\alpha = 0$), busque soluções para as equações de Helmholtz na forma de ondas planas que propagam na direção de z com uma constante de propagação β . Relacionando às equações de

Helmholtz, com as equações de ondas planas 2.30 e 2.31 apresentada anteriormente, são obtidas as seguintes expressões:

$$\nabla_t^2 \mathbf{E} + (k^2 - \beta^2) \mathbf{E} = 0 \quad (2.32)$$

$$\nabla_t^2 \mathbf{H} + (k^2 - \beta^2) \mathbf{H} = 0 \quad (2.33)$$

onde $\nabla_t^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}$. Essas equações resultam em seis equações diferenciais de segunda ordem, uma para cada componente de \mathbf{E} e \mathbf{H} . As equações não podem ser resolvidas independentemente e a solução exata dependerá da geometria e das condições de contorno que uma determinada componente de campo deve satisfazer nas diferentes interfaces (OKAMOTO, 2006). No entanto, nem todas as componentes de \mathbf{E} e \mathbf{H} são independentes e as seis equações não precisam ser resolvidas simultaneamente. Assumindo soluções na forma de equações de onda harmônica (2.30 e 2.31) e substituindo-os nas equações de Maxwell dadas em 2.13 e 2.14, revelam outras seis equações que descrevem a relação entre as componentes individuais de \mathbf{E} e \mathbf{H} (OKAMOTO, 2006). Como foi verificado, todas as componentes transversais de \mathbf{E} e \mathbf{H} podem ser relacionadas às componentes axiais, o que significa que todo o conjunto de equações de ondas pode agora ser separado e designado em dois tipos, ondas transversais elétricas (TE, *Transverse Electric*) e ondas transversais magnéticas (TM, *Transverse Magnetic*), dependendo se E_z ou H_z existem ou não. Ao considerar separadamente cada um dos tipos de ondas, a complexidade da solução pode ser reduzida.

Primeiramente será analisado o modo TE. Nesse caso, não há componente do campo elétrico na direção de propagação ($E_z = 0$). Dessa forma, assume que $E_x = 0$, o que significa que resta apenas uma componente do campo elétrico, a ser determinada, E_y . O campo magnético é sempre perpendicular ao campo elétrico, o que significa que $H_y = 0$. No entanto, H_z e H_x podem ser diferentes de zero. Contudo, como a estrutura do guia de onda é uniforme na direção y , $\partial/\partial y = 0$. O modo TE satisfaz a seguinte equação de onda:

$$\frac{d^2 E_y}{dx^2} + (k^2 - \beta^2) E_y = 0 \quad (2.34)$$

onde,

$$H_x = -\frac{\beta}{\omega\mu_0} E_y \quad (2.35)$$

$$H_z = -\frac{j}{\omega\mu_0} \frac{dE_y}{dx} \quad (2.36)$$

De maneira semelhante, o modo TM satisfaz a seguinte equação de onda:

$$\frac{d^2 H_y}{dx^2} + (k^2 - \beta^2) H_y = 0 \quad (2.37)$$

$$E_x = -\frac{\beta}{\omega\mu_0 n^2} H_y \quad (2.38)$$

$$E_z = -\frac{j}{\omega\mu_0 n^2} \frac{dH_y}{dx} \quad (2.39)$$

Os modos de propagação são frequentemente descritos em termos de índice de refração efetivo n_{eff} , que está relacionado à constante de propagação β :

$$\beta = k_0 n_{eff} \quad (2.40)$$

O índice de refração efetivo representa o índice de refração encontrado pelo modo de propagação ao longo da direção z . A condição estabelecida para que um modo seja guiado é dada por (LIFANTE, 2005; OKAMOTO, 2006; REED; KNIGHTS, 2004):

$$k_0 n_{sub} < \beta < k_0 n_{wg} \quad (2.41)$$

que pode ser reescrita como uma função do índice de refração efetivo como:

$$k_0 n_{sub} < n_{eff} < k_0 n_{wg} \quad (2.42)$$

Substituindo 2.40 nas equações de onda 2.34 e 2.37, produzem as seguintes equações de onda:

$$\frac{d^2 E_y}{dx^2} + k_0(n^2 - n_{eff}^2)E_y = 0 \quad (2.43)$$

$$\frac{d^2 H_y}{dx^2} + k_0(n^2 - n_{eff}^2)H_y = 0 \quad (2.44)$$

2.1.1.3.1 Equações de Dispersão para os Modos TE e TM

A constante de propagação e as distribuições dos campos eletromagnéticos para os modos TE e TM podem ser obtidas resolvendo as equações 2.43 e 2.44 usando as condições de contorno apropriadas. A solução será na forma de uma equação de onda e uma relação de dispersão, também conhecida como equação de autovalor do sistema. Considerando a estrutura definida na Figura 3, as soluções das equações 2.43 e 2.44 devem ser consideradas no guia de onda e no revestimento e devem ser devidamente relacionadas em seus limites. No guia de onda, a solução tem a forma de uma onda propagando-se na direção z sem atenuação, e no revestimento a onda deve decair exponencialmente (onda evanescente). Para cumprir esses requisitos, as

seguintes soluções de distribuição do campo elétrico de um modo TE são assumidas (OKAMOTO, 2006):

$$E_y = \begin{cases} A \cos(\kappa a - \phi) e^{-\sigma(x-a)} & \text{se } x > a, \\ A \cos(\kappa x - \phi) & \text{se } -a \leq x \leq a, \\ A \cos(\kappa a + \phi) e^{\xi(x+a)} & \text{se } x < -a. \end{cases} \quad (2.45)$$

onde A é uma constante indeterminada, a é a espessura do guia de onda, ϕ é uma constante de fase que aparece como resultado das condições de contorno e κ é uma constante de propagação transversal para a região do guia de onda. Os coeficientes de atenuação para as regiões de revestimento e substrato (σ e ξ) são dados por:

$$\begin{aligned} \kappa &= k_0 \sqrt{n_{wg}^2 - n_{eff}^2} \\ \sigma &= k_0 \sqrt{n_{eff}^2 - n_{clad}^2} \\ \xi &= k_0 \sqrt{n_{eff}^2 - n_{sub}^2} \end{aligned} \quad (2.46)$$

Note que os termos em exponenciais ξ e σ , descrevem a profundidade de penetração do campo evanescente, e eles são dependentes apenas do n_{eff} , λ e dos índices de refração n_{clad} ou n_{sub} . Além disso, todos os fatores geométricos da estrutura estão incluídos no n_{eff} .

Outra condição de contorno afirma que o dE_y/dx também precisa ser contínuo em cada interface, o que resulta em um conjunto de equações que produzem as seguinte equações de autovalor para a estrutura (OKAMOTO, 2006):

$$\begin{aligned} \kappa a &= \frac{m\pi}{2} + \frac{1}{2} \arctan\left(\frac{\xi}{\kappa}\right) + \frac{1}{2} \arctan\left(\frac{\sigma}{\kappa}\right) \\ \phi &= \frac{m\pi}{2} + \frac{1}{2} \arctan\left(\frac{\xi}{\kappa}\right) - \frac{1}{2} \arctan\left(\frac{\sigma}{\kappa}\right) \end{aligned} \quad (2.47)$$

onde cada solução discreta corresponde a um modo guiado em particular, definido pelo índice do modo $m = 0, 1, 2, 3, \dots$. As equações dadas em 2.47 são as equações de dispersão (ou equações de autovalor) para o guia de onda dielétrico e devem ser resolvidas numericamente ou graficamente para obter a constante de propagação e as distribuições do campo eletromagnético. Em geral, apenas um número fixo de modos pode ser suportado por um guia de onda. Um guia de onda que pode suportar apenas um modo para uma dada polarização é referido como um guia de onda monomodo. Se o guia pode suportar vários modos, ele é referido como um guia de onda multimodo.

Para um guia de onda *slab* simétrico, onde $n_{clad} = n_{sub}$, a equação 2.47

simplifica para a seguinte forma:

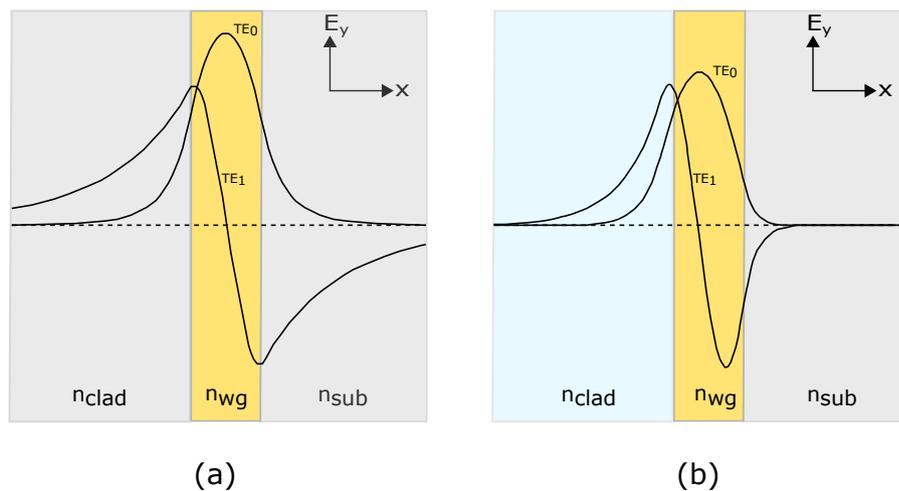
$$\kappa a = \frac{m\pi}{2} + \frac{1}{2} \arctan\left(\frac{\sigma}{\kappa}\right) \quad (2.48)$$

$$\phi = \frac{m\pi}{2}$$

Dessa forma, um guia de onda simétrico apenas pode suportar modos simétricos ou assimétricos como mostrado na Fig. 4(a), onde o campo varia de forma senoidal dentro do guia e decai exponencialmente fora.

Na Figura 4 são mostrados exemplos de distribuições de campos para os modos TE obtidos usando a equação 2.45 para os guias de onda simétricos e assimétricos. O modo TE₀ é referido como o modo fundamental. Outros modos são simplesmente chamados de modos de ordem superior.

Figura 4 – Distribuição do campo elétrico do modo TE₀ simétrico e do modo TE₁ assimétrico. (a) Guia de onda *slab* simétrico e (b) guia de onda *slab* assimétrico.



Fonte: O autor.

Analisando a Figura 4(a) os modos no guia simétrico são simétricos ou assimétricos em torno de $x = 0$. Para uma estrutura assimétrica, como é o caso da Figura 3, os modos são assimétricos, o que significa que as componentes do campo exponencial que se estendem para os materiais de revestimento e substrato são diferentes para os dois materiais, como pode ser visto na Figura 4(b).

As equações de dispersão para o modo TM é obtida de maneira semelhante à do modo TE que são expressos como:

$$\kappa a = \frac{m\pi}{2} + \frac{1}{2} \arctan\left(\frac{n_{wg}^2 \xi}{n_{sub}^2 \kappa}\right) + \frac{1}{2} \arctan\left(\frac{n_{wg}^2 \sigma}{n_{clad}^2 \kappa}\right) \quad (2.49)$$

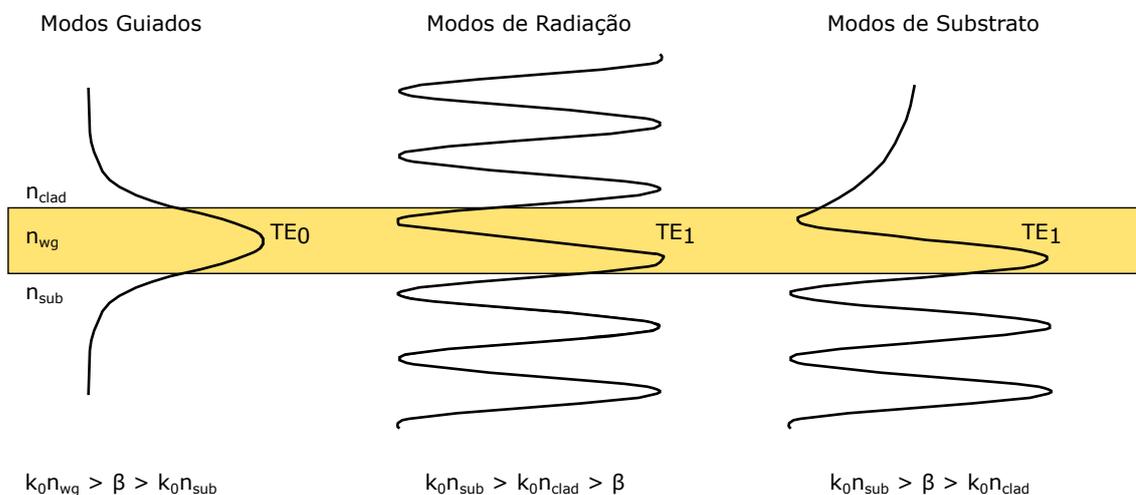
$$\phi = \frac{m\pi}{2} + \frac{1}{2} \arctan\left(\frac{\xi}{\kappa}\right) - \frac{1}{2} \arctan\left(\frac{\sigma}{\kappa}\right)$$

O comportamento dos modos TM em guias de onda *slab* é muito semelhante ao dos modos TE. Devido às taxas de índice de refração que aparecem nas equações, o diagrama de dispersão é ligeiramente diferente para os modos TM em comparação com os modos TE. Normalmente, os modos TE são levemente mais confinados no guia de onda do que os modos TM (OKAMOTO, 2006).

2.1.1.3.2 Condição de Corte

Conforme mostrado na seção 2.1.1.3, para que os modos sejam bem confinados por uma estrutura de guia de onda, as condições necessárias são: $n_{sub} < n_{eff} < n_{wg}$. No entanto, é interessante examinar a situação em que esses requisitos não são atendidos. Isso fará com que os campos eletromagnéticos nas camadas de revestimento ou substrato se tornem oscilatórios (ondas de propagação) na direção transversal (direção x). Soluções para a equação de autovalor correspondente a tal configuração resulta em modos não guiados, que normalmente são referidos como modos de radiação. A Figura 5 mostra uma representação gráfica dos modos guiados e modos de radiação para diferentes configurações de índices de refração.

Figura 5 – O modo a esquerda é um modo TE₀ guiado. O modo do meio é um modo de radiação TE₁. O modo a direita é um modo de substrato TE₁.



Fonte: Adaptado de (RICHARD SYMS, 1992)

Normalmente, para uma estrutura de guia de onda slab, existem três combinações de índices de refração possíveis (RICHARD SYMS, 1992):

- **Modos Guiados:** Para o caso $k_0 n_{wg} > \beta > k_0 n_{sub}$, há um número discreto de modos guiados que variam de forma sinodal dentro do guia de onda e decaem exponencialmente fora da guia.

- **Modos de Radiação:** Aqui $k_0 n_{sub} > k_0 n_{clad} > \beta$, e as soluções variam de forma senoidal em todas as três camadas. Boa parte da energia será principalmente perdida através da radiação e o modo será incapaz de se propagar.
- **Modos de substrato:** Por fim, quando $k_0 n_{sub} > \beta > k_0 n_{clad}$ as soluções variam exponencialmente no revestimento, e de forma senoidal tanto no guia de onda quanto no substrato. Uma vez que estes penetram totalmente na região do substrato, eles são chamados de modos de substrato.

A condição em que um determinado modo não é mais guiado e se torna um modo de radiação é conhecida como condição de corte. Se for assumido que $n_{clad} < n_{sub}$, a seguinte condição para a frequência de corte é obtida (OKAMOTO, 2006):

$$\beta_c = k_0 n_{sub} = \frac{\omega_c}{c} n_{sub} \quad (2.50)$$

esta condição é encontrada considerando que na frequência de corte o índice de refração efetivo assume o valor de n_{sub} (LIFANTE, 2005).

As condições de corte para modos individuais de TE_m e TM_m podem ser calculadas usando as definições mencionadas acima para os números de modo e corte. Substituindo a condição de corte da equação 2.50, e as relações dadas em 2.46, na fórmula de modo dada pela equação 2.47, a seguinte expressão para a frequências de corte (ω_{cm}) para os modos TE é encontrada:

$$\omega_{cm} = \frac{1}{2ac\sqrt{n_{wg}^2 - n_{sub}^2}} \left[\arctan \left(\sqrt{\frac{n_{sub}^2 - n_{clad}^2}{n_{wg}^2 - n_{sub}^2}} \right) + m\pi \right] \quad (2.51)$$

e uma equação correspondente para os modos TM:

$$\omega_{cm} = \frac{1}{2ac\sqrt{n_{wg}^2 - n_{sub}^2}} \left[\arctan \left(\left(\frac{n_{wg}}{n_{clad}} \right)^2 \sqrt{\frac{n_{sub}^2 - n_{clad}^2}{n_{wg}^2 - n_{sub}^2}} \right) + m\pi \right] \quad (2.52)$$

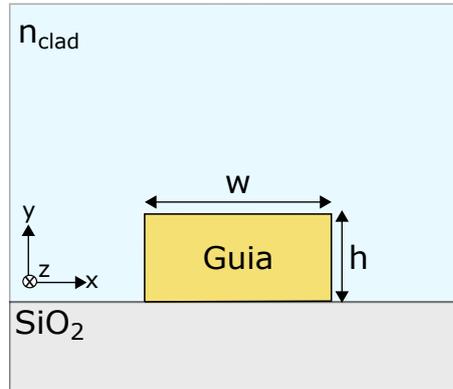
onde ω_{cm} significa frequência de corte do modo m . Estas são expressões gerais para a frequência de corte do modo m em um guia de onda *slab* com $n_{clad} < n_{sub}$. Essas equações deduzem que a frequência de corte representa a frequência mínima que permite a propagação de um determinado modo para uma espessura de guia de onda específico.

2.1.1.4 Guias de Onda Retangulares

Ao invés de confinar a luz em apenas uma direção, como é o caso dos guias de onda *slab* descritos anteriormente, os guias de onda retangulares, são frequentemente referidos como guias de onda do tipo *channel*, que confinam a luz em duas direções

(eixos x e y), o que significa que a luz só poderá se mover livremente na direção z . A Figura 6 mostra uma seção transversal de um guia de onda, onde o material utilizado no guia, representado pela cor amarela, pode ser silício, nitreto de silício ou um polímero, como SU-8.

Figura 6 – Esboço da seção transversal de um guia de onda retangular em 2D.



Fonte: O autor.

Os campos modais elétricos e magnéticos que se propagam ao longo dos guias de onda retangulares podem ser expressos da seguinte forma:

$$\mathbf{E}(x, y, z, t) = \mathbf{E}_{nm}(x, y)e^{j(\omega t - \beta_{nm}z)} \quad (2.53)$$

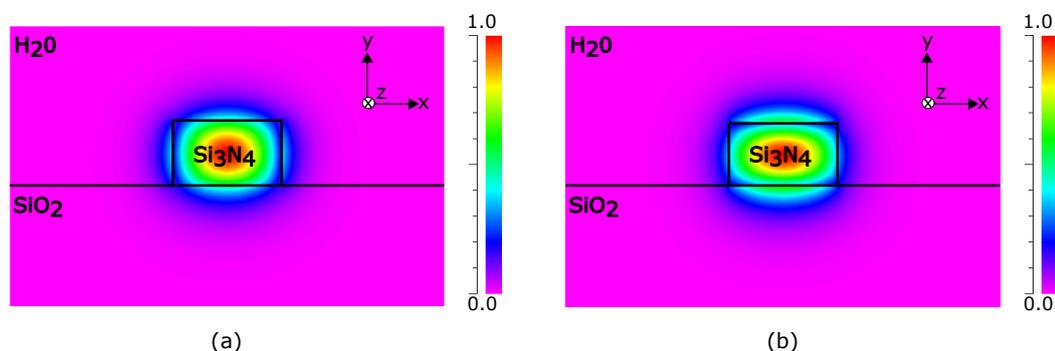
$$\mathbf{H}(x, y, z, t) = \mathbf{H}_{nm}(x, y)e^{j(\omega t - \beta_{nm}z)} \quad (2.54)$$

onde \mathbf{E}_{nm} e \mathbf{H}_{nm} representam a intensidade de campo (amplitude e polarização) das componentes magnéticas e elétricas, respectivamente, $\omega = 2\pi f$ é a frequência angular da onda e β_{nm} é a constante de propagação dos modos n, m . Dessa forma, as soluções analíticas para os perfis modais $\mathbf{E}_{mn}(x, y)$ e $\mathbf{H}_{mn}(x, y)$ para uma secção transversal retangular (por exemplo, Fig. 6) são complexas e exigem aproximações. Portanto, geralmente os guias de onda retangulares são investigados utilizando ferramentas computacionais.

Os guias de ondas retangulares não apresentam modos TE e TM puros, porém existem duas famílias de modos eletromagnéticos transversais híbridos (TEM, *Transverse Electromagnetic*). Felizmente, os modos TEM que se propagam em guias de ondas são polarizados ao longo da direção x ou y , permitindo uma classificação de acordo com a sua componente dominante do campo elétrico (LIFANTE, 2005). Os modos quasi-TE (Fig. 7(a)) são caracterizados por uma componente dominante, $|E_x|$, enquanto os modos quasi-TM (Fig. 7(b)) mostram uma componente de campo elétrico dominante, $|E_y|$.

Para estudar o comportamento dos campos elétricos e magnéticos nos guias de onda retangulares, diferentes métodos foram propostos na literatura. Os mais comuns

Figura 7 – Distribuições de intensidade de campo elétrico dos modos (a) quasi-TE e (b) quasi-TM em um guia de onda de nitreto de silício 300×500 nm, operando com um comprimento de onda de 632 nm.



Fonte: O autor.

são o método do índice efetivo (CHIANG, 1986), o método de Marcatili (MARCATILI, 1969), métodos de elementos finitos (RAHMAN; DAVIES, 1984) ou diferenças finitas (BASSI et al., 1998). Devido sua simplicidade, robustez e aos resultados satisfatórios encontrados em trabalhos científicos, é adotado nesta dissertação o método BPM (*Beam Propagation Method*). Ele é baseado em um método de propagação de feixe de diferenças finitas, e é discutido em detalhes na seção 2.2. Esta técnica usa métodos de diferenças finitas para resolver a conhecida aproximação parabólica ou paraxial da equação de Helmholtz (SCARMOZZINO; OSGOOD, 1991; SCARMOZZINO; GOPI-NATH et al., 2000).

2.1.1.5 Fator de Confinamento

Observa-se na Figura 8 que nem toda a potência de um modo propagante em um guia de onda está contida dentro do guia de onda. Portanto, sabendo que parte dessa potência viaja fora do guia, como veremos mais a frente que é fundamental para interação com o analito durante o sensoriamento, é importante saber o quanto de potência está sendo guiada no interior do guia. Isso pode ser mensurado por meio do fator de confinamento, que é definido como (YARIV, 1997; STEWART, 2004; REED; KNIGHTS, 2004):

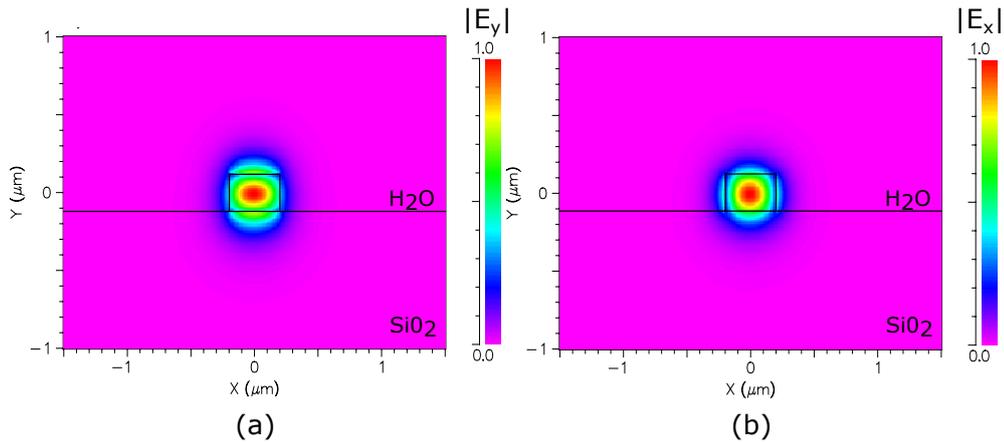
$$\Gamma = \frac{\iint_{guia} \text{Re}(\mathbf{E} \times \mathbf{H}^*) \hat{z} dx dy}{\iint_{total} \text{Re}(\mathbf{E} \times \mathbf{H}^*) \hat{z} dx dy} = \frac{P_{guia}}{P_{total}} \quad (2.55)$$

onde P_{total} é a soma da potência no substrato, no guia e no revestimento e o P_{guia} é a potência apenas no interior do guia. O fator de confinamento é um aspecto chave no projeto de sensores otimizados para aplicações específicas, uma vez que é uma medida da sobreposição do campo elétrico com as moléculas alvos de interesse. Para aplicações de sensoriamento, $1-\Gamma$ é a fração de potência no substrato e no revestimento, onde pode ser explorado para aplicações de biossensoriamento.

A Fig. 8 mostra a distribuição normalizada do campo elétrico das componentes

dominantes $|E_x|$ e $|E_y|$ para os modos fundamentais quasi-TM (Fig. 8(a)) e quasi-TE (Fig. 8(b)). Utiliza-se como exemplo um guia de onda retangular com espessura $h = 250$ nm e largura $w = 400$ nm a um comprimento de onda de 632 nm. A estrutura do guia de onda consiste de um material de nitreto de silício ($n_{Si_3N_4} = 2.04$) em um substrato de óxido de silício ($n_{SiO_2} = 1.46$) e água ($n_{H_2O} = 1.33$) como material de revestimento. Todos os índices de refração são dados para o comprimento de onda de 632 nm.

Figura 8 – Perfis modais investigados por simulações BPM. (a) Quasi-TM e (b) quasi-TE.



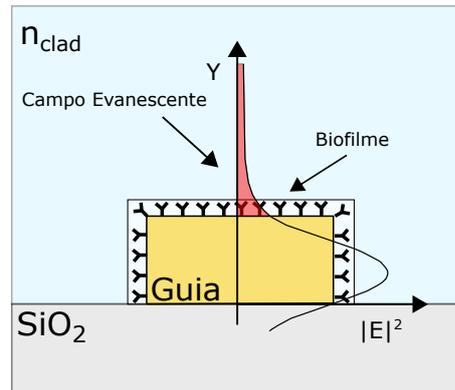
Fonte: O autor.

Para polarização quasi-TM no guia investigado foi calculado um fator de confinamento (Γ) de 0.81 no guia de onda, utilizando a equação 2.55. Para o cálculo Γ foi utilizado um monitor de potência parcial, ou seja, um monitor responsável em monitorar apenas a potência no interior do guia de onda (P_{guia}). Já para monitorar a potência total no domínio da simulação utiliza-se o monitor de potência total (P_{total}). Isso indica que 12% da energia do modo propaga-se no substrato (SiO_2) e 7% no revestimento (H_2O), esse valores foram calculados usando o monitor de potência parcial. Já para polarização quasi-TE o fator de confinamento é de 0.84. Portanto, mostra que 10% da energia viaja no substrato e 6% no revestimento. Isso tem consequências importantes para melhorar o desempenho de detecção, onde visa-se maximizar a sobreposição do campo elétrico na solução (H_2O), modificando a geometria do guia.

2.1.1.6 Detecção por Onda Evanescente

A detecção por onda evanescente é baseada na perturbação do modo causada por fluorescência, absorção ou mudanças no índice de refração do meio (SHI; MA; DAI, 2016). Lembrando que nessa dissertação foca-se o estudo em sensores ópticos de guia onda com base em medições de índice de refração. A Fig. 9 descreve como a intensidade do campo elétrico decai próximo a superfície do guia de onda. Portanto, a onda guiada em um sensor de guia de onda tem um alcance limitado no revestimento, dependendo das suas dimensões.

Figura 9 – Interação da onda evanescente com o analito.



Fonte: O autor.

Para uma *slab* de guia de onda (a onda evanescente tem restrição apenas na direção y), o decaimento do campo elétrico perto da superfície pode ser expresso como (REED; KNIGHTS, 2004; GUASTO; HUANG; BREUER, 2008):

$$E(y) = E_0 e^{-y \frac{2\pi}{\lambda} \sqrt{n_{eff}^2 - n_{clad}^2}} \quad (2.56)$$

onde E_0 é o campo elétrico na superfície. A profundidade de penetração da onda evanescente é definida como:

$$d = \frac{\lambda}{2\pi} \frac{1}{\sqrt{n_{eff}^2 - n_{clad}^2}} \quad (2.57)$$

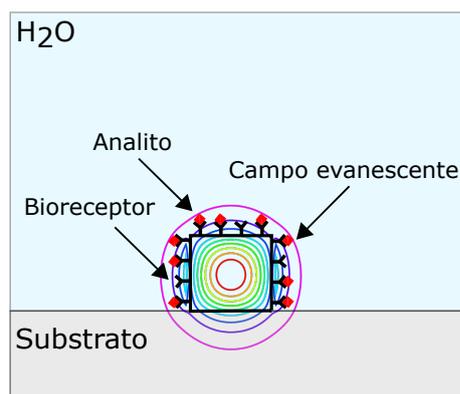
Contudo, para situação onde há a presença de um biofilme na superfície do guia de onda, um aumento na espessura desse biofilme causará uma diminuição da sensibilidade e a sua espessura não mudará mais as propriedades de propagação do modo óptico dentro do guia de onda, como será mostrado no Capítulo 3.

2.1.1.7 Princípio de Detecção baseado em Onda Evanescente

Os sensores ópticos integrados mais simples e capazes de compor chips diminutos são baseados na distribuição de um campo elétrico e magnético confinado em um guia de onda, geralmente fabricado em nitreto de silício, silício ou polímeros. A interação desses campos com analitos presentes na superfície do guia de onda garantem a esses sensores a capacidade de detecção. O princípio básico de operação destes sensores pode ser explicado da seguinte forma: quando uma parte da onda eletromagnética está viajando para fora do guia de onda (onda evanescente) parte dela pode interagir com o meio para criar uma região externa sensível a mudança de RI (ver Fig. 10). Quando as moléculas alvos se ligam aos receptores na superfície do guia de onda, o acúmulo de moléculas alteram o índice de refração externo e perturba o campo evanescente, que então modifica o índice de refração efetivo do guia de onda (SHI; MA; DAI, 2016; WANGÜEMERT-PÉREZ et al., 2019). No entanto, o índice de refração

efetivo do modo propagante no guia de onda não é uma quantidade efetivamente mensurável, portanto, deve ser convertido em uma quantidade que possa ser facilmente detectada. Isso pode ser alcançado por meio do monitoramento do comprimento de onda propagante, do deslocamento na fase ou da variação da intensidade de luz na saída do guia, uma vez que todos são dependentes do índice de refração efetivo.

Figura 10 – Princípio de detecção de sensores de guia de onda baseado em campo evanescente.



Fonte: O autor.

2.1.1.8 Perdas em Guias de Onda

Outra propriedade importante de um modo é a perda, ou atenuação de potência, à medida que o modo viaja pelo guia de onda. As perdas em um guia de onda podem ser atribuídas a diferentes fontes, incluindo espalhamento, radiação e absorção (REED; KNIGHTS, 2004).

- **Perda por espalhamento:** A perda por espalhamento em um guia de onda óptico pode ser de dois tipos: espalhamento de volume e espalhamento de interface. O espalhamento de volume é causado por imperfeições no material dos guias de onda, como espaços vazios, átomos contaminados ou defeitos cristalinos. Já o espalhamento de interface é devido à rugosidade na interface dos guias de onda. Para a maioria dos processos de fabricação, as perdas devido à rugosidade da parede lateral e espalhamento dominam (DUMON, 2007). A rugosidade da parede lateral depende diretamente dos processos de fabricação e, conseqüentemente, um esforço considerável tem sido investido em estratégias que suavizem as rugosidades nas paredes laterais (JOHNSON et al., 2005). A rugosidade da parte superior do guia de onda é muito menor devido a sua origem no crescimento do cristal, enquanto as paredes laterais são formadas a partir de corrosão seca ou úmida, que seguem o padrão gravado por litografia óptica, a laser ou por feixe de elétrons.

- **Perda por absorção:** As principais fontes de perda de absorção para os guias de onda semicondutores são a absorção entre bandas e a absorção de portadores livres. A absorção entre bandas ocorre quando os fótons com energia maior do que o gap são absorvidos para excitar os elétrons da banda de valência para a banda de condução. A absorção de portadores livres, no entanto, pode ser significativa em guias de onda semicondutores. A concentração de portadores de cargas livres afetará os índices de refração reais e imaginários. A perda originada da absorção de material é geralmente insignificante para estruturas passivas, pois tanto o nitreto de silício ou SU-8 quanto o óxido de silício apresentam perdas insignificantes no espectro de luz visível (SHAKOOR et al., 2017; LI JIN et al., 2016). No entanto, para outras faixas de comprimento de onda, como por exemplo o infravermelho, pode ocorrer absorção.
- **Perda por radiação:** um modo confinado em um guia de onda de nitreto de silício ou silício, por exemplo, dependendo das suas dimensões e do comprimento de onda que propaga nesse guia, pode ser irradiado para as camadas de revestimento e substrato. Nesses casos, o vazamento do modo para o substrato pode ser controlado modificando a espessura da camada de óxido de silício enterrada, evitando que a onda evanescente alcance o substrato que geralmente é de Silício. Para um *wafers* SOI típico, a camada de óxido tem 2-3 μm de espessura, o que resulta em perdas de vazamento de substrato desprezíveis para os modos TE e TM (DUMON, 2007).

2.1.2 Métricas de Desempenho

A definição de um conjunto de métricas de desempenho para sensores de índice de refração, tem sido uma tarefa complicada. A falta de padrões comparativos dificulta as comparações de desempenho entre diferentes tipos de sensores fotônicos. No entanto, existem métricas que geralmente são mais utilizadas na literatura, tais como a sensibilidade e o limite de detecção (WANGÜEMERT-PÉREZ et al., 2019). Ambos serão descritos a seguir e utilizados amplamente ao longo desse trabalho, a fim de comparar os sensores aqui projetados com os presentes na literatura.

2.1.2.1 Sensibilidade

A sensibilidade se refere à menor concentração do analito que pode ser detectada com segurança. Ao longo desta dissertação, o termo sensibilidade descreve a resposta do sensor óptico às alterações do índice de refração (causadas pela interação do analito ao sensor). Existem dois tipos de sensibilidade: sensibilidade homogênea (*bulk sensitivity*) e sensibilidade de superfície (*surface sensitivity*), como é mostrado na Fig. 11 (LIU, I.-C. et al., 2018; CHAO; GUO, 2006).

- **Sensibilidade homogênea:** A sensibilidade homogênea é definida como:

$$S_{bulk} = \frac{\Delta P_{out}}{\Delta n_{clad}} \quad (2.58)$$

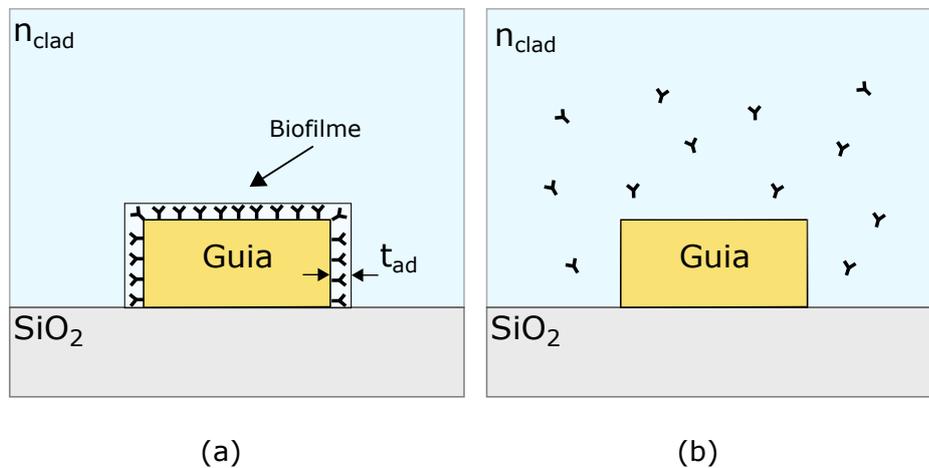
onde Δn_{clad} é a variação do índice de refração do revestimento. A S_{bulk} para um sensor de guia de onda é definida como a variação de potência (ΔP_{out}) por uma variação no índice de refração (Δn_{clad}).

- **Sensibilidade de superfície:** A sensibilidade de superfície é definida como:

$$S_{surf} = \frac{\Delta P_{out}}{\Delta t_{ad}} \quad (2.59)$$

onde Δt_{ad} é a variação da espessura de uma camada homogênea na superfície. A S_{surf} para um sensor de guia de onda é definida como a variação de potência (ΔP_{out}) por uma variação de espessura de uma camada (Δt_{clad}).

Figura 11 – Dois mecanismos de sensibilidade. (a) Sensibilidade de superfície e (b) sensibilidade homogênea.



Fonte: O autor.

A sensibilidade homogênea refere-se à resposta do sensor a uma mudança uniforme no revestimento e pode ser calculada pela equação 2.58, enquanto a sensibilidade da superfície refere-se à resposta do sensor a interações biomoleculares na superfície do sensor (ver equação 2.59), por exemplo a adsorção de um biofilme de proteína. O revestimento nesse caso, refere-se ao meio aquoso ao redor do dispositivo, com a presença do analito.

2.1.2.2 Limite de Detecção

O termo limite de detecção (sLOD) é baseado na configuração de dispositivos externos ao sensor, tais como lasers e detectores, e leva em consideração o nível

de ruído presente nesses equipamentos. O sLOD é utilizado para descrever a menor quantidade detectável do analito alvo (LIU, I.-C. et al., 2018; WANGÜEMERT-PÉREZ et al., 2019). Ele representa a quantidade mínima de variação do índice de refração detectável (ou espessura) e pode ser definido como:

$$sLOD = \frac{R}{S} \quad (2.60)$$

onde R é a resolução de configuração do sistema e S é a sensibilidade homogênea ou de superfície. Nesse trabalho para o cálculo do sLOD é assumido alteração de 1% na potência de saída ($R = 1\%$). Esse valor é utilizado frequentemente na literatura para análise do limite de detecção dos dispositivos ópticos (TAKASHIMA; HARAGUCHI; NAOI, 2018; SHAKOOR et al., 2017; RODIONOV; REMNEV; KLIMOV, 2019).

2.1.3 Configurações de Sensores Ópticos

Nesta seção será realizada uma revisão geral das principais configurações de sensores ópticos que foram propostas na literatura e que são amplamente utilizadas em aplicações de biosensoriamento.

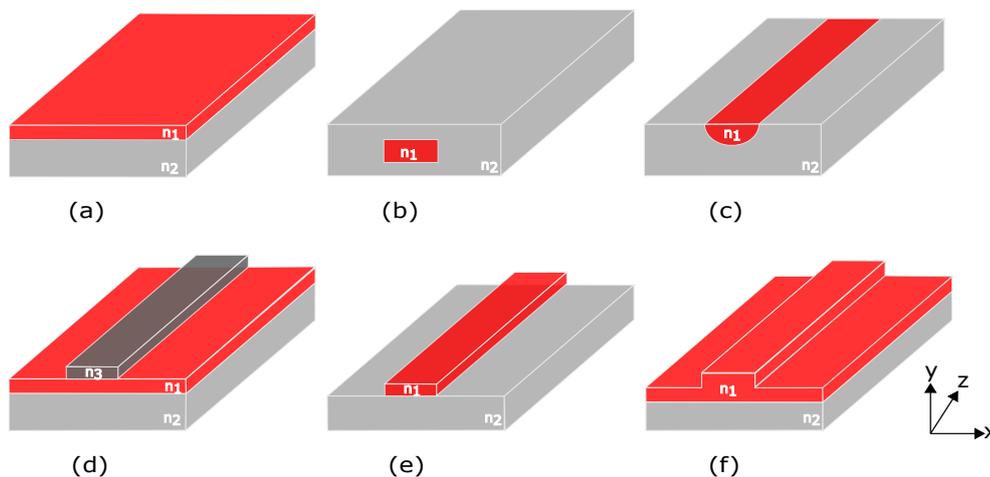
2.1.3.1 Sensores baseados em Guias de Onda

Os guias de onda ópticos existem em várias configurações, diferenciando-se tanto no material quanto na geometria, e oferecendo uma grande flexibilidade e variabilidade no projeto, produção e otimização de sensores (LAMBECK, 2006). Normalmente, os guias de onda são depositados em um substrato, que geralmente é feito de baixo índice de refração (por exemplo, polímeros ou SiO_2), e podem ser classificados, de acordo com sua morfologia, em: guia de onda do tipo *slab* e guia de onda do tipo *channel* (KOZMA et al., 2014). Como já mencionado na seção 2.1.1, os guias de onda do tipo *slab* são estruturas com geometria plana, que guiam a luz em apenas uma direção transversal. Ao contrário dos guias de onda do tipo *slab*, os guias de onda do tipo *channel* atuam como um condúite para a luz em ambas as direções transversais com um confinamento óptico bidimensional.

Os guias de onda do tipo *channel* podem ser subdividido em *strip-loaded*, *buried*, *ridge*, *rib* e *diffused* (Fig. 12). O guia de onda *strip-loaded* é formado por um guia de onda *slab* (n_1), que fornece um confinamento óptico na direção y e na sua parte superior é depositado um guia de onda dielétrico *strip* (n_3) com índice $n_3 < n_1$. O guia de onda *buried* é formado por um guia de onda de alto índice (n_1) enterrado em um meio de baixo índice (n_2). O guia de onda *ridge* tem uma estrutura que se parece com um guia de onda *strip* ou *ridge*, no entanto, essa estrutura apresenta um forte confinamento óptico porque é cercado em três lados por materiais de baixo índice (ar ou material de revestimento). O guia de onda *rib* tem uma estrutura semelhante aos

guias de onda *strip* ou *ridge*, sendo que o guia de onda *strip* tem o mesmo índice que a camada plana de alto índice abaixo dela que faz parte do núcleo do guia de onda. Por fim, o guia de onda *diffused* é formado pela criação de uma região de alto índice em um substrato por meio da difusão de dopantes, os guias de onda LiNbO_3 , que possuem núcleos formados a partir da difusão de Ti (KASAP, s.d.).

Figura 12 – Representação esquemática tridimensional de diferentes configurações de guias de onda. (a) *slab*. (b) *buried*. (c) *diffused*. (d) *strip-loaded*. (e) *ridge*. (f) *rib*.



Fonte: Adaptado de (KOZMA et al., 2014)

Em geral, os guias de onda *ridge* e *rib* são comumente usados como transdutores em biossensores ópticos (WANGÜEMERT-PÉREZ et al., 2019; LUAN et al., 2018).

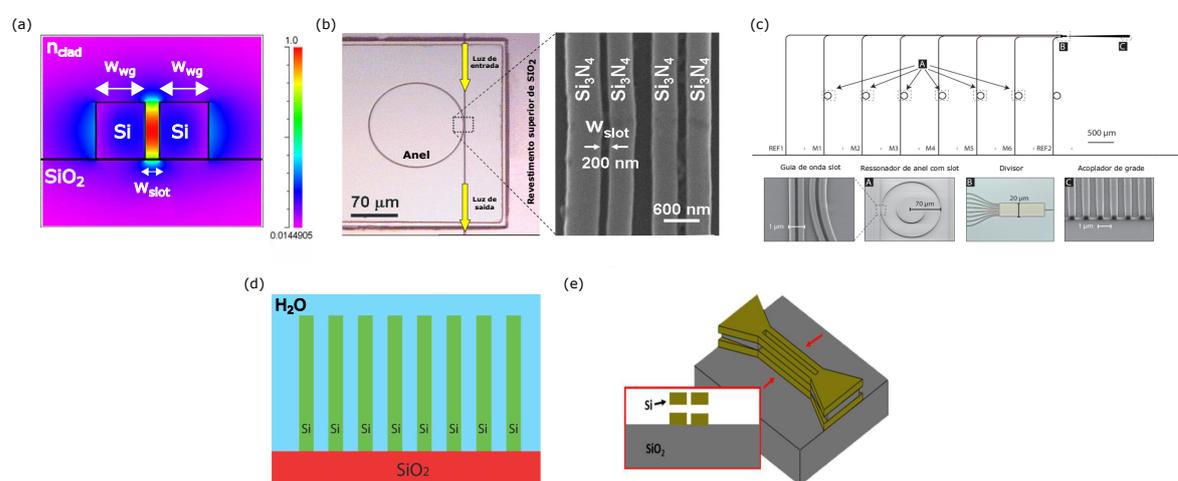
Como será visto no capítulo 3 a onda evanescente é fortemente dependente da dimensão e do material do guia de onda. Contudo, esse mecanismo de detecção baseado em evanescência promove o desenvolvimento de guias de onda ópticos com uso de novas geometrias como estratégia para melhorar o desempenho de detecção dos sensores ópticos. A saber, guias de onda do tipo *slot*, suspenso, com dimensões reduzidas ou curvados são frequentemente utilizados para incrementar a sensibilidade e o limite de detecção dos sensores baseados em guias de onda.

2.1.3.1.1 Guias de Onda *Slot*

O guia de onda *slot* é formado normalmente por dois guias de onda do tipo *ridge* de alto índice de refração separados por uma fenda ou *slot* de baixo índice (CARLBORG et al., 2010). Em virtude da alta concentração da intensidade do campo elétrico no interior da fenda, as estruturas baseadas em guias de onda de fenda se destacam pelo seu potencial de aumentar a sensibilidade dos biossensores ópticos. Conforme apresentado na Fig. 13(a), a luz é fortemente confinada na região da fenda. Dessa forma, em comparação com os guias de onda tradicionais, uma interação luz-analito

mais intensa pode ser obtida nesta região, promovendo uma melhor sensibilidade dos dispositivos ópticos. Além disso, as estruturas baseadas em guias de onda *slot* também são compatíveis com CMOS, o que permite a miniaturização e integração a uma plataforma *lab-on-a-chip* com baixo custo (BARRIOS, 2009).

Figura 13 – (a) Distribuição de intensidade do campo elétrico de uma seção transversal de um guia de onda *slot* imerso em $n_{clad} = 1.44$. (b) Biossensor de microcavidade baseado em *slot*. À esquerda: vista superior de uma microcavidade de anel ressonante de guia de onda de Si_3N_4 . À direita: imagem do microscópio eletrônico de varredura (MEV) da região de acoplamento. (c) Biossensor de micro-anéis de guia de onda baseados em *slots*. (d) Biossensor de guia de onda multi-*slot*. (e) Biossensor baseado em um guia de onda de *slot* cruzado.



Fonte: (a) Adaptado de (BARRIOS, 2009). (b) Adaptado de (BARRIOS et al., 2007). (c) Adaptado de (CARLBORG et al., 2010). (d) Adaptado de (KHODADAD et al., 2014). (e) Adaptado de (PAN; RAHMAN, 2017).

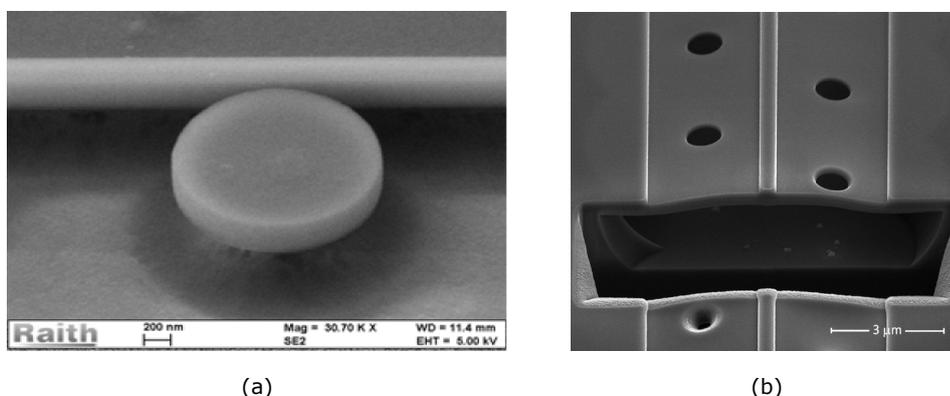
Barrios et al. (2007) foi o pioneiro no desenvolvimento de biossensores de guia de onda de *slot* usando ressonadores de micro-anéis baseados em Si_3N_4 (Fig. 13(b)). Durante o experimento foram adicionadas gotas de solução com índices de refração variáveis na janela de detecção com auxílio de uma micropipeta. Ao monitorar o deslocamento da ressonância, a sensibilidade obtida foi 212 nm/RIU e o sLOD foi 2×10^{-4} RIU. Em 2010, Carlborg et al. (2010) demonstraram uma matriz de sensores integrados com ressonadores de micro-anéis de guia de onda baseados em *slots* (Fig. 13(c)) que foram usados para biossensoriamento em tempo real sem rótulo. O sLOD homogêneo encontrado durante seus experimentos foi de 5×10^{-6} RIU e o sLOD de superfície de 0.9 pg/mm^2 . Anos posteriores, um ressonador baseado em múltiplos slots (Fig. 13(d)) para detecção bioquímica foi teoricamente demonstrado (KHODADAD et al., 2014). Este sensor foi capaz de atingir o valor de sensibilidade de 912 nm/RIU. Pan e Rahman (2017) projetou um sensor baseado em um guia de onda de *slot* cruzado (Fig. 13(e)), que consiste de *slots* verticais e horizontais e, portanto, suporta polarização dupla na região do slot. Esta nova configuração é superior à maioria dos guias de

ondas de slot que eram fortemente dependentes da polarização.

2.1.3.1.2 Guias de Onda Suspensos

Outra maneira para aumentar a interação entre o campo evanescente e o analito é o desenvolvimento de guias de onda suspenso, substituindo o substrato por substâncias de interesse que precisam ser detectadas. Veldhuis et al. (2000) demonstraram teoricamente que o desempenho de detecção pode ser melhorado usando uma estratégia de guia de onda de silício suspenso, onde a sensibilidade é aumentada por um fator de 1.35. Posteriormente, muitos sensores suspensos foram relatados na literatura. Os pesquisadores Wang et al. (2013) desenvolveram um micro-disco suspenso (Fig. 14(a)) ultrapequeno com um raio de $0.8 \mu\text{m}$ em um pedestal de SiO_2 para detecção óptica, apresentando uma sensibilidade medida de 130 nm/RIU . Os pesquisadores Taha et al. (2017) desenvolveram recentemente um sensor MZI em escala centimétrica baseado na plataforma SOI, introduzindo um guia de onda como o braço de detecção totalmente suspenso (Fig. 14(b)), obtendo uma sensibilidade homogênea de 740 nm/RIU com um iLOD de aproximadamente $4 \times 10^{-5} \text{ RIU}$.

Figura 14 – Imagens do MEV do (a) micro-disco suspenso e (b) guia de onda com o braço de detecção suspenso.



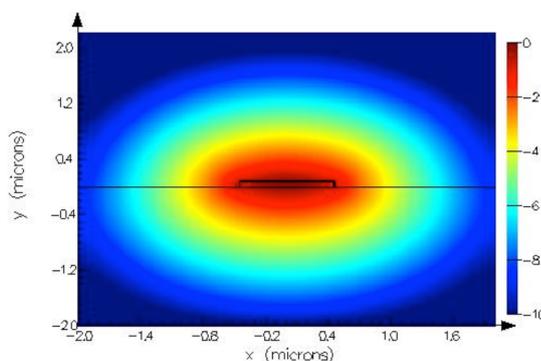
Fonte: (a) Adaptado de (WANG et al., 2013). (b) Adaptado de (TAHA et al., 2017).

2.1.3.1.3 Guias de Onda com Dimensões Reduzidas

O uso de guias de onda com dimensões reduzidas pode levar a um confinamento óptico inferior do modo guiado, resultando em uma penetração mais profunda da onda evanescente no analito em estudo, como representado na Figura 15. Adam Densmore et al. (2006) demonstraram teoricamente que os guias de onda SOI com dimensões reduzidas têm maior sensibilidade em relação aos sensores de guia de onda planar tanto para soluções homogêneas quanto para camadas de biofilme adsorvidas. Posteriormente, Fard et al. (2014) investigaram um sensor ressonador de micro-anel

ultrafino usando uma espessura de 90 nm (Fig. 15), obtendo uma sensibilidade acima de 100 nm/RIU com o iLOD na ordem de 5×10^{-4} RIU.

Figura 15 – Distribuições de intensidade de campo elétrico do modo TE fundamental para espessura de silício de 90 nm, calculado usando *MODE Solutions* do software Lumerical.

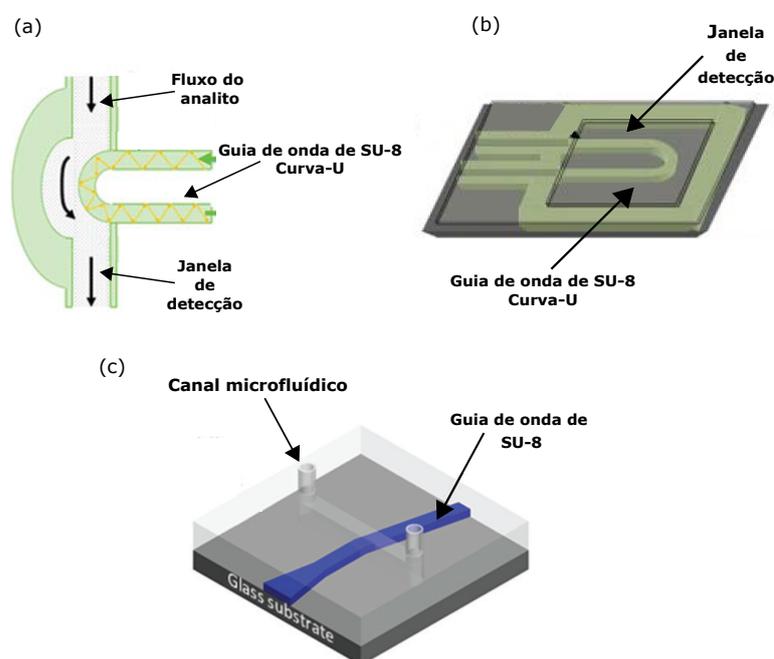


Fonte: Adaptado de (FARD et al., 2014).

2.1.3.1.4 Guias de Onda Curvados

Outro método utilizado para aumentar sobreposição da onda evanescente no analito é a utilização de guias de onda curvados. Embora os sensores de fibras ópticas em forma de U tenham sido usados por pesquisadores anteriores para várias aplicações, ou seja, detecção de umidade (KHIJWANIA; SRINIVASAN; SINGH, 2005), medições de pH (SURRE et al., 2009) e biossensoriamento (SAI; KUNDU; MUKHERJI, 2009), aparentemente foi feito um menor esforço para se adaptar e tirar vantagem destes esquemas de detecção usando sensores integrados de guias de onda com características semelhantes. Contudo, os pesquisadores Prabhakar e Mukherji (2010) propuseram um sensor de guia de onda de polímero na forma de U (ver Fig. 16(a)). Os resultados encontrados pelos pesquisadores indicaram que o sensor pode detectar com sucesso a uma mudança de 0.00028 unidades em RI, permitindo que essas estruturas possam ser utilizadas facilmente para aplicação de detecção física, química e biológica. Anos mais tarde, Prabhakar, Mishra e Mukherji (2017) demonstraram que era possível aumentar a sensibilidade do trabalho anterior em aproximadamente 3 vezes, devido à menor área de interação do campo evanescente com analito no projeto anterior, usando formas para simplificar e modificar o design do dispositivo (ver Fig. 16(b)) para melhorar a sua sensibilidade. Utilizando a mesma estratégia, I-Chen Liu et al. (2018) desenvolveram um sensor de guia de onda *ridge* curvado de polímero (ver Fig. 16(c)) baseado em detecção de intensidade em tempo real e de baixo custo. Os experimentos demonstram um valor de sLOD homogêneo de 5.31×10^{-4} RIU.

Figura 16 – Propostas de sensores ópticos. (a) Sensor de guia de onda com curva em forma de U (vista superior). (b) Sensor de guia de onda com curva em forma de U modificado (vista superior). (c) Sensor de guia de onda *ridge* curvado (vista em perspectiva)



Fonte: Fonte: (a) Adaptado de (PRABHAKAR; MUKHERJI, 2010). (b) Adaptado de (PRABHAKAR; MISHRA; MUKHERJI, 2017). (c) Adaptado de (LIU, I.-C. et al., 2018)

2.1.3.2 Interferômetros

Os sensores baseados em interferômetros constituem uma das abordagens ópticas integradas mais sensíveis, uma vez que combina duas técnicas: guiamento de onda e interferometria (KOZMA et al., 2014). Em um sensor interferométrico comum, a luz guiada é dividida por uma junção em Y em dois caminhos, um contendo o analito de interesse, que é considerado como um braço de detecção e o outro é usado como um braço de referência. O campo evanescente do braço de detecção interage com o analito e detecta a mudança de índice de refração na superfície, provocando um deslocamento de fase óptica. Após uma certa distância, as ondas de luz se recombinam novamente e causam uma interferência construtiva ou destrutiva na saída, conforme mostrado na Fig. 17(c). A modulação da intensidade na saída do dispositivo corresponde à diferença de índice de refração entre os braços de detecção e referência.

Os interferômetros de Young (YI) e Mach-Zehnder (MZI) são os formatos mais comuns para técnicas de detecção interferométrica (GAVELA et al., 2016; KOZMA et al., 2014), conforme mostrados na Figura 17. Desde o primeiro experimento de dupla fenda por Young (1804), e a demonstração da detecção de deslocamento de fase entre dois feixes colimados por Ludwig Zehnder (ZEHNDER, 1891) e Ernst Mach (LUDVIG, 1892). Apesar que ambos os interferômetros usem junções Y para dividir a onda de luz, a recombinação de saída dos interferômetros Young e Mach - Zehnder são diferentes.

A interferência de luz no dispositivo Young é projetada em uma tela ou dispositivo de carga acoplada (CCD, *charge-coupled device*), como pode visto na Fig. 17(b).

Já em um sensor MZI (Fig. 17(a)), a intensidade de saída (I_{out}) é uma função que depende de $\Delta\phi$, que é a diferença da mudança de fase dos feixes dos dois braços do MZI. A I_{out} é descrita pela relação: (JENKINS; WHITE, 1957):

$$I_{out} = I_{det} + I_{ref} + 2\sqrt{I_{det}I_{ref}}\cos(\Delta\phi + \Delta\phi_0) \quad (2.61)$$

onde I_{ref} e I_{det} são a intensidade da luz que passa pelos braços de referência e de detecção, respectivamente, e $\Delta\phi_0$ é a diferença de fase inicial devido ao desequilíbrio dos dois braços.

A diferença de fase causada pela variação do índice efetivo (Δn_{eff}) no comprimento de onda λ é calculada como:

$$\Delta\phi = \frac{2\pi\Delta n_{eff}L}{\lambda} \quad (2.62)$$

onde L é comprimento do braço de detecção.

No caso do sensor YI, sendo que não é apenas uma única intensidade, mas um padrão de interferência (conhecido como interferograma) é detectado na saída, a diferença de comprimento do caminho óptico de duas fontes secundárias está variando ao longo da direção de propagação no eixo y (KOZMA et al., 2014). Dessa forma, a equação pode ser reescrita como:

$$I_{out}(y) = \frac{\sin^2\left(\frac{b\pi y}{\lambda l}\right)}{\left(\frac{b\pi y}{\lambda l}\right)^2} I_{det} + I_{ref} + 2\sqrt{I_{det}I_{ref}}\cos\left(\frac{\lambda l y}{2\pi d} + \Delta\phi + \Delta\phi_0\right) \quad (2.63)$$

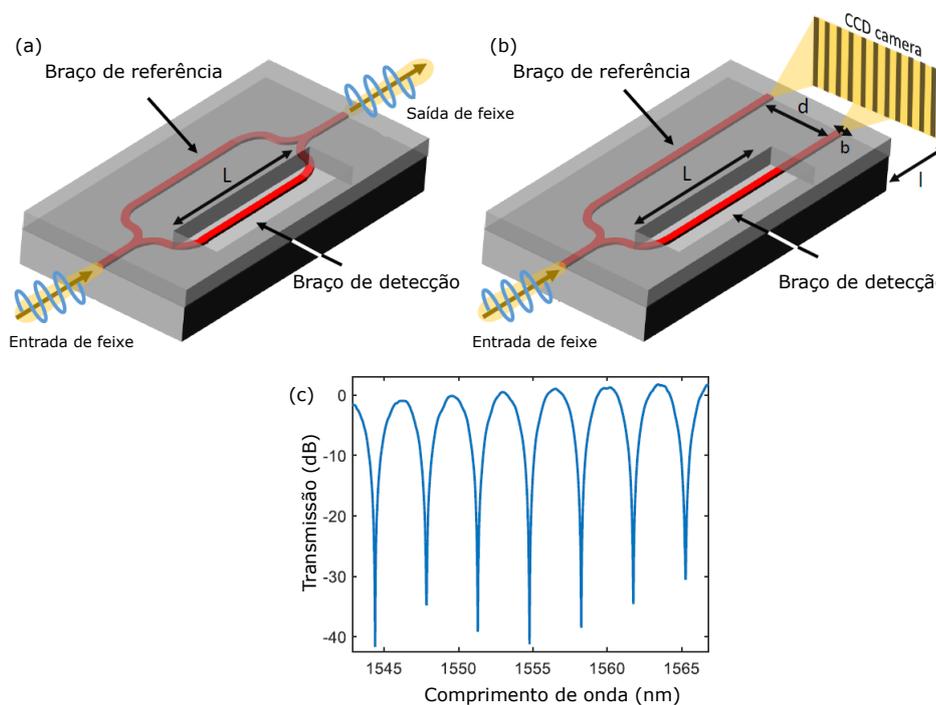
onde b , d e l são a largura de uma única fenda, a distância de duas fontes secundárias e a distância das fontes até a superfície do detector, respectivamente (como mostrado na Fig. 17). Para o sensor YI, a diferença de fase é definida como:

$$\Delta\phi = \frac{2\pi}{\lambda}\left(\frac{x d}{l} - \Delta n_{eff}L\right) \quad (2.64)$$

onde x é a posição do interferograma na câmera.

A primeira aplicação de biossensoriamento usando MZIs integrados foi descrita por Heideman, Kooyman e Greve (1991). Desde então, um grande desenvolvimento foi feito dentro do aprimoramento dos sensores MZIs. Diferentes estruturas com uma variedade de materiais de fabricação, tais como, Si_3N_4 (LIU, Q. et al., 2013), SiO_2 (CRESPI et al., 2010), Si (DENSMORE, A. et al., 2009), polímero (HILTUNEN et al., 2014) e até mesmo líquido (DUMAIS et al., 2008) foram empregadas com sucesso, mostrando um LOD entre 10^{-6} a 10^{-7} . Os sensores YI também mostraram capacidade de detecção comparáveis aos dispositivos MZIs (YMETI et al., 2007; KANGER et al., 2009).

Figura 17 – Sensores ópticos interferométricos. (a) Interferômetro de Mach-Zehnder. (b) interferômetro de Young. (c) Interferograma medido de um interferômetro convencional de Mach-Zehnder.



Fonte: Adaptado de (LUAN et al., 2018).

2.1.3.3 Cavidades Ressonantes

Os ressonadores ópticos baseados em cavidades são investigados como uma tecnologia de detecção promissora devido ao seu potencial para matrizes de detecção altamente compactas. Na estrutura de um ressonador de cavidade, a propagação da luz incidente em um guia de onda é acoplada à cavidade por meio do campo evanescente. Em seguida, a luz acoplada propaga na cavidade na forma de modos de galeria sussurrantes (WGMs, *Whispering Gallery Modes*), resultando em interferência óptica em comprimentos de onda de luz específicos, como mostrado na Fig. 18, que satisfazem a seguinte relação (LUAN et al., 2018):

$$\lambda = \frac{2\pi r n_{eff}}{n} \quad (2.65)$$

onde λ é o comprimento de onda ressonante, r é o raio do ressonador, n_{eff} é o índice de refração efetivo do ressonador e n é um número inteiro.

As posições dos picos ressonantes estão relacionadas ao índice de refração próximo à superfície do ressonador e mudam devido à variação de n_{eff} , que pode ser monitorada pelo espectro do comprimento de onda ou pela medição da intensidade em um único comprimento de onda.

Diferentemente dos sensores interferométricos, a interação de luz e analito não é mais determinada pelo comprimento do guia de onda de detecção, mas sim pelo

tempo característico da energia armazenada dentro do ressonador, que é caracterizado pelo fator de qualidade (Q) (FAN et al., 2008). O fator de qualidade descreve o tempo de vida do fóton no ressonador e representa o número de oscilações antes que a energia diminua para 37% (LUAN et al., 2018). Contudo, o fator Q também está relacionado com as perdas do ressonador e pode ser aproximado pela razão entre o comprimento de onda ressonante e a largura a meia altura da sua ressonância (FWHM, *Full Width At Half Maximum*) (CHROSTOWSKI et al., 2012).

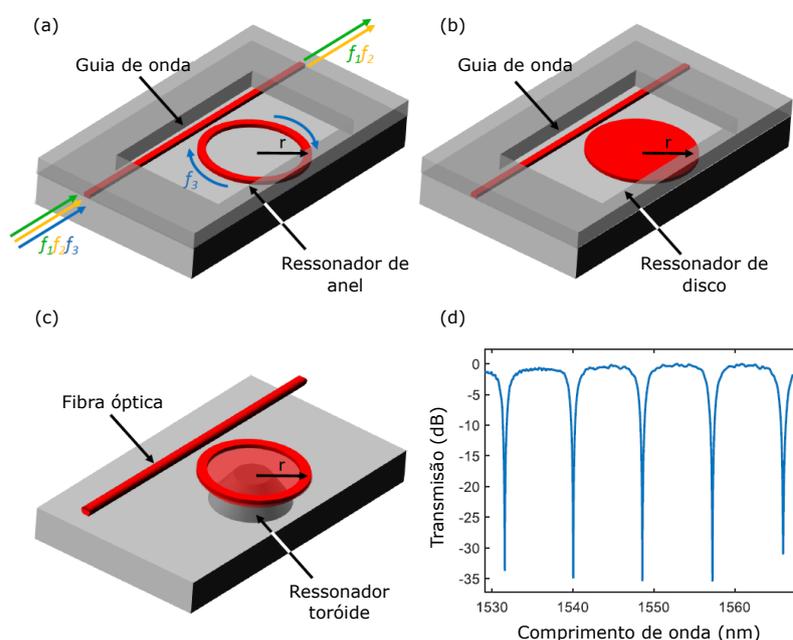
$$Q \approx \frac{\lambda}{\Delta\lambda_{FWHM}} \quad (2.66)$$

onde $\Delta\lambda_{FWHM}$ é a largura de banda do pico de ressonância. Um valor alto de Q , indica que o modo do guia de onda permanece no ressonador um período maior, fazendo com que ele interaja mais com analito alvo. Como apresentado na seção 2.1.2.2, sLOD depende tanto do dispositivo fotônico quanto da resolução do aparelho de medição, o que torna difícil uma comparação do desempenho de diferentes sensores usando essa métrica. Conseqüentemente, o limite de detecção intrínseco (iLOD) foi inserido como um substituto para os sensores ressonantes, que depende apenas das características intrínsecas, e pode ser definido como (YOSHIE; TANG; SU, 2011):

$$iLOD = \frac{\lambda}{QS} \quad (2.67)$$

onde S é a sensibilidade de *bulk* ou *surface*.

Figura 18 – Sensores ópticos de microcavidades ressonantes. (a) Ressonador de anel. (b) Ressonador de disco. (c) Ressonador toróide. (d) Espectro de transmissão medido do dispositivo ressonador de anel.



Fonte: Adaptado de (LUAN et al., 2018).

Diferentes tipos de configurações baseadas em microcavidades ressonantes de guias de ondas foram projetadas, tais como, micro-disco (KRIOUKOV et al., 2002), micro-toróide (ARMANI; VAHALA, 2006) e micro-anéis (CHAO; GUO, 2006), mostrados na Fig. 18(a), (b) e (c). Na Fig. 18(d) é mostrado em detalhes o espectro de transmissão de um dispositivo contendo um ressonador de anel. Os materiais geralmente utilizados na fabricação dos ressonadores de microcavidades são Si (CIMINELLI et al., 2014), SiO_2 (RAMACHANDRAN et al., 2008), Si_3N_4 (CARLBORG et al., 2010) e polímero (GIRAULT et al., 2015).

2.1.3.4 Ressonância de Plasmon de Superfície

Ressonância de Plasmon de Superfície é provavelmente uma das tecnologias mais difundida e bem conhecida, que detecta a mudança no índice de refração causada pela interação molecular em uma superfície de metal via onda de plasmon de superfície (SPW, *Surface Plasmon Wave*) (MALMQVIST, 1993). O plasmon de superfície ocorre quando os fótons da onda incidente interagem com os elétrons na superfície do metal. O plasmon se propaga paralelamente ao longo da superfície do metal, formando assim uma onda de plasmon de superfície (SP). A SPW se propaga na fronteira entre o metal e o dielétrico e se atenua exponencialmente no dielétrico. O SP pode ser excitado opticamente em uma interface dielétrica de metal, apenas quando o vetor de onda da onda óptica coincide com o do modo SP. Na maioria dos casos, o modo SP não pode ser excitado diretamente por uma luz devido ao vetor de onda do modo SP que geralmente é maior do que o da onda incidente. O aumento do número de onda de luz pode ser alcançado pela reflexão total atenuada (ATR, *Attenuated Total Reflection*) que pode ser realizada em um dispositivo de acoplamento. As estruturas de acoplamento mais comumente usadas são acopladores de prisma (GWON; LEE, 2010; ANDREAS OTTO, 1968), acopladores de grade (LAWRENCE et al., 1996) e acopladores de guia de onda (DOSTÁLEK et al., 2001).

A Fig. 19 mostra a configuração esquemática de Kretschmann; neste caso no momento em que o vetor de onda da luz incidente no plano da superfície (k_S) coincide com o vetor de onda plasmônica de superfície no filme metálico (k_{SPW}), as equações de Maxwell permitem expressar as seguintes relações para condição de ressonância (GWON; LEE, 2010):

$$k_S = \frac{2\pi}{\lambda} \eta_p \text{sen}\theta \quad (2.68)$$

$$k_{SPW} = \frac{2\pi}{\lambda} \sqrt{\frac{\varepsilon_m \varepsilon_d}{\varepsilon_m + \varepsilon_d}} \quad (2.69)$$

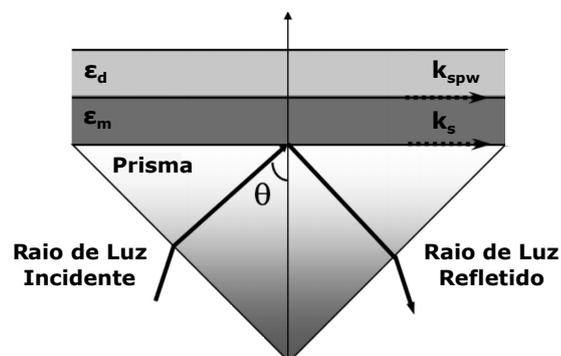
onde ε_m é uma constante dielétrica complexa do metal, ε_d é uma constante dielétrica complexa de dielétricos e η_p é o índice de refração do prisma. A relação de correspondência, incluindo a constante dielétrica complexa do metal ε_m e o ângulo ressonante

θ_{SPR} , pode ser definida como:

$$k_{SPW} = k_S, \quad \theta_{SPR} = \text{sen}^{-1} \sqrt{\frac{\epsilon_m \epsilon_d}{\epsilon_p (\epsilon_m + \epsilon_d)}} \quad (2.70)$$

Diversos dispositivos comerciais baseados na tecnologia SPR já foram feitos por empresas como a *Biacore* (POL et al., 2016). Esses biossensores geralmente utilizam acopladores de prisma, alcançando um sLOD homogêneo na faixa de 10^{-7} RIU a 10^{-6} RIU e sLOD de superfície de 1 pg/mm^2 . No entanto, seu volume estrutural não é compatível com a miniaturização em uma plataforma *lab-on-chip*. Além disso, melhorar a sensibilidade e o LOD de um sensor SPR passa a ser um dos focos de constantes pesquisas. Hoje em dia, com base nos sensores SPR convencional, novas tecnologias de dispositivos baseados em SPR foram surgindo, incluindo ressonância de plasmon de superfície localizado (LSPR, *Localized Surface Plasmon Resonance*) (UNSER et al., 2015), plasmon de superfície de longo alcance (LRSP, *Long Range Surface Plasmon*) (BÉLAND; KRUPIN; BERINI, 2015) e imagem de ressonância de plasmon de superfície (SPRi, *Surface Plasmon Resonance Imaging*) (ZENG et al., 2017) que são amplamente utilizados no campo de biossensoriamento.

Figura 19 – Representação esquemática da configuração de Kretschmann de um sensor SPR.



Fonte: Adaptado de (GWON; LEE, 2010).

2.2 Métodos de Simulação

A teoria fundamental por trás de todos os dispositivos fotônicos pode ser descrita pelas equações de Maxwell, que são amplamente utilizadas para calcular e analisar o comportamento dos campos eletromagnéticos. Contudo, as soluções analíticas das equações de Maxwell não estão disponíveis de maneira simples para a maioria das aplicações, exceto para algumas estruturas simples. Para analisar os dispositivos fotônicos com geometrias complexas, métodos numéricos são desenvolvidos para simular e prever o comportamento da luz.

Nesta seção, alguns métodos numéricos de interesse são analisados e discutidos. O método de propagação de feixe (BPM) e o de diferenças finitas no domínio do

tempo (FDTD, *Finite-Difference Time-Domain*) são amplamente utilizados para simular a propagação de luz em dispositivos ópticos (IGUCHI et al., 2017; CHRISTENSEN; FOWERS, 1996). Os modos dos guias de onda podem ser analisados pelos métodos de elementos finitos (FEM, *Finite Element Method*) (RAHMAN; DAVIES, 1984) e diferenças finitas (FDM, *Finite Difference Method*) (BASSI et al., 1998).

Nessa dissertação, para verificar o desempenho dos sensores projetados e fornecer uma análise numérica do perfil de campo modal e propagação de energia óptica ao longo do eixo z, o método de propagação de feixe semivetorial 3D BPM que é baseado em um método implícito de direção alternada (ADIM, *Alternating Direction Implicit Method*) (PLANITZ et al., 1987) foi aplicado. Este método numérico provou ser uma das melhores opções ao lidar com nosso tipo de sensor. Iguchi et al. (2017) demonstraram que o uso de BPM semivetorial é uma opção interessante para otimização de eficiência quando a topologia do guia de ondas óptico é de grande importância. Nesse sentido, decidiu-se utilizar o BPM semivetorial em todas as simulações. O *software* comercial *Rsoft Photonics* foi usado nas simulações (RSOFT PHOTONIC DEVICE TOOLS. . . , 2020).

2.2.1 Método BPM

BPM é a técnica de propagação amplamente usada para modelar dispositivos fotônicos integrados (acopladores, divisores de polarização, sensores óticos e interferência multimodo) devido sua precisão e simplicidade.

Diferentes métodos de BPMs foram desenvolvidos e publicados na literatura, incluindo métodos de elementos finitos FEM-BPM (TSUJI; KOSHIBA; SHKAISHI, 1997), diferenças finitas FD-BPM (CHUNG; DAGLI, 1990) e transformada rápida de Fourier (FFT, Fast Fourier Transform) FFT-BPM (YAMAUCHI; SHIBAYAMA; NAKANO, 1995). O método convencional baseado em BPM é eficaz apenas para análise paraxial sem descontinuidade do índice na direção de propagação e o BPM escalar só pode ser aplicado a guias de ondas de confinamento fraco. Além disso, esse método não leva em conta as reflexões (SCARMOZZINO; GOPINATH et al., 2000). A fim de melhorar o desempenho BPM para aplicações mais complexas, novas técnicas foram desenvolvidas para superar sua limitação, tais como, *wide-angle* BPM (HADLEY, 1992), semi/full-vetorial BPM (HUANG; XU; CHAUDHURI, 1992) e bidirecional BPM (OBAYYA, 2010) que tornam possível simular e analisar dispositivos ópticos complexos. Nessa seção será apresentado o modelo básico de BPM tridimensional.

A suposição de campo escalar permite que a equação de onda seja escrita na forma da equação de Helmholtz como

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} + [k(x, y, z)]^2 \phi = 0 \quad (2.71)$$

O campo elétrico escalar foi escrito como $E(x, y, z, t) = \phi(x, y, z)e^{-j\omega t}$ onde $k(x, y, z) = k_0 n(x, y, z)$, $k_0 = 2\pi/\lambda$ é número de onda no espaço livre e $n(x, y, z)$ é a distribuição do índice de refração.

Considerando que em problemas típicos de ondas guiadas, a variação mais rápida no campo ϕ é a variação de fase na direção de propagação, o chamado campo de variação lenta $u(x, y, z)$, pode ser definido como

$$\phi(x, y, z) = u(x, y, z)e^{j\bar{k}z} \quad (2.72)$$

onde \bar{k} é um número constante para representar a variação de fase média do campo ϕ , e é referido como o número de onda de referência. O número de onda de referência é frequentemente expresso em termos de um índice de refração de referência, \bar{n} , como $\bar{k} = k_0 \bar{n}$. A expressão 2.72 na equação de Helmholtz produz a seguinte equação para o campo de variação lenta

$$\frac{\partial^2 u}{\partial z^2} + 2j\bar{k}\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + (k^2 - \bar{k}^2)u = 0 \quad (2.73)$$

A equação acima é completamente equivalente à equação de Helmholtz, exceto que é expressa em termos de u . Presume-se agora que a variação de u com z é suficientemente lenta para que o primeiro termo acima possa ser desprezado em relação ao segundo. Esta é a familiar aproximação de envelope de variação lenta e, neste contexto, também é chamada de aproximação paraxial. Com essa suposição e após um rearranjo dos termos, a equação 2.73 se reduz a

$$\frac{\partial u}{\partial z} = \frac{j}{2\bar{k}} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + (k^2 - \bar{k}^2)u \right) = 0 \quad (2.74)$$

É importante reconhecer o que foi ganho e perdido com essa simplificação da equação 2.73. Em primeiro lugar, a fatoração da variação de fase rápida permite que o campo de variação lenta seja representado numericamente em uma grade longitudinal (isto é, ao longo de z) que pode ser muito mais grosseira do que o comprimento de onda para muitos problemas, contribuindo em parte para a eficiência da técnica. Em segundo lugar, a eliminação do segundo termo da derivada em z reduz o problema de um problema de valor limite de segunda ordem que requer iteração ou análise de autovalor, para um problema de valor inicial de primeira ordem que pode ser resolvido por simples "integração" da equação 2.74 ao longo da direção de propagação z . Este último ponto também é um fator importante na determinação da eficiência do BPM, implicando uma redução do tempo por um fator de pelo menos da ordem de N_z (o número de pontos de grade longitudinais) em comparação com a solução numérica completa da equação de Helmholtz.

Contudo, essa simplificação da equação de Helmholtz tem um preço a se pagar. A aproximação de envelope de variação lenta limita a consideração dos campos que

se propagam principalmente ao longo do eixo z (ou seja, paraxialidade), e também coloca restrições no contraste do índice (mais precisamente, a taxa de mudança do índice com z , que é uma combinação de contraste do índice e ângulo de propagação). Além disso, os campos que têm uma superposição complicada de variação de fase, como os existentes em dispositivos multimodo, como interferometria multimodal (MMI), podem não ser modelados com precisão se a variação de fase for crítica. Uma segunda questão, além das restrições acima sobre a variação de u é que a eliminação da segunda derivada também elimina a possibilidade de soluções de ondas progressivas para trás, assim, dispositivos para os quais a reflexão é relevante não serão modelados com precisão. Como já mencionado acima existem técnicas para eliminar e reduzir esses problemas ocasionados pela simplificação da equação 2.74.

2.2.2 Método FDTD

O método FDTD é uma técnica de modelagem numérica popular sem qualquer aproximação que foi proposta pela primeira vez por Yee (1966). Este método fornece solução rigorosa para as equações de Maxwell, que permite alta precisão dos resultados da simulação de dispositivos fotônicos. O método FDTD tornou-se a abordagem ideal para lidar com a interação entre o campo eletromagnético e o sistema material. Apesar do amplo consumo de grandes recursos de computação, o FDTD é intuitivo e fácil de usar. Imagine uma região do espaço que não contém correntes fluindo ou cargas isoladas. As equações Maxwell podem ser escritas em coordenadas cartesianas como:

$$\frac{\partial E_y}{\partial t} = \frac{-1}{\epsilon} \left(\frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial x} \right) \quad (2.75)$$

$$\frac{\partial H_x}{\partial t} = \frac{-1}{\mu} \left(\frac{\partial E_y}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial y} \right) \quad (2.76)$$

onde ϵ , μ é a permissividade e a permeabilidade. Lembrando que essas equações podem ser estendidas para seis equações escalares. As equações de Maxwell descrevem uma situação na qual a mudança temporal no campo E é dependente da variação espacial do campo H e vice-versa. O método FDTD resolve as equações de Maxwell primeiro discretizando as equações por meio de diferenças centrais no tempo e no espaço e, em seguida, resolvendo numericamente essas equações.

O método mais comum para resolver essas equações é baseado na malha de Yee (1966), no qual calcula os componentes do campo E e H em pontos de uma grade espaçados por Δx , Δy e Δz . As componentes do campo E e H são então entrelaçados em todas as três dimensões espaciais, conforme mostrado na Fig. 20. Além disso, o tempo é dividido em etapas discretas de Δt . As componentes do campo E são então calculadas nos tempos $t = n\Delta t$ e para os campos H nos períodos de $t = (n + 1/2)\Delta t$, onde n é um número inteiro que representa a etapa de cálculo.

Este método resulta em seis equações que podem ser usadas para calcular o campo em um determinado ponto da malha, denotado por inteiros i, j, k . Será mostrada apenas duas equações:

$$E_{x(i,j,k)}^{n+1} = E_{x(i,j,k)}^n + \frac{\Delta t}{\mu \Delta z} (H_{y(i,j+1,k)}^{n+1/2} - H_{y(i,j,k)}^{n+1/2}) - \frac{\Delta t}{\mu \Delta y} (H_{y(i,j,k+1)}^{n+1/2} - H_{y(i,j,k)}^{n+1/2}) \quad (2.77)$$

$$H_{x(i,j,k)}^{n+1/2} = H_{x(i,j,k)}^{n-1/2} + \frac{\Delta t}{\mu \Delta z} (E_{y(i,j,k)}^n - E_{y(i,j,k-1)}^n) - \frac{\Delta t}{\mu \Delta y} (E_{z(i,j,k)}^n - E_{z(i,j,k-1)}^n) \quad (2.78)$$

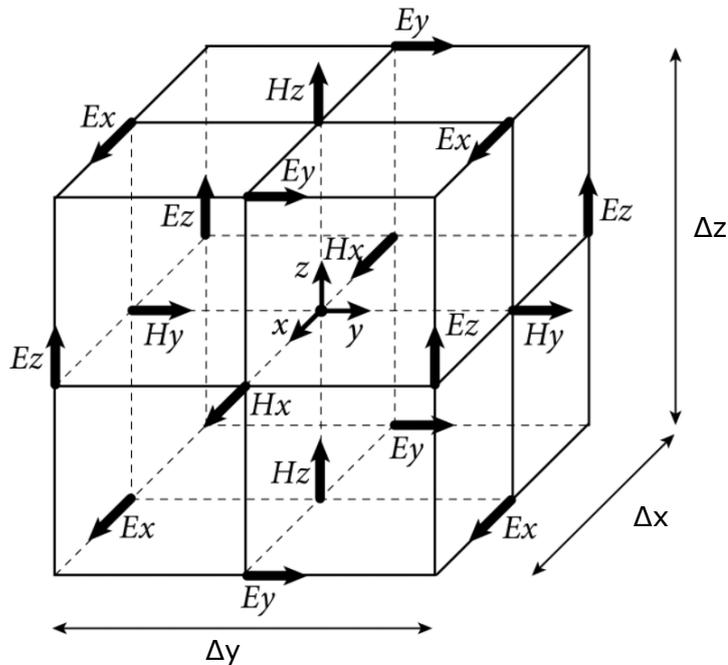
Essas equações são resolvidas iterativamente em uma maneira de salto, alternando entre o cálculo dos campos H e E em intervalos $\Delta t/2$ subsequentes.

Deve-se ressaltar que para se obter uma solução estável e convergente, o intervalo de tempo Δt não pode ser muito grande. Deve cumprir a seguinte condição:

$$c\Delta t < \frac{1}{\sqrt{\frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2} + \frac{1}{\Delta z^2}}} \quad (2.79)$$

onde c é a velocidade da luz no material. Como mencionado antes, o método FDTD requer muitos recursos de computação, especialmente no caso do 3D-FDTD. Portanto, é aplicável apenas a uma estrutura com um tamanho limitado.

Figura 20 – Grade de Yee em três dimensões.



Fonte: Adaptado de (YEE, 1966).

CAPÍTULO 3

SENSOR DE GUIA DE ONDA ESTRANGULADO DE NITRETO DE SILÍCIO

Neste capítulo é proposto e analisado um sensor de RI baseado em um guia de onda estrangulado para detecção por variação de intensidade na saída do guia. Inicialmente, o design do guia de onda, o modo óptico que ele suporta e as perdas de propagação serão apresentados com detalhes. Em seguida, demonstramos o dimensionamento do acoplador óptico responsável pelo acoplamento da luz de uma fibra óptica para o guia de onda integrado, garantindo um ótimo casamento modal. Esse mesmo acoplador é responsável por acoplar o sinal da saída do sensor em um fotodetector.

Por fim, analisamos o desempenho do dispositivo óptico baseando-se nas figuras de mérito: limite de detecção (sLOD) e sensibilidade, que são influenciadas pela dimensão e rugosidade do guia. Simulações de alta fidelidade foram realizadas a fim de verificar a influência dos parâmetros acima mencionados no desempenho do sensor. Após uma pesquisa detalhada sobre o tema, ficou evidente que embora o estrangulamento em fibras ópticas ou em acopladores de guias de onda integrados seja bastante empregado na literatura, esta é a primeira vez que o desempenho de um guia de onda integrado e estrangulado de nitreto de Silício, funcionando como sensor de RI, é proposto e estudado. De maneira geral, as simulações mostraram que um estrangulamento adequado no guia de onda é capaz de incrementar significativamente a sensibilidade do sensor baseado em guia de onda, superando dispositivos complexos apresentados na literatura. Por fim, demonstramos que existe uma faixa específica de tolerância dimensional e de rugosidade que é necessária para garantir a sensibilidade otimizada apresentada nesse trabalho.

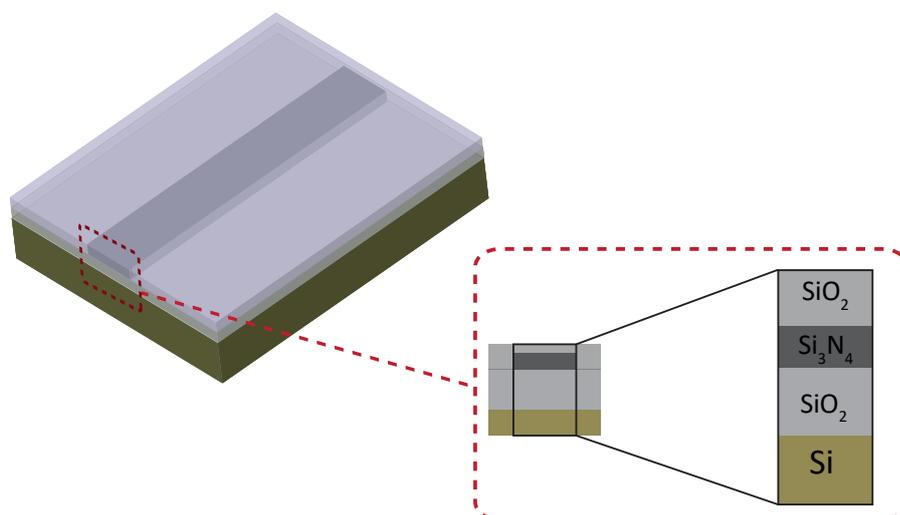
3.1 Guia de Onda

O projeto de um guia de onda normalmente é feito para definir as dimensões que garantem as condições necessárias para um desempenho significativo em determinada aplicação. Sendo assim, nessa dissertação, o propósito é desenvolver um guia de onda que permita, simultaneamente, obter uma onda evanescente maximizada para interagir com o analito alvo, baixa perda de propagação e dimensões que não exijam alta complexidade na fabricação. No entanto, quando se trata de complexidade

na fabricação, é de extrema importância a escolha de materiais compatíveis com a tecnologia CMOS. Desse modo, Si_3N_4 é um candidato promissor devido ao seu índice de refração relativamente alto e absorção desprezível no espectro de comprimento de onda visível, além de ser compatível com a tecnologia CMOS (SHAKOOR et al., 2017).

Com base nessas ponderações, iniciou-se o projeto do guia de onda retangular mostrado na Fig. 21. A primeira camada de SiO_2 deverá ser depositada sobre um substrato de Si, seguido de uma camada de Si_3N_4 , que formará o guia de onda. Por fim, uma segunda camada (revestimento) de SiO_2 é depositada, após as etapas anteriores de fabricação, revestindo a parte superior do guia de onda retangular, a fim de protegê-lo do meio externo e garantir robustez ao sensor.

Figura 21 – Esquema do guia de onda retangular vista em perspectiva e seção transversal do guia.



Fonte: O autor.

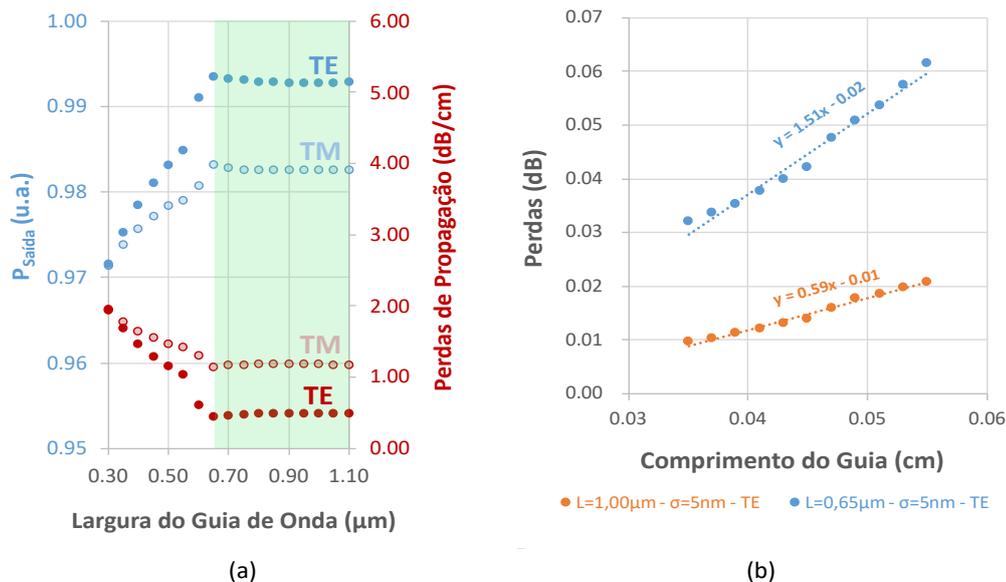
Com respeito às espessuras das camadas ilustradas na Fig. 21, a escolha foi realizada com base nos limites de deposição e fabricação apresentados na literatura (DUMON, 2007; WU; POON, 2020). Nesse sentido, algumas das espessuras foram fixadas com os seguintes valores: $2.2 \mu\text{m}$ de SiO_2 sobre o substrato de Si, 300 nm de Si_3N_4 e $2 \mu\text{m}$ de SiO_2 para o revestimento. A espessura da camada de SiO_2 depositada sobre o Si é suficientemente espessa para tornar a perda de vazamento de luz do guia para o substrato insignificante (DUMON, 2007). Além disso, esta espessura também é padrão nas plataformas SiN_{ON} das principais *foundries* no mundo, uma vez que elas reduzem os problemas de stress entre os materiais. Esse problema ocorre devido aos diferentes coeficientes de dilatações térmicas entre o SiO_2 e o Si_3N_4 , que são os responsáveis pelo aparecimento de rachaduras no filme de nitreto durante a refrigeração do filme, logo após o crescimento à alta temperatura. Normalmente, o stress entre esses filmes limita a espessura do Si_3N_4 a valores menores que 400 nm , evitando que as rachaduras sejam formadas (WU; POON, 2020). Já a camada de

revestimento garante, como dito antes, a proteção do guia de onda de Si_3N_4 contra perturbações do meio externo. Com relação aos índices de refração adotados para esses materiais em um comprimento de onda de $\lambda = 632 \text{ nm}$, eles foram: $n_{\text{SiO}_2} = 1.46$ (TAN, 1998), $n_{\text{Si}_3\text{N}_4} = 2.04$ (LUKE et al., 2015) e $n_{\text{Si}} = 3.88$ (ASPNES; STUDNA, 1983).

Com esses dados de espessuras e índices de refração definidos, foi possível realizar uma simulação 3D do guia de onda para encontrar as perdas de propagação e o índice efetivo para diferentes larguras do guia de onda nas polarizações TE e TM. O objetivo dessa etapa é identificar uma largura para o guia de onda que satisfaça as condições de baixa perda de propagação e dimensões adequadas para uma fabricação de baixa complexidade.

A simulação das perdas de propagação foi realizada bombeando na entrada de cada guia de onda o seu modo fundamental, garantindo que não houvesse perdas de acoplamento. A potência de entrada foi fixada em 1 W. O guia utilizado na simulação possuía 1 mm de comprimento e a detecção de potência foi realizada na saída de cada guia. Para essa simulação, o tamanho da malha usado foi de 20 nm em todas as direções e, como mostrado na Fig. 22(a), foram extraídas as potências de saída de cada guia de onda (curva em azul), que permitiram computar as perdas de propagação (curva em vermelho) de cada guia, tanto para polarização TE quanto TM.

Figura 22 – (a) Perdas de propagação em um guia de onda, para os modos TE e TM em função da largura do guia de onda, utilizando um comprimento de guia de onda de 1 mm. (b) Perdas de propagação em um guia de onda em função do comprimento do guia, considerando $L = 0.65 \mu\text{m}$, $L = 1.00 \mu\text{m}$ e $\sigma = 5 \text{ nm}$, para polarização TE.



Fonte: O autor.

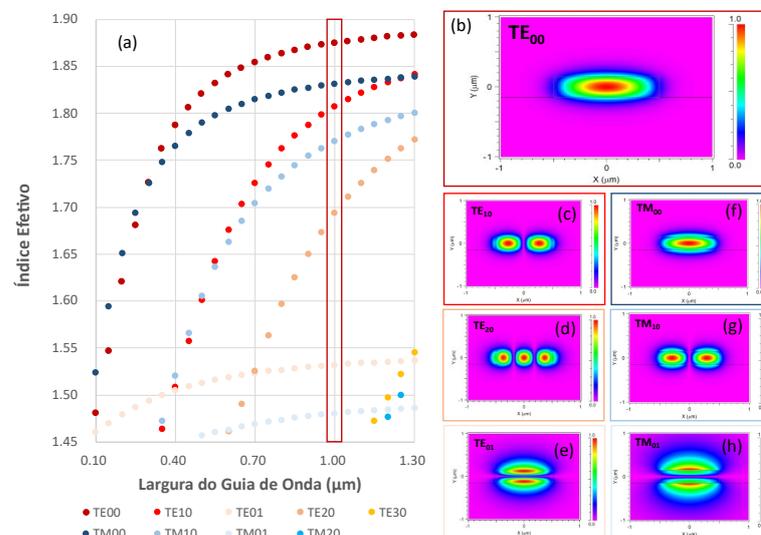
Os resultados da Fig. 22 mostram que as potências na saída do guia, tanto para TE quanto para TM, aumentam a medida que a largura do guia de onda é incrementada. A região em verde na Fig. 22(a), onde $L > 0.65 \mu\text{m}$, representa a faixa

de largura do guia simulado em que as perdas de propagação para polarização TE são de aproximadamente 0.5 dB/cm e para polarização TM são de aproximadamente 1.2 dB/cm. Essa é a região simulada onde o guia de onda passa a apresentar as menores perdas de propagação. Analisando com cuidado esses resultados, é possível ver que para $0.65 \mu\text{m}$ as perdas de propagação são discretamente menores do que para larguras superiores. No entanto, antes de escolhermos uma largura ideal para o guia que irá compor o sensor, é importante lembrar que essas perdas de propagação sofrem forte influência da rugosidade das paredes, causadas durante a fabricação, e que não foram consideradas até esse momento. Dessa forma, para avaliar o impacto da rugosidade nas perdas de propagação do guia de onda, uma perturbação aleatória na parede lateral do guia foi criada para modelar a rugosidade litográfica (DIETRICH MARCUSE, 1991). Informações detalhadas sobre o procedimento de modelagem da rugosidade podem ser encontradas no guia do usuário do pacote computacional RSoft (RSOFT PHOTONIC DEVICE TOOLS. . . , 2020) e na referência (RIEGEL et al., 2013). Para essa simulação foram considerados dois comprimentos de guia de onda: $L = 0.65 \mu\text{m}$ e $L = 1.00 \mu\text{m}$, sendo o primeiro deles escolhido devido a discreta redução observada para a perda de propagação e o segundo por se tratar de uma largura de fácil fabricação. Os resultados obtidos na simulação do impacto da rugosidade estão apresentados na Fig. 22(b). Para essa simulação foi considerada uma malha de dimensões 1 nm em todas as direções, bem como uma rugosidade de 5 nm. Analisando a influência da rugosidade de 5 nm nos guias de onda TE, que foi a polarização escolhida pois permite as menores perdas observadas na Fig. 22(a), é possível ver na Fig. 22(b) que com o aumento da rugosidade, as perdas de propagação sobem para 1.51 dB/cm para o guia de $0.65 \mu\text{m}$ de largura e para 0.6 dB/cm para o guia de largura $1.00 \mu\text{m}$. Portanto, fica claro que as perdas de propagação do guia de onda com L menor é muito mais susceptível à variação da rugosidade nas paredes verticais do guia, principalmente devido à maior interação da onda evanescente com a rugosidade. Esse fato nos fez considerar o guia de onda com largura $1.00 \mu\text{m}$ adequado para compor o sensor, uma vez que as perdas de propagação se mostram menos susceptíveis à presença da rugosidade e trata-se de uma largura de fácil fabricação em diversos equipamentos de litografia.

Com relação aos modos permitidos no guia de onda em função da largura, a Fig. 23 traz todos os modos encontrados em função da largura do guia de onda. Esses modos foram calculados com o módulo BeamPROP do RSoft, utilizando uma malha de 20 nm em todas as direções. Esses resultados mostram que o guia é monomodo até a largura de $0.30 \mu\text{m}$, tanto para TE quanto para TM, uma vez que a acima dessa largura é possível observar mais de dois modos. Na Fig. 23(a), o retângulo vermelho limita os modos TE e TM que são suportados para o guia de onda com largura de $1 \mu\text{m}$, selecionado previamente devido à sua baixa perda de propagação e ótima dimensão

para fabricação. Para essa largura de guia, observar-se a existência de quatro modos operando em polarização TE, sendo um modo fundamental (Fig. 23(b)) e o restante de ordem superior (Fig. 23(c), (d) e (e)). Já para a polarização TM foram encontrados três modos, sendo um modo fundamental ((Fig. 23(f)) e o restante de ordem superior (23(g) e (h)). É importante notar que a altura de 300 nm empregada já é suficientemente grande para permitir o segundo modo na direção vertical, representados nas figuras 23(e) e 23(f).

Figura 23 – (a) Simulação dos índices efetivos dos modos TE em e TM em função da largura do guia de onda, mantendo a altura fixa em 300 nm. Perfis dos modos (b) TE₀₀, (c) TE₁₀, (d) TE₂₀, (e) TE₀₁, (f) TM₀₀, (g) TM₁₀ e (h) TM₀₁.



Fonte: O autor.

Portanto, como resultado desse estudo sobre o design do guia de onda, utilizaremos a partir de agora um guia de onda com $L = 1.00 \mu\text{m}$, uma vez que o valor da sua perda de propagação se mantém constante nessa região ($\approx 0.5 \text{ dB/cm}$), mesmo o guia de onda sendo multimodo, como mostrado na Fig. 22(a), e ainda possui reduzido impacto da rugosidade nas perdas de propagação, comparado com guias de larguras menores. Por fim, é importante destacar que há possibilidade de utilizar larguras maiores para o guia de onda, a fim de reduzir ainda mais as perdas de propagação, porém, um aumento na largura do guia deverá implicar em um comprimento maior para realizar o estrangulamento do mesmo guia com baixa perda, o que poderá resultar em um aumento na área exigida para o chip.

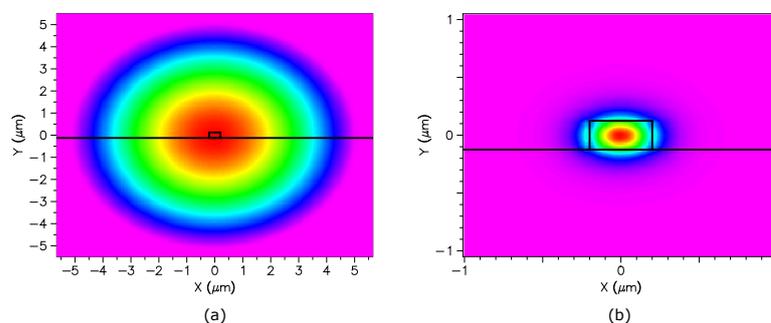
3.2 Acoplador e Simulação Numérica

As fibras ópticas são normalmente usadas para acoplar a luz para dentro e coletá-la para fora dos dispositivos fotônicos integrados. No entanto, os modos suportados em fibras ópticas têm um diâmetro do campo modal (MFD, *Modal Field*

Diamentier) drasticamente maior do que aqueles em guias de onda, como mostra a Fig. 24.

Essa incompatibilidade dos modos é responsável por grandes perdas de acoplamento entre a fibra óptica e o guia de onda. Para reduzir essa perda indesejável, uma das soluções é utilizar acopladores. Nesse sentido, várias técnicas de acoplamento foram propostas, como acopladores baseados em grades de difração (LAWRENCE et al., 1996), prisma (GWON; LEE, 2010), índice graduado (DELAGE et al., 2004; GILSDORF; PALAIS, 1994) e *nanotapers* invertidos (ALMEIDA; PANEPUCCI; LIPSON, 2003; FU et al., 2014). O primeiro método sofre com alto custo de fabricação e largura de banda baixa, ou seja, os mesmos problemas enfrentados pelos acopladores prisma. Os acopladores com índice graduado possuem ampla largura de banda, porém sua eficiência de acoplamento não atinge os padrões exigidos em circuitos fotônicos integrados. Por fim, a última técnica se destaca pela sua boa eficiência no acoplamento, ampla largura de banda e simplicidade estrutural do guia de onda. Logo, nessa dissertação, será analisada a técnica de acoplamento usando *nanotapers* invertidos.

Figura 24 – Perfil dos modos ópticos para (a) fibra monomodo com MFD = 10 μm e (b) guia de onda de nitreto de silício de $250 \times 400 \text{ nm}$, operando no modo TE com um comprimento de onda de 632 nm.



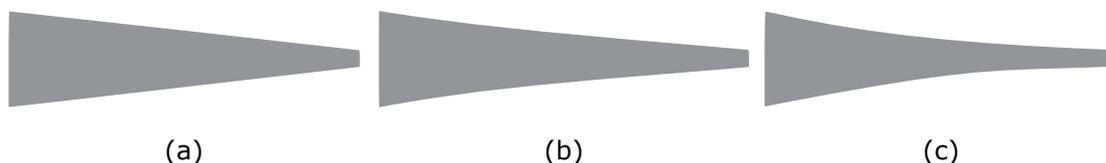
Fonte: O autor.

A Fig. 26 mostra o design do acoplador *nanotaper* invertido de nitreto de silício que consiste em um guia de onda lateralmente afunilado com dimensões nanométricas, onde será posicionada a fonte de luz (fibra). Este afunilamento causa um aumento na dimensão do modo óptico que propaga no guia, permitindo que seu tamanho se aproxime da dimensão do modo da fibra. Dessa forma, com os modos possuindo as mesmas dimensões, a perda de acoplamento é reduzida drasticamente. Nesse sentido, para o presente estudo, será realizado, nessa seção, o design de um acoplador óptico afunilado, semelhante ao ilustrado na Fig. 26, otimizado para faixa de comprimento de onda visível, ou seja, ao redor de 632 nm.

O afunilamento do acoplador deve partir da largura do guia de onda, planejado para o guia de onda do sensor ($W_{wg} = 1.00 \mu\text{m}$), até um largura W_t , mantendo uma altura fixa de $H_{wg} = 300 \text{ nm}$. A maneira com que esse perfil de afunilamento do *nanotaper* se

dará também será alvo de um estudo comparativo, considerando-se afunilamentos do tipo: linear, exponencial e quadrático, conforme mostrado na Fig. 25.

Figura 25 – Perfis de afunilamento. (a) Acoplador linear. (b) Acoplador exponencial. (c) Acoplador quadrático

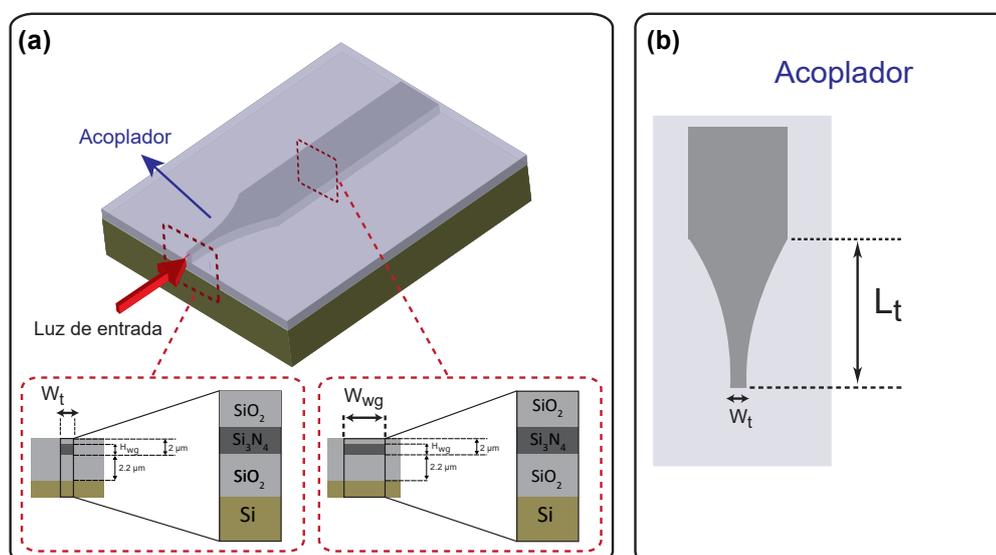


Fonte: O autor.

As simulações dos acopladores foram realizadas para identificar os comprimentos (L_t) e as larguras da extremidade do *nanotaper* (W_t), com melhor desempenho de acoplamento entre o guia de onda de nitreto de silício que deverá compor o sensor e uma fibra óptica.

Todas as simulações foram feitas utilizando o método BPM, operando a $\lambda = 632$ nm. O bombeio foi realizado por meio de uma fibra óptica monomodo, com diâmetro do campo modal de $MFD = 5 \mu\text{m}$, que corresponde ao MFD de uma fibra óptica típica (ALMEIDA; PANEPUCCI; LIPSON, 2003). Os materiais utilizados para o revestimento, BOX, guia de onda e substrato foram SiO_2 ($n_{\text{SiO}_2} = 1.46$), Si_3N_4 ($n_{\text{Si}_3\text{N}_4} = 2.04$) e Si ($n_{\text{Si}} = 3.88$), respectivamente, , como detalhado na Fig. 26(a). As simulações foram realizadas tridimensionalmente, considerando o tamanho da malha $0.02 \mu\text{m}$ em todas as direções x , y e z . A potência acoplada nos guias de onda por meio dos *nanotapers* foram monitoradas por um monitor parcial de potência, ou seja, um monitor capaz de monitorar apenas a potência no interior do guia de onda.

Figura 26 – Esquema do acoplador *nanotaper* invertido de Si_3N_4 . (a) Vista em perspectiva e (b) vista superior.



Fonte: O autor.

3.2.1 Resultados e Discussões

Nesta seção, são analisados os seguintes fatores intrínsecos que afetam o desempenho dos *nanotapers* invertidos: a largura da extremidade, o comprimento de afinamento e os perfis de afinamento.

3.2.1.1 Efeito da largura da extremidade do *nanotaper*

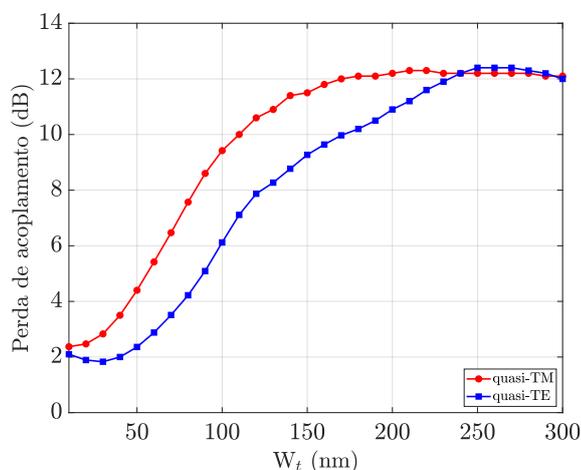
No presente estudo, o comprimento de afinamento foi fixado em $300\ \mu\text{m}$, de modo que a largura da extremidade possa variar entre 10 nm a 300 nm, seguido por um guia de onda integrado de $50\ \mu\text{m}$ de comprimento e $1.00\ \mu\text{m}$ de largura, como mostrado na Fig. 26(b). Os resultados das simulações, mostram a dependência da perda de acoplamento em relação a variação da largura da extremidade do acoplador. Logo, procura-se encontrar uma largura de extremidade ideal para maximizar a correspondência entre o modo da fibra e o modo da extremidade.

- **Acoplador linear**

Analisando a Fig. 27, para a polarização TE, a largura da extremidade do acoplador com maior eficiência no acoplamento foi de $W_t = 30\ \text{nm}$. Com essa largura, o acoplador foi capaz de acoplar 65.5% da potência da fibra, resultando em uma perda de acoplamento de 1.83 dB. Já para a polarização TM, a largura da extremidade do acoplador com maior eficiência no acoplamento foi de $W_t = 10\ \text{nm}$. Com essa largura, o acoplador foi capaz de acoplar 60.3% da potência da fibra, resultando em uma perda de acoplamento de 2.20 dB.

Ainda na Fig. 27, observa-se que há uma diferença entre a eficiência de acoplamento entre os modos TE e TM, que está relacionada com a direção do afinamento. Dessa forma, a perda de acoplamento para o modo TM é maior do que para modo TE, pois o afinamento do acoplador analisado é realizado apenas na direção da largura. Contudo, se modificar a altura, utilizando uma deposição variável ao longo do seu comprimento, seria possível reduzir sua altura e permitir um acoplamento mais eficiente para modo TM. Entretanto, devido a complexidade no processo de fabricação, tal característica não será abordada nessa dissertação.

Figura 27 – Perda de acoplamento em função da variação da largura da extremidade do acoplador linear, para os modos TE e TM.

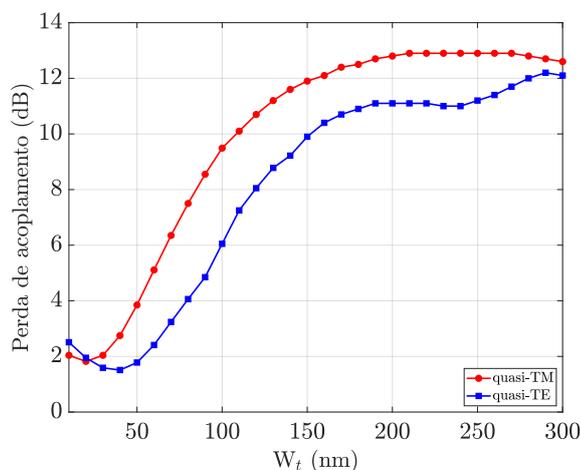


Fonte: O autor.

• Acoplador exponencial

Observando a Fig. 28, para o modo TE, a largura da extremidade do acoplador com maior eficiência no acoplamento foi de $W_t = 40$ nm. Com essa largura, o acoplador foi capaz de acoplar 70.6% da potência da fibra, resultando em uma perda de acoplamento de 1.51 dB. Para o modo TM, a largura da extremidade do acoplador com maior eficiência no acoplamento foi de $W_t = 20$ nm. Com essa largura, o acoplador foi capaz de acoplar 65.8% da potência da fibra, resultando em uma perda de acoplamento de 1.82 dB.

Figura 28 – Perda de acoplamento em função da variação da largura da extremidade do acoplador exponencial, para os modos TE e TM.

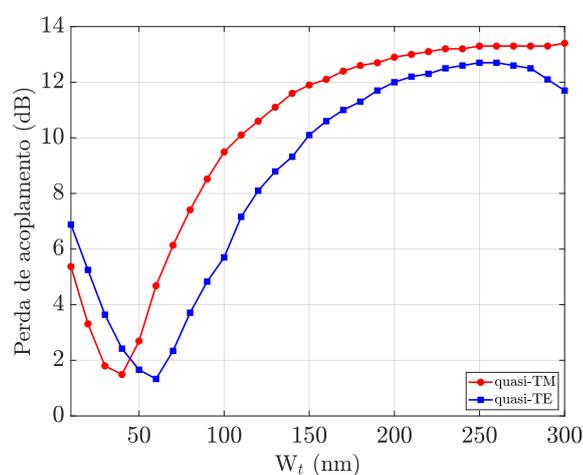


Fonte: O autor.

• Acoplador Quadrático

Observando a Fig. 29, para o modo TE, a largura da extremidade do acoplador com maior eficiência no acoplamento foi de $W_t = 60$ nm. Com essa largura, o acoplador foi capaz de acoplar 76.4% da potência da fibra, resultando em uma perda de acoplamento de 1.17 dB. Para o modo TM, a largura da extremidade do acoplador com maior eficiência no acoplamento foi de $W_t = 40$ nm. Com essa largura, o acoplador foi capaz de acoplar 73.7% da potência da fibra, resultando em uma perda de acoplamento de 1.32 dB.

Figura 29 – Perda de acoplamento em função da variação da largura da extremidade do acoplador quadrático, para os modos TE e TM.



Fonte: O autor.

3.2.1.2 Efeito do comprimento de afunilamento do *nanotaper*

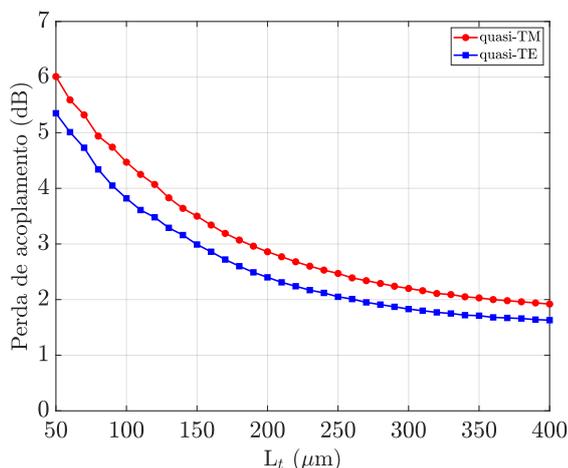
Nesta seção, foi estudado o efeito do comprimento de afunilamento na eficiência do acoplamento. Dessa forma, para o presente estudo, foi considerado os valores otimizado das larguras de extremidades, tanto do modo TE como TM apresentados na Seção 3.2.1.1, para os três diferentes tipos de perfis de afunilamento.

• Acoplador linear

Analisando a Fig. 30, observa-se que o aumento do comprimento de afunilamento promove uma redução drástica na perda de acoplamento até $L_t = 250$ μm para os modos TE e TM. Porém, para valores maiores que estes a perda diminui lentamente. Como já mencionado anteriormente, a razão pela qual as perdas de acoplamento para o modo TM são maiores do que as do modo TE está relacionada com a direção do afunilamento. Para os modos TE e TM o comprimento de afunilamento com maior eficiência de acoplamento foi $L_t = 400$ μm . Para o modo TE garantiu-se uma eficiência no acoplamento de 68.7%, resultando em uma

perda 1.63 dB. Já para o modo TM, foi obtido uma eficiência 64.2%, resultando em uma perda de 1.92 dB.

Figura 30 – Perda de acoplamento em função da variação do comprimento de afunilamento do acoplador linear. Os valores das larguras da extremidade são $W_t = 30$ nm e $W_t = 10$ nm para os modos TE e TM.

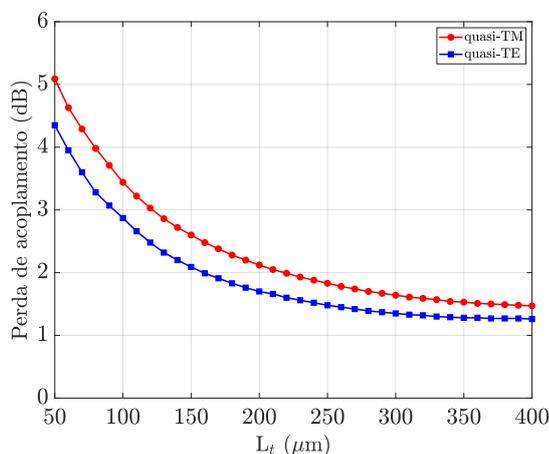


Fonte: O autor.

• Acoplador exponencial

A Figura 31 mostra que a perda de acoplamento diminui rapidamente até $L_t = 200$ μm e atinge uma estabilidade a partir de $L_t = 350$ μm para ambas polarizações. Para os modos TE e TM o comprimento de afunilamento com maior eficiência de acoplamento foi $L_t = 350$ μm . Para o modo TE garantiu uma eficiência no acoplamento de 74.4%, resultando em uma perda 1.28 dB. Já para o modo TM permitiu uma eficiência 70.4%, resultando em uma perda de 1.53 dB.

Figura 31 – Perda de acoplamento em função da variação do comprimento de afunilamento do acoplador exponencial. Os valores das larguras da extremidade são $W_t = 40$ nm e $W_t = 20$ nm para os modos TE e TM.

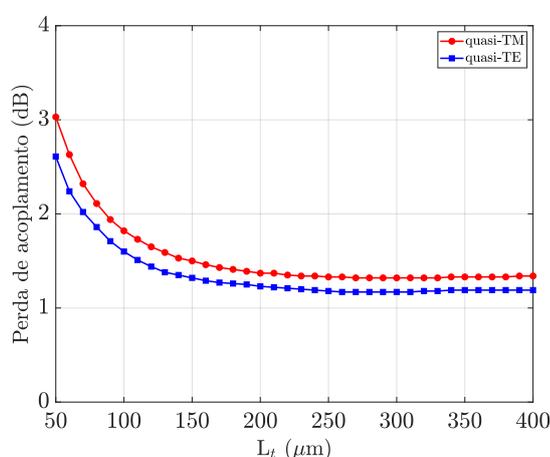


Fonte: O autor.

• Acoplador quadrático

Observando a Figura 32, a perda de acoplamento diminuiu rapidamente até $L_t = 150 \mu\text{m}$ e atinge estabilidade a partir de $L_t = 250 \mu\text{m}$ para os modos TE e TM. Por fim, o comprimento de afunilamento com maior eficiência de acoplamento foi $L_t = 250 \mu\text{m}$. Para o modo TE garantiu uma eficiência no acoplamento de 76.4%, resultando em uma perda 1.17 dB. Já para o modo TM permitiu uma eficiência 73.7%, resultando em uma perda de 1.32 dB.

Figura 32 – Perda de acoplamento em função da variação do comprimento de afunilamento do acoplador quadrático. Os valores das larguras da extremidade são $W_t = 60 \text{ nm}$ e $W_t = 40 \text{ nm}$ para os modos TE e TM.



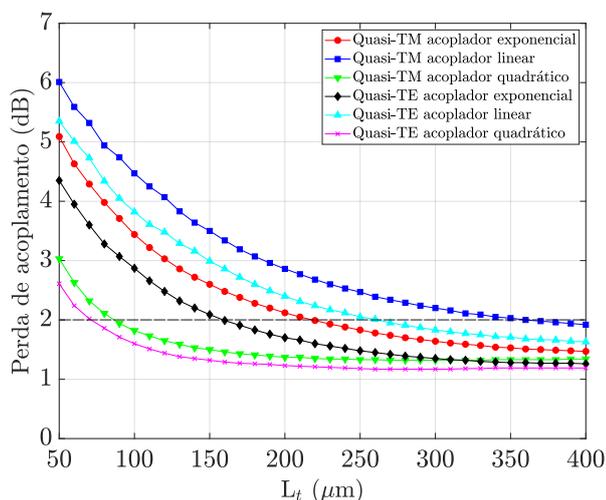
Fonte: O autor.

3.2.1.3 Efeito do perfil de afunilamento

A Fig. 33 faz uma comparação da perda de acoplamento em função da variação do comprimento, para os valores otimizados das largura da extremidade entre os três tipos distintos de perfis de afunilamento. Pode-se observar que as perdas dos acopladores exponencial e quadrático são menores do que a do acoplador linear em qualquer faixa de comprimento de afunilamento, tanto para o modo TE quanto o modo TM. Com intuito de verificar o desempenho dos perfis de afunilamento para uma mesma perda de acoplamento, foi fixado um taxa de perda entre 2 dB representada por uma linha tracejada de cor cinza horizontal, conforme apresentado na Fig. 33. Isso foi feito de tal forma que, para o modo TE, tem-se um comprimento de afunilamento quadrático de $L_t = 70 \mu\text{m}$ e exponencial de $L_t = 160 \mu\text{m}$. Esses valores de comprimento são bem menores quando comparados com o acoplador linear de $L_t = 260 \mu\text{m}$. Isso reforça uma melhoria na redução de tamanho do dispositivo em relação ao acoplador linear. Essa diferença se deve ao fato que a delocalização do campo modal nos acopladores quadrático e exponencial é muito mais rápida do que no acoplador linear, ou seja, os

acopladores exponencial e quadrático conseguem ampliar o campo modal para um tamanho específico em uma distância muito menor do que acoplador linear.

Figura 33 – Perda de acoplamento em função da variação do comprimento de afinamento para os valores otimizados das larguras da extremidade com relação a diferentes perfis de afinamento (linear, exponencial e quadrático).



Fonte: O autor.

A Tabela 1 apresenta os valores das dimensões otimizadas que alcançaram maior eficiência no acoplamento para cada perfil de afinamento (linear, exponencial e quadrático), e suas respectivas perdas de acoplamento simuladas.

Tabela 1 – Dimensões otimizada para acopladores *nanotapers* invertidos de Si_3N_4 para $\lambda = 632$ nm.

Perfil	W_t (nm)	L_t (μm)	Perda (dB)
Linear TE	30	400	1.63
Linear TM	10	400	1.92
Exponencial TE	40	350	1.28
Exponencial TM	20	350	1.53
Quadrático TE	60	250	1.17
Quadrático TM	40	250	1.32

Fonte: O autor.

3.3 Sensor e Simulação Numérica

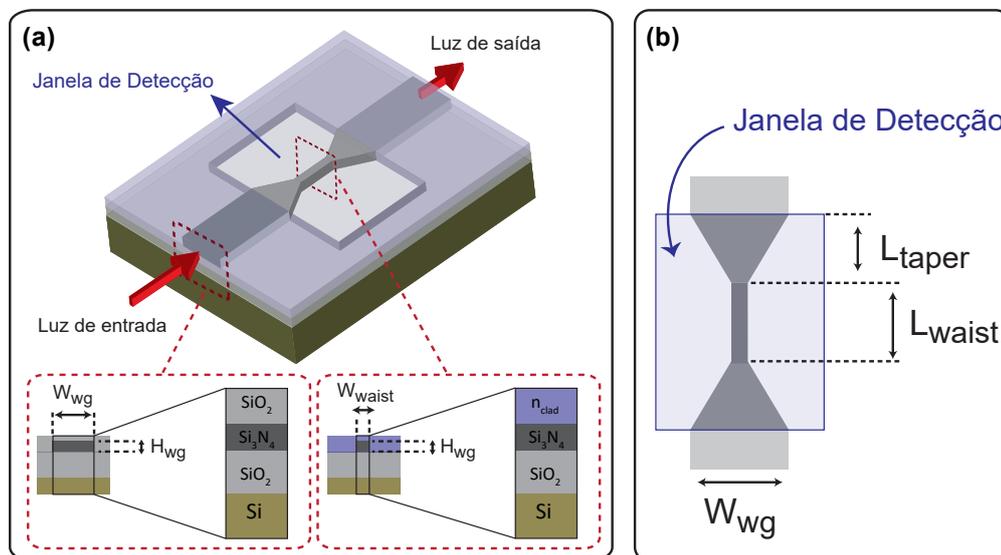
Nesta seção, são apresentados os detalhes do design de um sensor de guia de onda estrangulado para detecção de variação de RI, o seu princípio de operação e os parâmetros usados nas simulações.

A Fig. 34 mostra o esquema do sensor de guia de onda estrangulado proposto. Basicamente, ele consiste em um guia de onda de Si_3N_4 depositado sobre $2.2 \mu\text{m}$ de SiO_2 crescido sobre um substrato de Si e revestido por SiO_2 (Fig. 34(a) - vista em perspectiva). Essas

dimensões são padrão e empregada em diversas *foundries*, como a BioPIX do IMEC, que é uma plataforma fotônica otimizada para aplicações nos comprimentos de onda visível e próximo ao infravermelho. Na janela de detecção mostrada na Fig. 34(a), o revestimento superior de SiO_2 é removido e a largura do guia de onda é reduzida, transformando-o em um guia de onda linear afunilado (REN et al., 2011). A largura do guia de onda é $W_{wg} = 1 \mu\text{m}$ e a largura do guia de onda na região estrangulada é W_{waist} . Com relação a altura do guia, ela é ditada pela etapa de deposição do filme de nitreto de silício e, no presente trabalho, será considerada $H_{wg} = 300 \text{ nm}$ ao longo da direção longitudinal.

Ao projetar o guia de onda afunilado (Fig. 34(b) - vista superior), considerou-se o seu comprimento igual a L_{taper} , enquanto o comprimento do estrangulamento é definido como L_{waist} . Ambos W_{waist} , L_{taper} e L_{waist} são variáveis usadas para otimizar a sensibilidade do sensor. Os materiais usados para o revestimento, BOX, guia de onda e substrato foram SiO_2 , Si_3N_4 e Si , respectivamente. Também é importante destacar que os índices de refração para esses materiais em um comprimento de onda de $\lambda = 632 \text{ nm}$ são $n_{\text{SiO}_2} = 1.46$ (TAN, 1998), $n_{\text{Si}_3\text{N}_4} = 2.04$ (LUKE et al., 2015) e $n_{\text{Si}} = 3.88$ (ASPINES; STUDNA, 1983). Além disso, a região da janela de detecção tem um índice de refração de n_{clad} , que varia de 1.33 a 1.38. Em todo caso, tanto a janela de detecção quanto o substrato foram considerados semi-infinitos nas direções x e y , respectivamente.

Figura 34 – Esquema do sensor de guia de onda estrangulado de Si_3N_4 . (a) Vista em perspectiva e (b) vista superior.



Fonte: O autor (DUARTE et al., 2021).

O princípio básico de operação deste sensor pode ser explicado da seguinte forma: quando a luz de um laser se acopla ao guia de onda de nitreto de silício, como discutido no Capítulo 2, parte dessa luz viaja fora do guia de onda, formando a chamada onda evanescente. O fato dessa onda evanescente viajar na região de fora do guia de onda permite a ela interagir com qualquer solução colocada nesse local. Quando o RI dessa solução sofre variações, a onda evanescente será influenciada por essa variação, permitindo que o guia se torne sensível

à mudança do RI. Essa sensibilidade é resultado da variação de potência (ou intensidade) de luz na saída do guia de onda, à medida que o RI é modificado. De toda forma, para os guias de onda com dimensões maiores do que o comprimento de onda que viaja no guia, a interação da onda evanescente com o meio externo é minimizada, prejudicando a sensibilidade do guia de onda. Para vencer essa dificuldade, nesse presente estudo, a interação entre a onda evanescente e a solução é intensificada pelo uso de um guia de onda afunilado, capaz de aumentar a dimensão da onda evanescente, permitindo maior interação com a solução e aumentando a sensibilidade do sensor. Trata-se da utilização da ideia do acoplador, discutido anteriormente, para incrementar a interação da onda evanescente com o analito.

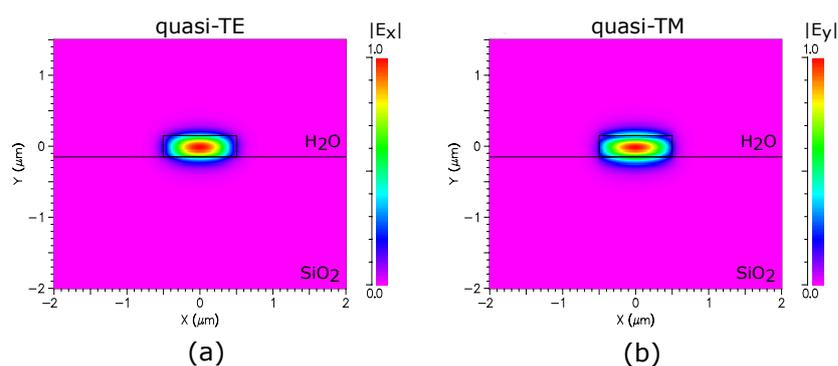
Conforme detalhado na Seção 2.2, o método de propagação de feixe tridimensional (3D-BPM) foi empregado para o cálculo do perfil de campo modal e propagação da potência óptica ao longo do guia de onda. No presente trabalho, o tamanho da malha foi definido em 0.5 nm nas direções x e y e 1.0 nm na direção z . Além disso, em todas as simulações, foi utilizado a condição de contorno transparente (TBC, *transparent boundary condition*) para evitar reflexões nos limites numéricos (HADLEY, 1992).

3.3.1 Resultados e Discussões

Nessa seção os seguintes parâmetros são analisados: o perfil modal, as dimensões do sensor e o impacto da rugosidade nas paredes laterais no guia de onda. Esses parâmetros foram cuidadosamente selecionados, pois estão dentre os principais fatores que afetam a performance do dispositivo em estudo.

Primeiramente, foi realizada uma análise modal para a seção transversal do guia de onda com dimensões $W_{waist} = 1 \mu\text{m}$ e $H_{wg} = 300 \text{ nm}$ para avaliar o grau de confinamento dos modos na estrutura de Si_3N_4 . Os resultados das simulações BPM são apresentados na Fig. 35. A distribuição normalizada do campo elétrico das componentes dominantes $|E_x|$ e $|E_y|$, respectivamente, é mostrada para os modos fundamentais quasi-TE (Fig. 35a) e quasi-TM (Fig. 35b). Na janela de detecção, foi utilizada água destilada ($n_{\text{H}_2\text{O}} = n_{\text{clad}} = 1.33$) como revestimento (DAIMON; MASUMURA, 2007). Nas duas situações, os índices de refração efetivos calculados foram 1.86968 e 1.821468, respectivamente, para quasi-TE e quasi-TM.

Figura 35 – Modos Fundamentais para um guia de onda estrangulado de Si_3N_4 . Polarizações (a) quasi-TE e (b) quasi-TM.



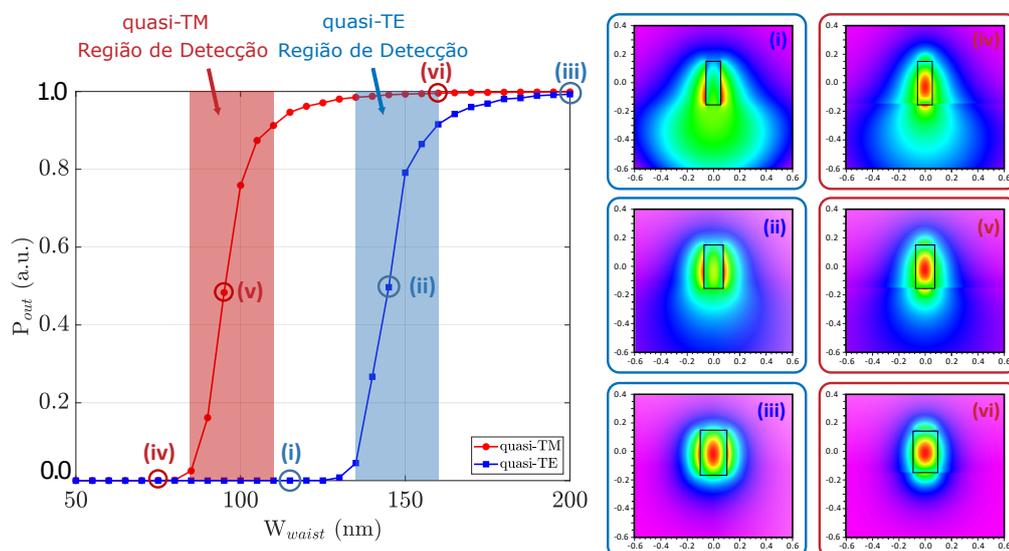
Fonte: O autor (DUARTE et al., 2021).

Os valores de n_{eff} calculados indicam que os modos estão bem confinados na estrutura. Isso acontece porque o n_{eff} é maior que o índice de refração do substrato (n_{SiO_2}) e menor que o índice de refração do guia de onda ($n_{Si_3N_4}$). Dessa forma, os modos com n_{eff} maiores que o do n_{SiO_2} não serão irradiados para o substrato de silício, ou seja, serão guiados.

Na segunda etapa, foi analisado a influência de diferentes larguras de estrangulamento na potência de saída do dispositivo para os modos quasi-TE e quasi-TM. A Fig. 36 mostra o cálculo da potência de saída (P_{out}) normalizada pela potência de entrada, como uma função da largura (W_{waist}) para $L_{waist} = 25 \mu\text{m}$, $L_{taper} = 15 \mu\text{m}$ e $n_{clad} = 1.33$.

Observa-se que os modos quasi-TE e quasi-TM exibem comportamentos diferentes, indicando diferentes interações com a amostra de água ao redor do guia de onda. No caso da polarização quasi-TE, quando a largura de W_{waist} aumenta ($W_{waist} > 160 \text{ nm}$), uma baixa perturbação do modo é observada (ver modo quasi-TE (iii) na Fig. 36), isso reflete em uma alta potência de saída, que por sua vez diminui a sensibilidade do sensor. Isso acontece porque boa parte da potência está confinada na região do guia de onda, enquanto uma pequena porção de campo evanescente interage com a solução. Por outro lado, quando a largura W_{waist} diminui ($135 \text{ nm} \leq W_{waist} \leq 165 \text{ nm}$), o confinamento se torna mais fraco (ver modo quasi-TE (ii) na Fig. 36). Com isso, a potência P_{out} diminui. Porém, maior é a penetração do campo evanescente na solução o que causa um aumento na sensibilidade. Por fim, para o caso da largura $W_{waist} < 135 \text{ nm}$, a potência de saída é aproximadamente zero, ou seja, o estrangulamento se torna tão grande que o modo propagante não é mais guiado, promovendo o vazamento do modo para a camada do substrato (ver modo quasi-TE (i) na Fig. 36).

Figura 36 – Potência normalizada na saída em função da largura de estrangulamento para polarizações quasi-TE e quasi-TM com relação a $n_{clad} = 1.33$, $L_{waist} = 25 \mu\text{m}$ e $L_{taper} = 15 \mu\text{m}$. As regiões de detecção representam o intervalo de W_{waist} , nos quais os modos sofrem maiores perturbações com o meio externo. Os modos (i), (ii), (iii), (iv), (v) e (vi), são para TE W_{waist} 115 nm, 145 nm, 200 nm, e TM W_{waist} 80 nm, 95 nm e 160 nm.

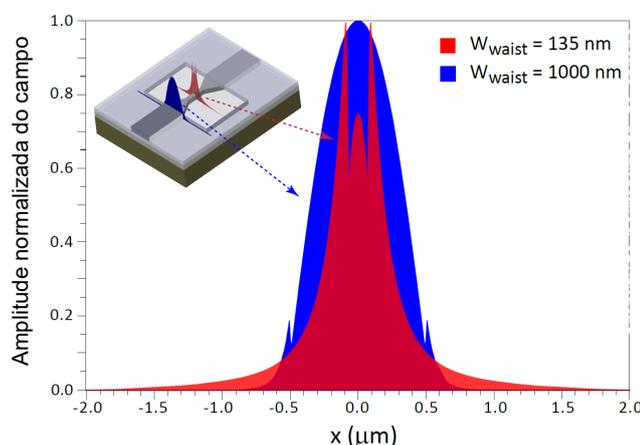


Fonte: O autor (DUARTE et al., 2021).

No caso da polarização quasi-TM, a análise é similar. Entretanto, a diferença entre as curvas para ambas as polarizações (Fig. 36) se deve à diferença na interação do campo evanescente com a amostra de água quando o estrangulamento é reduzido. Essa diferença entre os modos está relacionada com a polarização do modo TE, onde o campo elétrico é paralelo a direção da largura W_{waist} . Enquanto, para polarização do modo TM, exige que o campo elétrico seja paralelo à direção da altura H_{wg} que é fixa, ou seja, a interação da onda evanescente com a amostra pode ser controlada e se tornar maior para polarização quasi-TE, empregando-se W_{waist} adequados. Conseqüentemente, para o modo quasi-TM, é necessário uma redução maior na largura W_{waist} para que modo sofra uma maior perturbação, conforme mostrado na Fig. 36.

A fim de avaliar o quanto o estrangulamento aumenta a sobreposição do campo evanescente do modo propagante com o analito, a Fig. 37 exibe os perfis do campo elétrico dos modos TE para o guia de onda com largura W_{waist} igual a $1\ \mu\text{m}$ (curva azul), que representa guia de onda sem estrangulamento e quando W_{waist} é estrangulado a 135 nm (curva vermelha). A figura em perspectiva apresentada ao lado da Fig. 37 mostra a região onde os modos são analisados (*e.g.*, região estrangulada em vermelho e região não estrangulada em azul). A comparação entre esses dois modos comprova a eficiência do uso do estrangulamento do guia para aumentar a interação entre o campo evanescente e o analito ($n_{clad} = 1.33$), dentro da janela de detecção. Observa-se também que a onda evanescente para o caso estrangulado (curva vermelha) é muito maior em relação ao guia de onda não estrangulado (curva azul), o que garante uma maior sensibilidade ao sensor. No entanto, existem outras maneiras de avaliar eficiência do uso do estrangulamento. Nesse sentido, foi calculado o fator de confinamento utilizando a Equação 2.3 considerando um valor de $W_{waist} = 1\ \mu\text{m}$. O resultado encontrado foi de 95%. Isso mostra que 5% da energia viaja fora do guia de onda. Contudo, quando o guia de onda é estrangulado o valor calculado é de 15%, isso indica que 85% da energia do modo propaga-se fora do guia, comprovando a eficiência do uso do estrangulamento do guia para aumentar a sobreposição da onda evanescente no analito.

Figura 37 – Perfis do campo elétrico para o modo TE propagante no guia de onda, com largura $W_{waist} = 135\ \text{nm}$ que representa o guia de onda estrangulado e quando $W_{waist} = 1\ \mu\text{m}$, que representa o guia sem o estrangulamento.

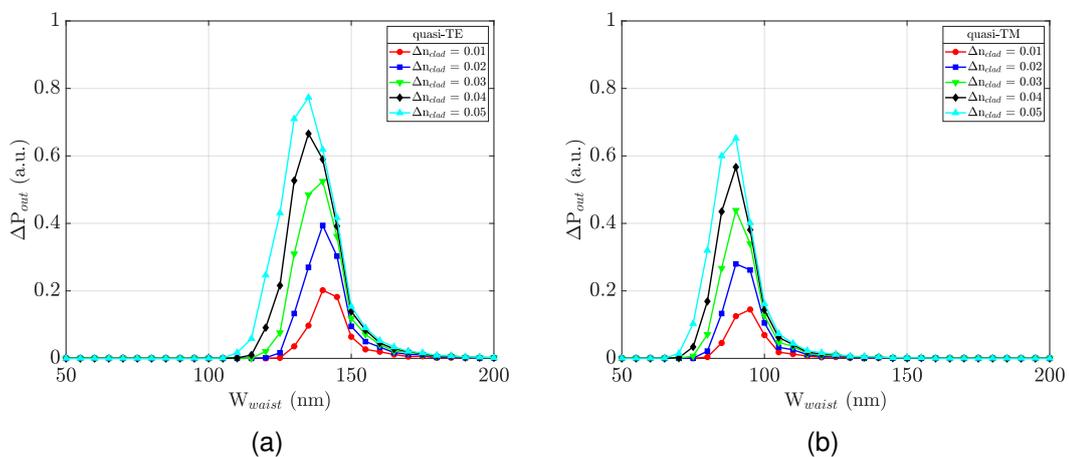


Fonte: O autor (DUARTE et al., 2021).

Na terceira etapa, foi examinada a variação de potência na saída (ΔP_{out}) para diferentes variações de índices de refração de revestimento (Δn_{clad}) e larguras W_{waist} , para as polarizações quasi-TE e quasi-TM, conforme mostrado na Fig. 38.

O objetivo principal dessa análise é identificar os valores otimizados para o W_{waist} a fim de melhorar a sensibilidade do sensor. Para identificar os pontos de W_{waist} com maior variação de potência na saída para os modos TE e TM, foi realizado um somatório de ΔP_{out} ($\Delta P_{out}(\Delta n_{clad} = 0.01) + \dots + \Delta P_{out}(\Delta n_{clad} = 0.05)$) para cada um dos W_{waist} estudados. Os resultados revelam que para às polarizações quasi-TE e quasi-TM, as maiores variações de potência na saída ocorrem nas larguras de $W_{waist} = 135$ nm e $W_{waist} = 90$ nm. Observando a Fig. 38, nota-se que a variação de potência para modo quasi-TE (Fig. 38a) é mais sensível as variações de W_{waist} e n_{clad} em relação ao modo quasi-TM (Fig. 38b), que é um fato esperado, uma vez que a interação entre a onda evanescente e o analito é maior para o modo quasi-TE. Isso pode ser verificado calculando o fator de confinamento para esses valores de W_{waist} otimizados. Para o caso das polarizações TE e TM foram encontrados valores de $\Gamma = 0.15$ e $\Gamma = 0.19$, respectivamente.

Figura 38 – Variação de potência normalizada na saída em função da largura de estrangulamento para diferentes variações do índice de refração do revestimento, com respeito a $L_{waist} = 25 \mu\text{m}$ e $L_{taper} = 15 \mu\text{m}$, para polarizações (a) quasi-TE e (b) quasi-TM.



Fonte: O autor (DUARTE et al., 2021).

Nas próximas duas seções, serão analisados os seguintes critérios de desempenho: sensibilidade (S) e limite de detecção (sLOD), que são fundamentais para comparar o sensor proposto nesse trabalho com outros presentes na literatura.

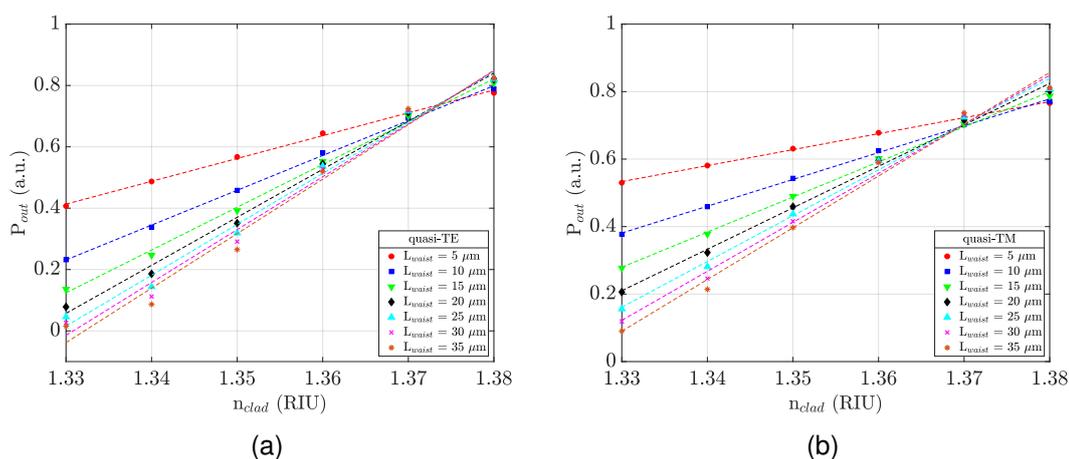
3.3.1.1 Sensibilidade Homogênea

O próximo passo é avaliar a influência de diferentes valores de índices de refração do revestimento (n_{clad}) e comprimentos (L_{waist}) na sensibilidade do dispositivo, para valores de $W_{waist} = 135$ nm para TE e $W_{waist} = 90$ nm para TM. O resultado desse estudo é mostrado na Fig. 39.

A Fig. 39 ilustra que a potência de saída aumenta quase linearmente à medida que RI aumenta para ambas as polarizações. Nesse sentido, a sensibilidade pode ser calculada com base no ângulo de inclinação ajustado por uma função linear. A Tabela 2 mostra os valores calculados de sensibilidade homogênea (ver equação 3.3.1.1) e coeficiente de determinação (R^2) para os resultados demonstrados na Fig. 39.

Pode-se observar na Tabela 2 que a sensibilidade aumenta com o incremento de L_{waist} para as polarizações TM e TE. Porém, a sensibilidade é maior operando no modo quasi-TE devido a maior área de interação do modo evanescente com o analito. A razão desse aumento da sensibilidade do sensor com o aumento do comprimento do estrangulamento está fortemente ligada com maior tempo de interação do modo com a solução. Portanto, uma maior sensibilidade é alcançada utilizando $L_{waist} = 35 \mu\text{m}$ tanto para polarização quasi-TE como para quasi-TM. Entretanto, há uma redução no valor R^2 a medida que a L_{waist} aumenta (ver Tabela 2), indicando uma redução no grau de correlação entre a potência de saída e o RI da solução. No presente trabalho, para garantir que a resposta do sensor seja aproximadamente linear e possibilite a análise com diferentes tipos de sensores, foram considerados apenas valores de $R^2 \geq 0.99$ que representam uma ótima relação linear, sendo estes valores os mais utilizados na literatura por sensores ópticos (LIN et al., 2017; KIM; PARK; LEE, 2019). Com isso, foram adotados os valores de $L_{waist} = 20 \mu\text{m}$ para modo TE e $L_{waist} = 25 \mu\text{m}$ para o modo TM, para otimização do sensor.

Figura 39 – Potência normalizada na saída em função do índice de refração do revestimento para diferentes comprimentos do estrangulamento, com respeito a $L_{taper} = 15 \mu\text{m}$. Os valores de largura de estrangulamento são $W_{waist} = 135 \text{ nm}$ e $W_{waist} = 90 \text{ nm}$ para polarizações quasi-TE (a) e quasi-TM (b).



Fonte: O autor (DUARTE et al., 2021).

Tabela 2 – Valores calculados de sensibilidade e coeficiente de determinação para diferentes comprimentos do estrangulamento (L_{waist}). Os valores das largura de estrangulamento são $W_{waist} = 135$ nm e $W_{waist} = 90$ nm para as polarizações quasi-TE e quasi-TM.

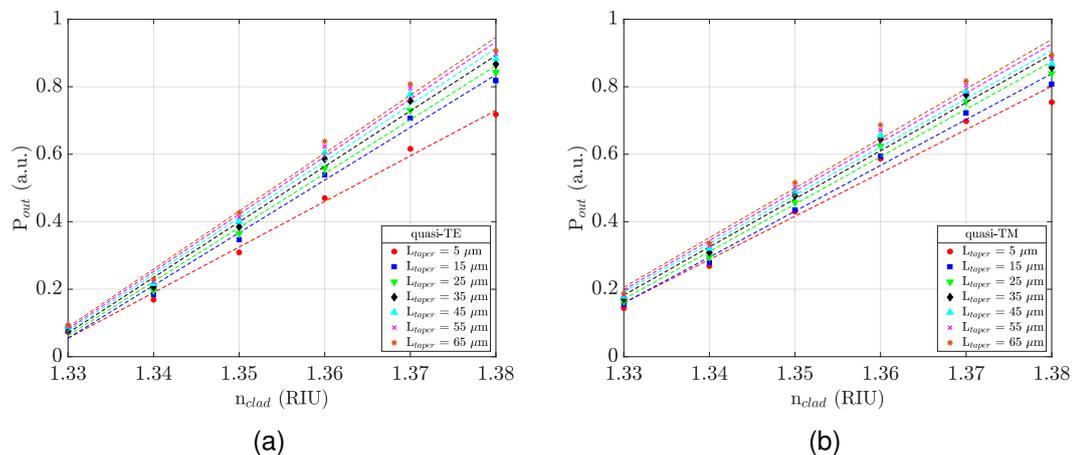
L_{waist} (μm)	quasi-TE		quasi-TM	
	S_{bulk} (%/RIU)	R^2	S_{bulk} (%/RIU)	R^2
5	743.0	0.9989	472.0	0.9989
10	1135	0.9987	794.4	0.9988
15	1395	0.9966	1040	0.9981
20	1565	0.9937	1229	0.9958
25	1658	0.9884	1356	0.9926
30	1722	0.9840	1452	0.9888
35	1775	0.9782	1534	0.9790

Fonte: O autor.

A próxima etapa é averiguar a influência de diferentes comprimentos de afunilamento (L_{taper}) na sensibilidade do dispositivo óptico. Para isso, foram considerado os valores de $W_{waist} = 135$ nm e $L_{waist} = 20$ μm para TE, e $W_{waist} = 90$ nm e $L_{waist} = 25$ μm para TM, conforme mostrado na Fig. 40. Os valores calculados de sensibilidade homogênea e R^2 , referentes aos resultados mostrado na Fig. 40, são detalhados na Tabela 3.

Analisando a Tabela 3 observa-se que o aumento no comprimento de L_{taper} para ambas as polarizações implica em um aumento na sensibilidade do sensor. Dessa forma, foram adotados os valores de $L_{taper} = 55$ μm para modo TE e $L_{taper} = 25$ μm para o modo TM, para otimização do dispositivo, de modo que o sensor apresenta uma maior sensibilidade, mas mantendo $R^2 \geq 0.99$, como exigido.

Figura 40 – Potência normalizada na saída em função do índice de refração do revestimento para diferentes comprimentos de afunilamento. Para os valores de $W_{waist} = 135$ nm e $L_{waist} = 20$ μm para polarização TE (a), e $W_{waist} = 90$ nm e $L_{waist} = 25$ μm para polarização TM (b).



Fonte: O autor (DUARTE et al., 2021).

Tabela 3 – Valores calculados de sensibilidade e coeficiente de determinação para diferentes comprimentos de afunilamento (L_{taper}). Para os valores de $W_{waist} = 135$ nm e $L_{waist} = 20$ μ m para polarização TE, e $W_{waist} = 90$ nm e $L_{waist} = 25$ μ m para polarização TM.

L_{taper} (μ m)	quasi-TE		quasi-TM	
	S_{bulk} (%/RIU)	R^2	S_{bulk} (%/RIU)	R^2
5	1350	0.9950	1285	0.9813
15	1565	0.9937	1356	0.9927
25	1600	0.9935	1407	0.9914
35	1645	0.9931	1426	0.9888
45	1673	0.9925	1432	0.9884
55	1701	0.9916	1457	0.9876
65	1717	0.9852	1468	0.9865

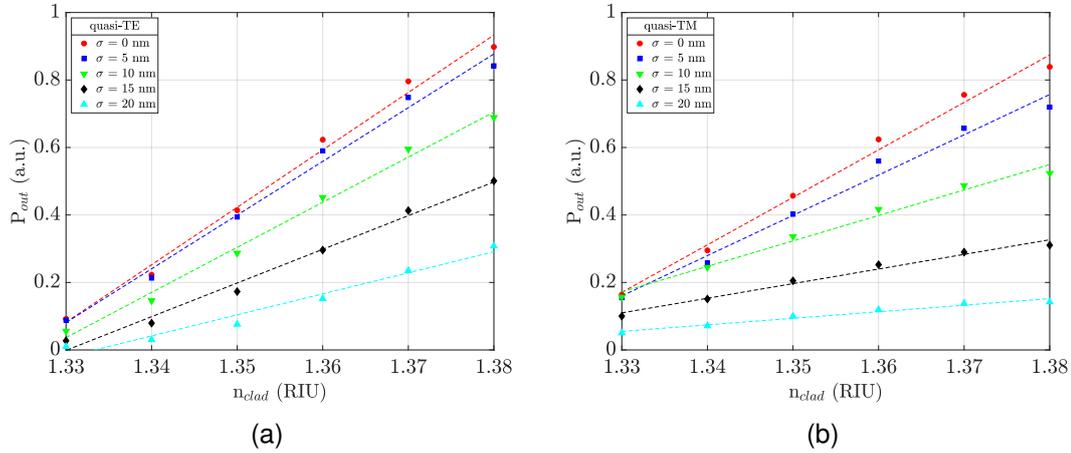
Fonte: O autor.

Além disso, é importante ter em mente que o desempenho de detecção pode ser fortemente impactado por imperfeições causadas durante as etapas de fabricação, como as perdas de propagação causadas pela rugosidade das paredes dos guias de onda. A rugosidade se origina principalmente na etapa de corrosão, que pode transferir imperfeições causadas durante a litografia de feixe de elétron para o guia de onda. Para avaliar o impacto da rugosidade no desempenho do sensor, uma perturbação aleatória na parede lateral do guia de onda é criada para modelar a rugosidade litográfica (DIETRICH MARCUSE, 1991). Informações detalhadas sobre o procedimento de modelagem da rugosidade podem ser encontradas no guia do usuário do pacote computacional *RSoft* (RSOFT PHOTONIC DEVICE TOOLS... , 2020).

As investigações numéricas da rugosidade lateral na resposta do sensor são mostradas na Fig. 41. A faixa de resposta do sensor $n_{clad} = 1.33 - 1.38$ cresce monotonicamente, até $\sigma = 20$ nm. No entanto, as perdas por espalhamento causam reduções na potência de saída, conforme a rugosidade da superfície da parede lateral varia. Essas perdas afetam a sensibilidade do sensor para as polarizações quasi-TE (Fig. 41a) e quasi-TM (Fig. 41b). Como o ângulo de inclinação indica a sensibilidade do sensor, pode-se ver na Fig. 41 que à medida que σ aumenta, esse ângulo fica menor. Consequentemente, isso causa uma diminuição na sensibilidade do sensor, acompanhada por uma redução em R^2 .

Os valores calculados da sensibilidade e R^2 da Fig. 41 são mostrados na tabela 4. Além disso, é importante enfatizar que a fabricação dos guias de onda de Si_3N_4 com rugosidade lateral de $\sigma = 5$ nm é alcançável com base no estudo relatado pelos pesquisadores El Dirani et al. (2019). Nesse trabalho os pesquisadores desenvolveram métodos inovadores de recozimento físico-químico multi-passo e fabricação de encapsulamento, atingindo uma rugosidade lateral de $\sigma \approx 1$ nm.

Figura 41 – Potência normalizada na saída em função do índice de refração de revestimento para diferentes variações da rugosidade da parede lateral. Para os valores de $W_{waist} = 135 \text{ nm}$, $L_{waist} = 20 \text{ }\mu\text{m}$ e $L_{taper} = 55 \text{ }\mu\text{m}$ para polarização TE (a), e $W_{waist} = 90 \text{ nm}$, $L_{waist} = 25 \text{ }\mu\text{m}$ e $L_{taper} = 25 \text{ }\mu\text{m}$ para polarização TM (b).



Fonte: O autor (DUARTE et al., 2021).

Tabela 4 – Valores calculados de sensibilidade e coeficiente de determinação para diferentes variações da rugosidade da parede lateral. Para os valores de $W_{waist} = 135 \text{ nm}$, $L_{waist} = 20 \text{ }\mu\text{m}$ e $L_{taper} = 55 \text{ }\mu\text{m}$ para polarização TE, e $W_{waist} = 90 \text{ nm}$, $L_{waist} = 25 \text{ }\mu\text{m}$ e $L_{taper} = 25 \text{ }\mu\text{m}$ para polarização TM.

σ (nm)	quasi-TE		quasi-TM	
	S_{bulk} (%/RIU)	R^2	S_{bulk} (%/RIU)	R^2
0	1701	0.9916	1407	0.9914
5	1592	0.9911	1192	0.9906
10	1335	0.9907	732.0	0.9897
15	997.0	0.9884	422.0	0.9893
20	623.0	0.9661	194.0	0.9666

Fonte: O autor.

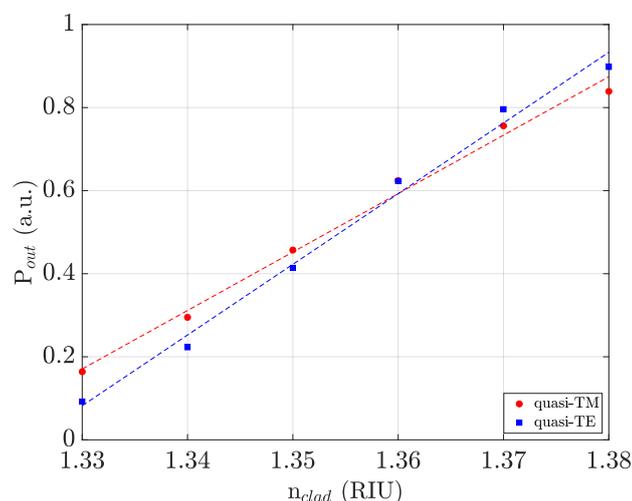
Por fim, a resposta do sensor otimizada nesse trabalho para polarizações quasi-TE e quasi-TM é mostrada na Fig. 42. As dimensões consideradas são $W_{waist} = 135 \text{ nm}$, $L_{waist} = 20 \text{ }\mu\text{m}$ e $L_{taper} = 55 \text{ }\mu\text{m}$ e $W_{waist} = 90 \text{ }\mu\text{m}$, $L_{waist} = 25 \text{ }\mu\text{m}$ e $L_{taper} = 25 \text{ }\mu\text{m}$, respectivamente.

Na Fig. 42, a sensibilidade homogênea operando em quasi-TE é de 1701%/RIU. Utilizando a Equação 2.60 para calcular o sLOD, obteve-se 5.89×10^{-4} RIU. Para a polarização quasi-TM, os valores otimizados de S_{bulk} e sLOD calculados foram 1407%/RIU e 7.11×10^{-4} , respectivamente. Para fins de comparação, a Tabela 5 mostra o resumo do desempenho de detecção de RI dos sensores ópticos Si_3N_4 baseados em monitoramento de intensidade relatados na literatura.

Nota-se que o dispositivo de detecção de RI analisado neste trabalho exibe uma estrutura simples para detecção, melhor sensibilidade e limite de detecção, além de uma maior faixa linear de operação, em comparação com os sensores de outros autores. Além disso, considerando a mesma faixa de RI do trabalho de Shakoore et al. (2017), o sensor proposto

apresenta um S_{bulk} para o modo TE de 1807%/RIU, o que representa um incremento de 6,3% na sensibilidade, mas com uma reduzida área necessária no *chip*.

Figura 42 – Resposta do sensor de guia de onda estrangulado de Si_3N_4 otimizada. Para os valores de $W_{waist} = 135$ nm, $L_{waist} = 20$ μm e $L_{taper} = 55$ μm para polarização TE, e $W_{waist} = 90$ nm, $L_{waist} = 25$ μm e $L_{taper} = 25$ μm para polarização TM.



Fonte: O autor (DUARTE et al., 2021).

Tabela 5 – Resumo do desempenho de detecção homogênea dos sensores de Si_3N_4 baseados em intensidade. EXP/SIM indica que são resultados experimentais ou de simulação.

Configurações	S_{bulk} (%/RIU)	sLOD (RIU)	Faixa de RI	EXP/SIM	R
SWG (TAKASHIMA; HARAGUCHI; NAOI, 2018)	1240/1232	8.06×10^{-4}	1.3425-1.3450	EXP/SIM	1 %
SWG (TAKASHIMA; KUSABA et al., 2019)	1306	7.65×10^{-4}	1.333-1.341	EXP	1%
1D-Grating (SHAKOOR et al., 2017)	1700	5.88×10^{-4}	1.33-1.36	EXP	1%
Presente trabalho	1701	5.88×10^{-4}	1.33-1.38	SIM	1%

Fonte: O autor.

3.3.1.2 Sensibilidade de Superfície

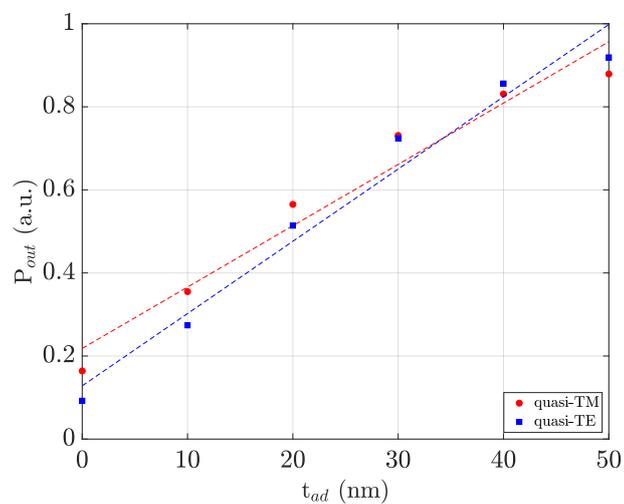
Para demonstrar a capacidade de biosensoriamento do sensor proposto, considera-se uma camada de proteína (estreptavidina) de espessura t_{ad} de índice de refração $n_{surf} = 1.45$ (WEISSER et al., 1999) adsorvido na superfície do guia de onda em uma solução aquosa ($n_{clad} = 1.33$). A estreptavidina é uma proteína com peso molecular de 52.8 kDa, densidade de superfície de uma monocamada de proteína de 2.33 ng/mm^2 e tem aproximadamente 5 nm de diâmetro (WEISENHORN et al., 1992; SWANN et al., 2003). Normalmente, ela é utilizada para criar uma camada de bioafinidade no guia de onda para funcionalizar o sensor para exames de sangue e fenotipagem sorológica.

A Fig. 43 ilustra a resposta do biossensor óptico para as polarizações quasi-TE e quasi-TM na presença da camada proteica. Para ambas as polarizações, um comportamento monotônico da potência de saída é observado quando a espessura da camada é aumentada. A sensibilidade de superfície calculada empregando uma aproximação linear para polarização quasi-TE é 1.74 \%/nm , o coeficiente de determinação é 0.97 e a menor espessura detectável da camada de proteína é 0.57 nm. Assumindo-se que a densidade da superfície é proporcional ao diâmetro da proteína e a camada de espessura detectável é de 0.57 nm, o valor sLOD calculado é de 0.265 ng/mm^2 . Os valores calculados de S_{surf} , R^2 e sLOD para a polarização quasi-TM são 1.48 \%/nm , 0.95 e 0.315 ng/mm^2 , respectivamente.

A Tabela 6 compara o desempenho do sensor de guia de onda estrangulado com outros tipos de biossensores da literatura. Nota-se que o sLOD do dispositivo óptico neste trabalho pode ser comparado com sensores mais complexos, ficando apenas uma ordem de grandeza menor do que um sensor baseado em MZI para o mesmo comprimento de onda de operação. Embora tanto o dispositivo quanto a resolução do dispositivo de medição sejam levados em consideração ao calcular o sLOD, é difícil comparar o desempenho de diferentes tipos de sensores usando esta métrica. Como foi visto na seção 2.1.3.3, pesquisadores que trabalham com sensores ressonantes fazem uma distinção entre os parâmetros sLOD e iLOD. Infelizmente, nenhuma dessas métricas foi proposta para sensores de guia de onda baseado em esquema de detecção por intensidade.

Para finalizar, é importante enfatizar que o sensor estudado nessa dissertação é baseado em um único canal, não sendo necessário a utilização de divisores em forma de Y, como são os casos dos sensores interferômetros de Mach-Zehnder e Young, que aumentam significativamente as dimensões dos dispositivos. Isso possibilita uma integração em grande escala em único *chip*. Além disso, é feita uma análise da intensidade da luz em um único comprimento de onda ao invés de todo o espectro. Isso permite o uso de um sistema de detecção simples, compacto e de baixo custo sem a necessidade de um espectrômetro ou detector sincronizado com um laser sintonizável, sendo um dos trunfos desse projeto.

Figura 43 – Resposta do biossensor de guia de onda estrangulado de Si_3N_4 . Para os valores de $W_{waist} = 135 \text{ nm}$, $L_{waist} = 20 \text{ }\mu\text{m}$ e $L_{taper} = 55 \text{ }\mu\text{m}$ para polarização TE, e $W_{waist} = 90 \text{ nm}$, $L_{waist} = 25 \text{ }\mu\text{m}$ e $L_{taper} = 25 \text{ }\mu\text{m}$ para polarização TM.



Fonte: O autor (DUARTE et al., 2021).

Tabela 6 – Resumo do desempenho de biossensores de Si_3N_4 .

Configurações	sLOD (ng/mm ²)	λ (nm)	EXP/SIM
MZI (LIU, Q. et al., 2013)	0.0022	1550	EXP
MZI (WEISSER et al., 1999)	0.02	632.8	EXP
Presente trabalho	0.265	632	SIM

Fonte: O autor.

CAPÍTULO 4

CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS

Na presente dissertação, foi apresentado um estudo teórico dos guias de ondas que possibilitou a compreensão, análise e otimização dos sensores ópticos integrados. Dentre esses sensores, observou-se que o seu princípio de detecção é baseado em onda evanescente no qual possibilita o desenvolvimento de guias de onda com uso de diferentes configurações de geometrias como estratégia para melhorar o desempenho de detecção. Nesse sentido, foi proposto um sensor de guia de onda estrangulado de Si_3N_4 estruturalmente simples e compacto quando comparado a outros sensores ópticos da literatura como interferômetros, cavidades ressonantes e de ressonância de plasmon de superfície. Além disso, para evitar a utilização de dispositivos complexos de caracterização, optou-se pelo uso de um sistema de detecção simples que analisa a intensidade em um único comprimento de onda ao invés de todo espectro. Isso permite o uso de um sistema de caracterização compacto e de baixo custo sem a necessidade de um espectrômetro ou detector sincronizado com um laser sintonizável. Finalmente, para garantir baixas perdas de acoplamento, foi realizado o dimensionamento dos acopladores de *nanotapers* responsáveis pelo acoplamento da luz de uma fibra ótica para o sensor e vice-versa, garantindo uma boa correspondência modal entre fibra e guia.

Os estudos do sensor e dos acopladores foram realizados empregando uma análise computacional com software comercial, capaz de otimizar e avaliar com eficiência o desempenho do sensor e dos acopladores. O sensor baseado em estrangulamento foi o alvo principal do trabalho, resultado de uma ideia do nosso grupo de pesquisa em empregar o conceito de expansão do modo por meio de estrangulamento, presente nos acopladores do tipo *nanotapers*, para aumentar a interação onda evanescente-análito em sensores de RI baseados em guias de onda.

Durante a análise dos acopladores que devem integrar a entrada e saída do sensor, foi investigado três tipos de perfis de estrangulamento, sendo que o quadrático permitiu uma perda de 1.17 dB, ou seja, 28% menor do que o linear que representa a menor eficiência de acoplamento entre os perfis de afunilamento. Além disso, o acoplador quadrático possibilitou um ganho relevante em termos de redução física dentro de um chip, garantindo uma redução de 37.5% do comprimento de afunilamento do acoplador quadrático em relação ao acoplador linear.

Em relação ao sensor de guia de onda estrangulado proposto neste trabalho, demonstrou-se que seu design permitiu uma maior interação do campo evanescente com a solução, principalmente para polarização quasi-TE. Conseqüentemente, isso traduziu-se em uma melhora

significativa na sensibilidade em comparação com outros sensores propostos na literatura. A máxima sensibilidade homogênea e de superfície calculadas foram 1701 %/RIU e 1.74 %/nm. Os valores de R^2 calculados para cada uma dessas sensibilidades foram 0.99 e 0.97, respectivamente, demonstrando uma boa aproximação linear da resposta do sensor. Os resultados das simulações numéricas sugerem que a sensibilidade do sensor pode ser consideravelmente melhorada otimizando a largura do estrangulamento, comprimento do estrangulamento, comprimento de afunilamento e reduzindo as imperfeições durante o processo de fabricação do guia de onda para alto desempenho de detecção. Com o sistema de detecção compacto e um sensor de alta sensibilidade, acredita-se que o sensor de guia de onda estrangulado de Si_3N_4 é um candidato promissor para detecção em tempo real e análise bioquímica.

Como sugestão para trabalhos futuros sugerimos a fabricação e caracterização do sensor de guia de onda estrangulado de Si_3N_4 , comparando os resultados experimentais obtidos na caracterização com as previstas pelas simulações numéricas presentes neste trabalho. Também é de grande interesse o desenvolvimento de sensores com bom desempenho de detecção, estrutura simples e de baixo custo de fabricação utilizando o material SU-8. Ressaltamos que o design desse dispositivo, também baseado em um guia de onda estrangulado, já foi iniciado e deverá ser implementado pelo grupo de pesquisa em breve. Como a diferença de RI do SU-8 para o SiO_2 é menor do que a entre Si_3N_4 e SiO_2 , esse sensor tem potencial para despontar como um dispositivo de alta sensibilidade mas com dimensões de estrangulamentos maiores, garantindo ainda mais uma menor complexidade nos métodos de fabricação.

REFERÊNCIAS

- ALMEIDA, Vilson R.; PANEPUCCI, Roberto R.; LIPSON, Michal. Nanotaper for compact mode conversion. **Optics Letters**, v. 28, n. 15, p. 1302, 2003. ISSN 0146-9592. DOI: 10.1364/ol.28.001302. Citado 2 vezes nas páginas 72, 73.
- ANDREAS OTTO. Excitation of Nonradiative Surface Plasma Waves in Silver by the Method of Frustrated Total Reflection. **Zeitschrift für Physik**, v. 216, p. 398–410, 1968. Citado 1 vez na página 61.
- ARLETT, J. L.; MYERS, E. B.; ROUKES, M. L. Comparative advantages of mechanical biosensors. **Nature Nanotechnology**, v. 6, n. 4, p. 203–215, 2011. ISSN 17483395. DOI: 10.1038/nnano.2011.44. Citado 1 vez na página 26.
- ARMANI, Andrea M.; VAHALA, Kerry J. Heavy water detection using ultra-high-Q microcavities. **Optics Letters**, v. 31, n. 12, p. 1896, 2006. ISSN 0146-9592. DOI: 10.1364/ol.31.001896. Citado 1 vez na página 61.
- ASPINES, D. E.; STUDNA, A. A. Dielectric functions and optical parameters of Si, Ge, GaP, GaAs, GaSb, InP, InAs, and InSb from 1.5 to 6.0 eV. **Physical Review B**, v. 27, n. 2, p. 985–1009, 1983. ISSN 01631829. DOI: 10.1103/PhysRevB.27.985. Citado 2 vezes nas páginas 69, 80.
- BARRIOS, Carlos A. et al. Slot-waveguide biochemical sensor. **Optics Letters**, v. 32, n. 21, p. 3080, 2007. ISSN 0146-9592. DOI: 10.1364/ol.32.003080. Citado 1 vez na página 54.
- BARRIOS, Carlos Angulo. Optical slot-waveguide based biochemical sensors. **Sensors (Switzerland)**, v. 9, n. 6, p. 4751–4765, 2009. ISSN 14248220. DOI: 10.3390/s90604751. Citado 1 vez na página 54.
- BASSI, Paolo et al. Finite difference mode solver for active optical waveguides. **Rare-Earth-Doped Devices II**, v. 3280, p. 75, 1998. ISSN 0277786X. DOI: 10.1117/12.305392. Citado 2 vezes nas páginas 46, 63.
- BÉLAND, Paul; KRUPIN, Oleksiy; BERINI, Pierre. Selective detection of bacteria in urine with a long-range surface plasmon waveguide biosensor. **Biomedical Optics Express**, v. 6, n. 8, p. 2908, 2015. ISSN 2156-7085. DOI: 10.1364/boe.6.002908. Citado 1 vez na página 62.

- BHALLA, Nikhil et al. Introduction to biosensors. Edição: Pedro Estrela. **Essays in Biochemistry**, v. 60, n. 1, p. 1–8, jun. 2016. ISSN 00711365. DOI: 10.1042/EBC20150001. Disponível em: <<https://portlandpress.com/essaysbiochem/article/60/1/1/78203/Introduction-to-biosensors>>. Citado 1 vez nas páginas 31, 32.
- BORN, Max; WOLF, Emil; HECHT, Eugene. **Principles of Optics: Electromagnetic Theory of Propagation, Interference and Diffraction of Light**. [S.l.: s.n.], 2000. v. 53, p. 77–78. DOI: 10.1063/1.1325200. Citado 2 vez na página 36.
- CARLBORG, C. F. et al. A packaged optical slot-waveguide ring resonator sensor array for multiplex label-free assays in labs-on-chips. **Lab on a Chip**, v. 10, n. 3, p. 281–290, 2010. ISSN 14730189. DOI: 10.1039/b914183a. Citado 3 vezes nas páginas 53, 54, 61.
- CHAO, Chung Yen; GUO, L. Jay. Design and optimization of microring resonators in biochemical sensing applications. **Journal of Lightwave Technology**, v. 24, n. 3, p. 1395–1402, 2006. ISSN 07338724. DOI: 10.1109/JLT.2005.863333. Citado 2 vezes nas páginas 50, 61.
- CHENG, Yu Chieh et al. A plasmonic refractive index sensor with an ultrabroad dynamic sensing range. **Scientific Reports**, v. 9, n. 1, 2019. ISSN 20452322. DOI: 10.1038/s41598-019-41353-4. Citado 1 vez na página 25.
- CHIANG, K. S. Dual effective-index method for the analysis of rectangular dielectric waveguides. **Applied Optics**, v. 25, n. 13, p. 2169, 1986. ISSN 0003-6935. DOI: 10.1364/ao.25.002169. Citado 1 vez na página 46.
- CHRISTENSEN, Douglas; FOWERS, David. Modeling SPR sensors with the finite-difference time-domain method. **Biosensors and Bioelectronics**, v. 11, n. 6-7, p. 677–684, 1996. ISSN 09565663. DOI: 10.1016/0956-5663(96)83301-X. Citado 1 vez na página 63.
- CHROSTOWSKI, Lukas et al. Silicon photonic resonator sensors and devices. **Laser Resonators, Microresonators, and Beam Control XIV**, v. 8236, p. 823620, 2012. ISSN 0277-786X. DOI: 10.1117/12.916860. Citado 1 vez na página 60.
- CHUNG, Youngchul; DAGLI, Nadir. An Assessment of Finite Difference Beam Propagation Method. **IEEE Journal of Quantum Electronics**, v. 26, n. 8, p. 1335–1339, 1990. ISSN 15581713. DOI: 10.1109/3.59679. Citado 1 vez na página 63.
- CIMINELLI, C. et al. High performance SOI microring resonator for biochemical sensing. **Optics and Laser Technology**, v. 59, p. 60–67, 2014. ISSN 00303992. DOI: 10.1016/j.optlastec.2013.12.011. Citado 1 vez na página 61.

COMMUNITY, THE GLOBAL DIABETES. **Blood Sugar Level Ranges**. [S.l.: s.n.], 2019. Disponível em:

<https://www.diabetes.co.uk/diabetes%7B%5C_%7Dcare/blood-sugar-level-ranges.html>. Acesso em: 13 out. 2020. Citado 1 vez na página 26.

CRESPI, Andrea et al. Three-dimensional Mach-Zehnder interferometer in a microfluidic chip for spatially-resolved label-free detection. **Lab on a Chip**, v. 10, n. 9, p. 1167–1173, 2010. ISSN 14730189. DOI: 10.1039/b920062b. Citado 1 vez na página 58.

DAIMON, Masahiko; MASUMURA, Akira. Measurement of the refractive index of distilled water from the near-infrared region to the ultraviolet region. **Applied Optics**, v. 46, n. 18, p. 3811–3820, 2007. ISSN 15394522. DOI: 10.1364/AO.46.003811. Citado 1 vez na página 81.

DELAGE, Andre et al. Graded-index coupler for microphotonic SOI waveguides. **Photonics North 2004: Optical Components and Devices**, v. 5577, p. 204, 2004. ISSN 0277786X. DOI: 10.1117/12.567264. Citado 1 vez na página 72.

DEMCHENKO, Alexander P. **Introduction to Fluorescence Sensing**. [S.l.: s.n.], 2015. DOI: 10.1007/978-3-319-20780-3. Citado 1 vez na página 28.

DENSMORE, A. et al. Silicon photonic wire biosensor array for multiplexed real-time and label-free molecular detection. **Optics Letters**, v. 34, n. 23, p. 3598, 2009. ISSN 0146-9592. DOI: 10.1364/ol.34.003598. Citado 1 vez na página 58.

DENSMORE, Adam et al. A silicon-on-insulator photonic wire based evanescent field sensor. **IEEE Photonics Technology Letters**, v. 18, n. 23, p. 2520–2522, 2006. ISSN 10411135. DOI: 10.1109/LPT.2006.887374. Citado 1 vez na página 55.

DIETRICH MARCUSE. **Quantum Electronics—Principles and Applications**. [S.l.: s.n.], 1991. P. ii. DOI: 10.1016/b978-0-12-470951-5.50001-9. Citado 2 vezes nas páginas 70, 87.

DOSTÁLEK, J. et al. Surface plasmon resonance biosensor based on integrated optical waveguide. **Sensors and Actuators, B: Chemical**, v. 76, n. 1-3, p. 8–12, 2001. ISSN 09254005. DOI: 10.1016/S0925-4005(01)00559-7. Citado 1 vez na página 61.

DUARTE, L.E.R. et al. Sensitivity improvement in Si₃N₄ tapered waveguides for compact refractive index sensors. **Optics Communications**, 2021. DOI: 10.1016/j.optcom.2021.127265. Citado 0 vezes nas páginas 80–86, 88, 89, 91.

DUMAIS, Patrick et al. Integrated optical sensor using a liquid-core waveguide in a Mach-Zehnder interferometer. **Optics Express**, v. 16, n. 22, p. 18164, 2008. ISSN 1094-4087. DOI: 10.1364/oe.16.018164. Citado 1 vez na página 58.

DUMON, Pieter. **Ultra-compact integrated optical filters in silicon-on-insulator by means of wafer-scale technology**. 2007. Tese (Doutorado). ISBN

978-90-8578-136-3. Disponível em:

<<http://scholar.google.com/scholar?hl=en%7B%5C%7DbtnG=Search%7B%5C%7Dq=intitle:Ultra-Compact+Integrated+Optical+Filters+in+Silicon-on-insulator+by+Means+of+Wafer-Scale+Technology%7B%5C%7D0>>. Citado 4 vezes nas páginas 49, 50, 68.

EL DIRANI, Houssein et al. Ultralow-loss tightly confining Si 3 N 4 waveguides and high-Q microresonators. **Optics Express**, v. 27, n. 21, p. 30726, 2019. ISSN 1094-4087. DOI: 10.1364/oe.27.030726. Citado 1 vez na página 87.

ESTEVEZ, M. Carmen; ALVAREZ, Mar; LECHUGA, Laura M. Integrated optical devices for lab-on-a-chip biosensing applications. **Laser and Photonics Reviews**, v. 6, n. 4, p. 463–487, 2012. ISSN 18638880. DOI: 10.1002/lpor.201100025. Citado 1 vez na página 26.

FAN, Xudong et al. Sensitive optical biosensors for unlabeled targets: A review. **Analytica Chimica Acta**, v. 620, n. 1-2, p. 8–26, 2008. ISSN 00032670. DOI: 10.1016/j.aca.2008.05.022. Citado 1 vez na página 60.

FARD, Sahba Talebi et al. Performance of ultra-thin SOI-based resonators for sensing applications. **Optics Express**, v. 22, n. 12, p. 14166, 2014. ISSN 1094-4087. DOI: 10.1364/oe.22.014166. Citado 1 vezes nas páginas 55, 56.

FU, Yunfei et al. Efficient adiabatic silicon-on-insulator waveguide taper. **Photonics Research**, v. 2, n. 3, a41, 2014. ISSN 2327-9125. DOI: 10.1364/prj.2.000a41. Citado 1 vez na página 72.

GAVELA, Adrián Fernández et al. Last advances in silicon-based optical biosensors. **Sensors (Switzerland)**, v. 16, n. 3, 2016. ISSN 14248220. DOI: 10.3390/s16030285. Citado 1 vez na página 57.

GILSDORF, Robert W.; PALAIS, Joseph C. Single-mode fiber coupling efficiency with graded-index rod lenses. **Applied Optics**, v. 33, n. 16, p. 3440, 1994. ISSN 0003-6935. DOI: 10.1364/ao.33.003440. Citado 1 vez na página 72.

GIRAULT, Pauline et al. Integrated polymer micro-ring resonators for optical sensing applications. **Journal of Applied Physics**, v. 117, n. 10, 2015. ISSN 10897550. DOI: 10.1063/1.4914308. Citado 1 vez na página 61.

GUASTO, Jeffrey S.; HUANG, Peter; BREUER, Kenneth S. **Evanescent Wave Microscopy**. [S.l.: s.n.], 2008. P. 638–644. DOI: 10.1007/978-0-387-48998-8_513. Citado 1 vez na página 48.

- GWON, Hyuk Rok; LEE, Seong Hyuk. Spectral and angular responses of surface plasmon resonance based on the kretschmann prism configuration. **Materials Transactions**, v. 51, n. 6, p. 1150–1155, 2010. ISSN 13459678. DOI: 10.2320/matertrans.M2010003. Citado 3 vezes nas páginas 61, 62, 72.
- HADLEY, G. Ronald. Wide-angle beam propagation using Padé approximant operators. **Optics Letters**, v. 17, n. 20, p. 1426, 1992. ISSN 0146-9592. DOI: 10.1364/ol.17.001426. Citado 1 vez na página 63.
- HADLEY, G. Ronald. Transparent Boundary Condition for the Beam Propagation Method. **IEEE Journal of Quantum Electronics**, v. 28, n. 1, p. 363–370, 1992. ISSN 15581713. DOI: 10.1109/3.119536. Citado 1 vez na página 81.
- HEIDEMAN, R. G.; KOOYMAN, R. P.H.; GREVE, J. Development of an optical waveguide interferometric immunosensor. **Sensors and Actuators: B. Chemical**, v. 4, n. 3-4, p. 297–299, 1991. ISSN 09254005. DOI: 10.1016/0925-4005(91)80126-5. Citado 1 vez na página 58.
- HILTUNEN, Marianne et al. Polymeric slot waveguide interferometer for sensor applications. **Optics Express**, v. 22, n. 6, p. 7229, 2014. ISSN 1094-4087. DOI: 10.1364/oe.22.007229. Citado 1 vez na página 58.
- HOMOLA, Jiri; YEE, Sinclair S.; GAUGLITZ, Gunter. Surface plasmon resonance sensors: review. **Sensors and Actuators, B: Chemical**, v. 54, n. 1, p. 3–15, 1999. ISSN 09254005. DOI: 10.1016/S0925-4005(98)00321-9. Citado 1 vez na página 26.
- HUANG, W. P.; XU, C. L.; CHAUDHURI, S. K. A Finite-Difference Vector Beam Propagation Method for Three-Dimensional Waveguide Structures. **IEEE Photonics Technology Letters**, v. 4, n. 2, p. 148–151, 1992. ISSN 19410174. DOI: 10.1109/68.122344. Citado 1 vez na página 63.
- IGUCHI, Akito et al. Efficient topology optimization of optical waveguide devices utilizing semi-vectorial finite-difference beam propagation method. **Optics Express**, v. 25, n. 23, p. 28210, 2017. ISSN 1094-4087. DOI: 10.1364/oe.25.028210. Citado 2 vezes na página 63.
- JENKINS, F.A.; WHITE, H.E. **The Double Slit**. [S.l.: s.n.], 1957. P. 311–327. Citado 1 vez na página 58.
- JOHNSON, S. G. et al. Roughness losses and volume-current methods in photonic-crystal waveguides. **Applied Physics B: Lasers and Optics**, v. 81, n. 2-3, p. 283–293, 2005. ISSN 09462171. DOI: 10.1007/s00340-005-1823-4. Citado 1 vez na página 49.
- KAISTI, Matti. Detection principles of biological and chemical FET sensors. **Biosensors and Bioelectronics**, v. 98, p. 437–448, 2017. ISSN 18734235. DOI: 10.1016/j.bios.2017.07.010. Citado 1 vez na página 26.

KANGER, Johannes S. et al. A Fast and Sensitive Integrated Young Interferometer Biosensor, p. 265–295, 2009. DOI: 10.1007/978-0-387-98063-8_10. Citado 1 vez na página 58.

KASAP, Safa. **Optoelectronics & Photonics: Principles & Practices: International Edition**. Edição: Pearson. 2nd editio. [S.l.]: 2013. ISBN 0132151499. Citado 1 vez na página 53.

KAWANO, Kenji; KITO, Tsutomu. **Introduction to Optical Waveguide Analysis**. [S.l.: s.n.], 2001. DOI: 10.1002/0471221600. Citado 1 vez na página 32.

KHIJWANIA, Sunil K.; SRINIVASAN, Kirthi L.; SINGH, Jagdish P. An evanescent-wave optical fiber relative humidity sensor with enhanced sensitivity. **Sensors and Actuators, B: Chemical**, v. 104, n. 2, p. 217–222, 2005. ISSN 09254005. DOI: 10.1016/j.snb.2004.05.012. Citado 1 vez na página 56.

KHODADAD, Iman et al. Optimization of multiple-slot waveguides for biochemical sensing. **Applied Optics**, v. 53, n. 23, p. 5169, 2014. ISSN 1559-128X. DOI: 10.1364/ao.53.005169. Citado 1 vez na página 54.

KIM, Hyeong Min; PARK, Jae Hyung; LEE, Seung Ki. Fabrication and measurement of optical waveguide sensor based on localized surface plasmon resonance. **Micro and Nano Systems Letters**, v. 7, n. 1, 2019. ISSN 22139621. DOI: 10.1186/s40486-019-0086-5. Citado 1 vez na página 85.

KOZMA, Peter et al. Integrated planar optical waveguide interferometer biosensors: A comparative review. **Biosensors and Bioelectronics**, v. 58, p. 287–307, 2014. ISSN 18734235. DOI: 10.1016/j.bios.2014.02.049. Citado 4 vezes nas páginas 52, 53, 57, 58.

KRIOUKOV, E. et al. Sensor based on an integrated optical microcavity. **Optics Letters**, v. 27, n. 7, p. 512, 2002. ISSN 0146-9592. DOI: 10.1364/ol.27.000512. Citado 1 vez na página 61.

LAMBECK, Paul V. Integrated optical sensors for the chemical domain. **Measurement Science and Technology**, v. 17, n. 8, 2006. ISSN 13616501. DOI: 10.1088/0957-0233/17/8/R01. Citado 1 vez na página 52.

LAWRENCE, C. R. et al. Surface plasmon resonance studies of immunoreactions utilizing disposable diffraction gratings. **Biosensors and Bioelectronics**, v. 11, n. 4, p. 389–400, 1996. ISSN 09565663. DOI: 10.1016/0956-5663(96)82734-5. Citado 2 vezes nas páginas 61, 72.

LI JIN et al. The suspended SU-8 waveguide MSM-photodetector for visible light directly based on silicon substrate, p. 1440–1440, 2016. DOI: 10.1109/piers.2016.7734675. Citado 1 vez na página 50.

- LIEDBERG, Bo; NYLANDER, Claes; LUNSTRÖM, Ingemar. Surface plasmon resonance for gas detection and biosensing. **Sensors and Actuators**, v. 4, n. 100, p. 299–304, 1983. ISSN 02506874. DOI: 10.1016/0250-6874(83)85036-7. Citado 1 vez na página 27.
- LIFANTE, Ginés. **Integrated Photonics: Fundamentals**. [S.l.: s.n.], 2005. DOI: 10.1002/0470861401. Citado 3 vezes nas páginas 40, 44, 45.
- LIN, Yu Chung et al. Intensity-detection-based guided-mode-resonance optofluidic biosensing system for rapid, low-cost, label-free detection. **Sensors and Actuators, B: Chemical**, v. 250, p. 659–666, 2017. ISSN 09254005. DOI: 10.1016/j.snb.2017.04.187. Citado 1 vez na página 85.
- LIU, I-Chen et al. Optofluidic refractive-index sensors employing bent waveguide structures for low-cost, rapid chemical and biomedical sensing. **Optics Express**, v. 26, n. 1, p. 273, 2018. ISSN 1094-4087. DOI: 10.1364/oe.26.000273. Citado 4 vezes nas páginas 25, 50, 52, 56, 57.
- LIU, Qing et al. Highly sensitive Mach-Zehnder interferometer biosensor based on silicon nitride slot waveguide. **Sensors and Actuators, B: Chemical**, v. 188, p. 681–688, 2013. ISSN 09254005. DOI: 10.1016/j.snb.2013.07.053. Citado 2 vezes nas páginas 58, 91.
- LUAN, Enxiao et al. Silicon photonic biosensors using label-free detection. **Sensors (Switzerland)**, v. 18, n. 10, 2018. ISSN 14248220. DOI: 10.3390/s18103519. Citado 4 vezes nas páginas 25, 53, 59, 60.
- LUCHANSKY, Matthew S.; BAILEY, Ryan C. Silicon photonic microring resonators for quantitative cytokine detection and T-cell secretion analysis. **Analytical Chemistry**, v. 82, n. 5, p. 1975–1981, 2010. ISSN 00032700. DOI: 10.1021/ac902725q. Citado 1 vez na página 26.
- LUDVIG, Mach. Ueber einen Interferenzrefraktor. **Zeitschrift für Instrumentenkunde.**, v. 12, p. 89–93, 1892. Citado 1 vez na página 57.
- LUKE, Kevin et al. Broadband mid-infrared frequency comb generation in a Si₃N₄ microresonator. **CLEO: Science and Innovations, CLEO-SI 2015**, p. 2267, 2015. DOI: 10.1364/CLEO_SI.2015.STu4I.8. Citado 2 vezes nas páginas 69, 80.
- LUO, Xiliang; DAVIS, Jason J. Electrical biosensors and the label free detection of protein disease biomarkers. **Chemical Society Reviews**, v. 42, n. 13, p. 5944–5962, 2013. ISSN 14604744. DOI: 10.1039/c3cs60077g. Citado 1 vez na página 26.
- MALMQVIST, M. Biospecific interaction analysis using biosensor technology. **Nature**, v. 361, n. 6408, p. 186–187, 1993. ISSN 00280836. DOI: 10.1038/361186a0. Citado 1 vez na página 61.

- MARCATILI, E. A.J. Dielectric Rectangular Waveguide and Directional Coupler for Integrated Optics. **Bell System Technical Journal**, v. 48, n. 7, p. 2071–2102, 1969. ISSN 15387305. DOI: 10.1002/j.1538-7305.1969.tb01166.x. Citado 1 vez na página 46.
- OBAYYA, Salah. Bidirectional Beam Propagation Method. **Computational Photonics**, p. 67–94, 2010. DOI: 10.1002/9780470667064.ch4. Citado 1 vez na página 63.
- OKAMOTO, Katsunari. **Fundamentals of Optical Waveguides**. [S.l.: s.n.], 2006. ISBN 9780125250962. DOI: 10.1016/B978-0-12-525096-2.X5000-4. Citado 8 vezes nas páginas 32, 39–41, 43, 44.
- PAN, Chao; RAHMAN, B. M.A. High-Sensitivity Polarization-Independent Biochemical Sensor Based on Silicon-on-Insulator Cross-Slot Waveguide. **IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics**, v. 23, n. 2, p. 64–71, 2017. ISSN 15584542. DOI: 10.1109/JSTQE.2016.2594094. Citado 1 vez na página 54.
- PASSARO, Vittorio M.N. et al. Recent advances in integrated photonic sensors. **Sensors (Switzerland)**, v. 12, n. 11, p. 15558–15598, 2012. ISSN 14248220. DOI: 10.3390/s121115558. Citado 1 vez na página 25.
- PLANITZ, Max et al. Numerical Recipes: The Art of Scientific Computing. **The Mathematical Gazette**, v. 71, n. 457, p. 245, out. 1987. ISSN 00255572. DOI: 10.2307/3616786. Disponível em:
<<http://link.springer.com/10.1007/BF01321860>>
<http://aapt.scitation.org/doi/10.1119/1.14981>
<http://www.jstor.org/stable/3616786?origin=crossref>>. Citado 1 vez na página 63.
- POL, Ewa et al. Evaluation of calibration-free concentration analysis provided by Biacore™ systems. **Analytical Biochemistry**, v. 510, p. 88–97, 2016. ISSN 10960309. DOI: 10.1016/j.ab.2016.07.009. Citado 1 vez na página 62.
- PRABHAKAR, Amit; MISHRA, Neha; MUKHERJI, Soumyo. A Comprehensive Investigation of a Microfabricated U-Bend Polymer Waveguide With Analyte Micro-Reservoir for Versatile On-Chip Sensing Applications. **Journal of Microelectromechanical Systems**, v. 26, n. 4, p. 935–945, 2017. ISSN 10577157. DOI: 10.1109/JMEMS.2017.2697411. Citado 1 vezes nas páginas 56, 57.
- PRABHAKAR, Amit; MUKHERJI, Soumyo. Microfabricated polymer chip with integrated U-bend waveguides for evanescent field absorption based detection. **Lab on a Chip**, v. 10, n. 6, p. 748–754, 2010. ISSN 14730189. DOI: 10.1039/b921031h. Citado 1 vezes nas páginas 56, 57.
- PRABOWO, Brilliant Adhi; PURWIDYANTRI, Agnes; LIU, Kou Chen. Surface plasmon resonance optical sensor: A review on light source technology. **Biosensors**, v. 8, n. 3, 2018. ISSN 20796374. DOI: 10.3390/bios8030080. Citado 1 vez na página 28.

- RAHMAN, B. M.A.; DAVIES, J. B. Finite-Element Solution of Integrated Optical Waveguides. **Journal of Lightwave Technology**, v. 2, n. 5, p. 682–688, 1984. ISSN 15582213. DOI: 10.1109/JLT.1984.1073669. Citado 2 vezes nas páginas 46, 63.
- RAMACHANDRAN, A. et al. A universal biosensing platform based on optical micro-ring resonators. **Biosensors and Bioelectronics**, v. 23, n. 7, p. 939–944, 2008. ISSN 09565663. DOI: 10.1016/j.bios.2007.09.007. Citado 1 vez na página 61.
- REED, Graham T.; KNIGHTS, Andrew P. **Silicon Photonics**. Chichester, UK: John Wiley & Sons, Ltd, jan. 2004. v. 41, p. 189–205. ISBN 9780470014189. DOI: 10.1002/0470014180. Disponível em: <<http://doi.wiley.com/10.1002/0470014180>>. Citado 7 vezes nas páginas 32, 35, 40, 46, 48, 49.
- REN, Guanghui et al. Study on inverse taper based mode transformer for low loss coupling between silicon wire waveguide and lensed fiber. **Optics Communications**, v. 284, n. 19, p. 4782–4788, 2011. ISSN 00304018. DOI: 10.1016/j.optcom.2011.05.072. Citado 1 vez na página 80.
- RESEARCH, Transparency Market. **Biosensors Market**. [S.l.: s.n.], 2019. P. 1–96. Disponível em: <<https://www.marketsandmarkets.com/Market-Reports/biosensors-market-798.html>>. Acesso em: 13 out. 2020. Citado 1 vez na página 25.
- RICHARD SYMS, John Cozens. **Optical Guided Waves and Devices**. [S.l.]: McGraw-Hill, 1992. ISBN 0077074254. Citado 1 vez na página 43.
- RIEGEL, Nicholas et al. Using the 3D beam propagation method to model the effects of lithographic roughness on the attenuation of highly multimodal polymer waveguides. **Journal of Vacuum Science & Technology B, Nanotechnology and Microelectronics: Materials, Processing, Measurement, and Phenomena**, v. 31, n. 3, p. 031206, 2013. ISSN 2166-2746. DOI: 10.1116/1.4802979. Citado 1 vez na página 70.
- RODIONOV, S. A.; REMNEV, M. A.; KLIMOV, V. V. Refractive index sensor based on all-dielectric gradient metasurface. **Sensing and Bio-Sensing Research**, v. 22, 2019. ISSN 22141804. DOI: 10.1016/j.sbsr.2019.100263. Citado 1 vez na página 52.
- RSOFT PHOTONIC DEVICE TOOLS. [S.l.: s.n.]. Disponível em: <<https://www.synopsys.com/photonic-solutions/rsoft-photonic-device-tools.html>>. Acesso em: 10 set. 2020. Citado 3 vezes nas páginas 63, 70, 87.
- SAI, V. V.R.; KUNDU, Tapanendu; MUKHERJI, Soumyo. Novel U-bent fiber optic probe for localized surface plasmon resonance based biosensor. **Biosensors and Bioelectronics**, v. 24, n. 9, p. 2804–2809, 2009. ISSN 09565663. DOI: 10.1016/j.bios.2009.02.007. Citado 1 vez na página 56.

- SCARMOZZINO, R.; GOPINATH, A. et al. Numerical techniques for modeling guided-wave photonic devices. **IEEE Journal on Selected Topics in Quantum Electronics**, v. 6, n. 1, p. 150–162, 2000. ISSN 1077260X. DOI: 10.1109/2944.826883. Citado 2 vezes nas páginas 46, 63.
- SCARMOZZINO, R.; OSGOOD, R. M. Comparison of finite-difference and Fourier-transform solutions of the parabolic wave equation with emphasis on integrated-optics applications. **Journal of the Optical Society of America A**, v. 8, n. 5, p. 724, 1991. ISSN 1084-7529. DOI: 10.1364/josaa.8.000724. Citado 1 vez na página 46.
- SHAKOOR, Abdul et al. One-Dimensional Silicon Nitride Grating Refractive Index Sensor Suitable for Integration with CMOS Detectors. **IEEE Photonics Journal**, v. 9, n. 1, 2017. ISSN 19430655. DOI: 10.1109/JPHOT.2016.2644962. Citado 5 vezes nas páginas 50, 52, 68, 88, 89.
- SHI, Yaocheng; MA, Ke; DAI, Daoxin. Sensitivity enhancement in Si nanophotonic waveguides used for refractive index sensing. **Sensors (Switzerland)**, v. 16, n. 3, 2016. ISSN 14248220. DOI: 10.3390/s16030324. Citado 2 vezes nas páginas 47, 48.
- STERN, Eric et al. Importance of the debye screening length on nanowire field effect transistor sensors. **Nano Letters**, v. 7, n. 11, p. 3405–3409, 2007. ISSN 15306984. DOI: 10.1021/nl071792z. Citado 2 vez na página 27.
- STEWART, G. Optical waveguide theory. **Handbook of Laser Technology and Applications**, 2004. DOI: 10.1887/0750306076/b1388v1c8. Citado 1 vez na página 46.
- SURRE, F. et al. U-bend fibre optic pH sensors using layer-by-layer electrostatic self-assembly technique. **Journal of Physics: Conference Series**, v. 178, 2009. ISSN 17426596. DOI: 10.1088/1742-6596/178/1/012046. Citado 1 vez na página 56.
- SWANN, Marcus et al. Quantifying structural changes and stoichiometry of protein interactions using size and density profiling. **International Journal of Peptide Research and Therapeutics**, v. 10, n. 5-6, p. 487–494, 2003. ISSN 1573-3149. DOI: 10.1007/s10989-004-3532-y. Citado 1 vez na página 90.
- TAHA, Ayat M. et al. SOI-based centimeter-scale Mach-Zehnder interferometers for fluid sensing. **Integrated Optics: Devices, Materials, and Technologies XXI**, v. 10106, 101060n, 2017. ISSN 1996756X. DOI: 10.1117/12.2253609. Citado 1 vez na página 55.
- TAKASHIMA, Yuusuke; HARAGUCHI, Masanobu; NAOI, Yoshiki. High-sensitivity refractive index sensor with normal incident geometry using a subwavelength grating operating near the ultraviolet wavelength. **Sensors and Actuators, B: Chemical**,

v. 255, p. 1711–1715, 2018. ISSN 09254005. DOI: 10.1016/j.snb.2017.08.185. Citado 2 vezes nas páginas 52, 89.

TAKASHIMA, Yuusuke; KUSABA, Keita et al. Highly Sensitive Refractive Index Sensor Using Dual Resonance in Subwavelength Grating/Waveguide With Normally Incident Optical Geometry. **IEEE Sensors Journal**, v. 19, n. 15, p. 6147–6153, 2019. ISSN 15581748. DOI: 10.1109/JSEN.2019.2910585. Citado 1 vez na página 89.

TAN, C. Z. Determination of refractive index of silica glass for infrared wavelengths by IR spectroscopy. **Journal of Non-Crystalline Solids**, v. 223, n. 1-2, p. 158–163, 1998. ISSN 00223093. DOI: 10.1016/S0022-3093(97)00438-9. Citado 2 vezes nas páginas 69, 80.

TSUJI, Yasuhide; KOSHIBA, Masanori; SHKAISHI, Tatsuki. Finite element beam propagation method for three-dimensional optical waveguide structures. **Journal of Lightwave Technology**, v. 15, n. 9, p. 1728–1734, 1997. ISSN 07338724. DOI: 10.1109/50.622901. Citado 1 vez na página 63.

UNSER, Sarah et al. Localized surface plasmon resonance biosensing: Current challenges and approaches. **Sensors (Switzerland)**, v. 15, n. 7, p. 15684–15716, 2015. ISSN 14248220. DOI: 10.3390/s150715684. Citado 1 vez na página 62.

VELDHUIS, G. J. et al. Sensitivity Enhancement in Evanescent Optical Waveguide Sensors. **Journal of Lightwave Technology**, v. 18, n. 5, p. 677–682, 2000. ISSN 07338724. DOI: 10.1109/50.842082. Citado 1 vez na página 55.

WANG, Xiaokun et al. Suspended ultra-small disk resonator on silicon for optical sensing. **Optics Letters**, v. 38, n. 24, p. 5405, 2013. ISSN 0146-9592. DOI: 10.1364/ol.38.005405. Citado 1 vez na página 55.

WANGÜEMERT-PÉREZ, J. Gonzalo et al. Subwavelength structures for silicon photonics biosensing. **Optics and Laser Technology**, v. 109, p. 437–448, 2019. ISSN 00303992. DOI: 10.1016/j.optlastec.2018.07.071. Citado 4 vezes nas páginas 48, 50, 52, 53.

WEISENHORN, A. L. et al. Streptavidin binding observed with an atomic force microscope. **Ultramicroscopy**, v. 42-44, PART 2, p. 1125–1132, 1992. ISSN 03043991. DOI: 10.1016/0304-3991(92)90413-E. Citado 1 vez na página 90.

WEISSER, M. et al. Specific bio-recognition reactions observed with an integrated Mach-Zehnder interferometer. **Biosensors and Bioelectronics**, v. 14, n. 4, p. 405–411, 1999. ISSN 09565663. DOI: 10.1016/S0956-5663(98)00124-9. Citado 2 vezes nas páginas 90, 91.

WIEDERSCHAIN, G. Ya. **The ELISA guidebook**. Edição: Springer Science. [S.l.: s.n.], 2009. v. 74, p. 1058–1058. DOI: 10.1134/s000629790909017x. Citado 1 vez na página 26.

- WU, Kaiyi; POON, Andrew W. Stress-released Si₃N₄ fabrication process for dispersion-engineered integrated silicon photonics. **Optics Express**, v. 28, n. 12, p. 17708, 2020. ISSN 1094-4087. DOI: 10.1364/oe.390171. Citado 2 vez na página 68.
- XUDONG FAN; IAN M WHITE. Optofluidic microsystems for chemical and biological analysis. **Nature Photonics**, v. 5, p. 591–597, 2011. Disponível em: <<http://www.nature.com/nphoton/journal/v5/n10/full/nphoton.2011.206.html>>. Citado 1 vez na página 25.
- YAMAUCHI, Junji; SHIBAYAMA, Jun; NAKANO, Hisamatsu. Fast-fourier transform beam-propagation method using Fadé approximant operators. **Electronics and Communications in Japan (Part II: Electronics)**, v. 78, n. 3, p. 12–18, 1995. ISSN 15206432. DOI: 10.1002/ecjb.4420780302. Citado 1 vez na página 63.
- YARIV, Amnon. Optical Electronics in Modern Communications. **Optical Electronics in Modern Communications**, ISBN 0-19-510626-1, p. 77–98, 1997. Disponível em: <<http://scholar.google.com/scholar?hl=en%7B%5C%7DbtnG=Search%7B%5C%7Dq=intitle:Optical+electronics+in+modern+communications%7B%5C%7D0>>. Citado 1 vez na página 46.
- YEE, Kane S. Numerical Solution of Initial Boundary Value Problems Involving Maxwell's Equations in Isotropic Media. **IEEE Transactions on Antennas and Propagation**, v. 14, n. 3, p. 302–307, 1966. ISSN 15582221. DOI: 10.1109/TAP.1966.1138693. Citado 2 vezes nas páginas 65, 66.
- YMETI, Aurel et al. Fast, ultrasensitive virus detection using a young interferometer sensor. **Nano Letters**, v. 7, n. 2, p. 394–397, 2007. ISSN 15306984. DOI: 10.1021/nl1062595n. Citado 1 vez na página 58.
- YOSHIE, Tomoyuki; TANG, Lingling; SU, Shu Yu. Optical microcavity: Sensing down to single molecules and atoms. **Sensors**, v. 11, n. 2, p. 1972–1991, 2011. ISSN 14248220. DOI: 10.3390/s110201972. Citado 1 vez na página 60.
- YOUNG, Thomas. Experiments and Calculations Relative to Physical Optics. **Philosophical Transactions of the Royal Society of London**, v. 94, p. 1–16, 1804. Citado 1 vez na página 57.
- ZEHNDER, Ludwig. Ein neuer Interferenzrefraktor. **Zeitschrift für Instrumentenkunde**, v. 11, p. 275–285, 1891. Citado 1 vez na página 57.
- ZENG, Youjun et al. Recent advances in surface plasmon resonance imaging: Detection speed, sensitivity, and portability. **Nanophotonics**, v. 6, n. 5, p. 1017–1030, 2017. ISSN 21928614. DOI: 10.1515/nanoph-2017-0022. Citado 1 vez na página 62.