

DESENVOLVIMENTO DE METASUPERFÍCIES RESSONANTES EM THZ COM ALTO FATOR Q PARA APLICAÇÃO EM BIOSENSORIAMENTO

Palavras-Chave: TERAHERTZ, METAMATERIAIS, BIOSENSORES

Autores(as):

ANA CAROLINA SOUZA MIRANDA, FEM - UNICAMP

Prof. Dr. JONATHAS DE PAULA SIQUEIRA (orientador), IFGW - UNICAMP

INTRODUÇÃO:

A radiação Terahertz, que está no espectro eletromagnético com faixas de frequência entre 0.1 à 10 Terahertz, destaca-se por sua natureza não-ionizante e grande capacidade de penetração em materiais não condutores. A exploração dessa região do espectro, por muito tempo conhecido como ‘Terahertz Gap’, tem se expandido com o avanço em tecnologias de geração e detecção na fotônica e com o crescente desenvolvimento de dispositivos que interagem de forma eficiente com a radiação THz, como metamateriais – estruturas artificiais projetadas para manipular propriedades eletromagnéticas a partir de alterações na geometria, configuração e distribuição de meta-átomos. Nesse contexto, surge o interesse no desenvolvimento de metasuperfícies QBIC. Os chamados estados ligados no contínuo (BICs) são modos especiais [4] nos quais a energia permanece confinada mesmo dentro do espectro permitido da radiação livre, impedindo seu acoplamento ao espaço livre, e, ao se introduzir perturbações estruturais, como assimetrias na geometria da estrutura, é possível induzir um leve acoplamento radiativo, originando os estados quase-ligados no contínuo (QBICs), com características desejadas em aplicações de diversas áreas da fotônica, com destaque para o desenvolvimento de biosensores ópticos baseados em metasuperfícies. Dessa forma, a combinação entre metasuperfícies QBIC e radiação THz tem impulsionado o desenvolvimento de ressonadores com tecnologia TMS (Terahertz Metamaterial Sensing), notável por sua alta resolução espectral e alta sensibilidade.

O projeto de iniciação científica aqui apresentado teve como objetivo capacitar o aluno em técnicas de microfabricação, com foco em litografia óptica, para a produção de um ressonador THz baseado em metasuperfícies QBIC, em que a estrutura desenvolvida é composta por anéis partidos assimétricos (Split Ring Ressonators) baseada na estrutura do artigo de Bingwei Liu et al [1]. Além da fabricação, o projeto envolve a simulação computacional da estrutura a partir do software COMSOL e a caracterização do dispositivo via espectroscopia no domínio do tempo (THz-TDS).

METODOLOGIA:

A metodologia adotada neste projeto é dividida em quatro etapas: capacitação em técnicas de litografia óptica; desenvolvimento do design da máscara de fotolitografia e microfabricação do dispositivo; simulações computacionais da estrutura; e estudo e caracterização do dispositivo fabricado via espectroscopia no domínio do tempo (THz-TDS).

A capacitação em litografia óptica foi realizada por meio de um estudo dirigido de técnicas e processos envolvidos na fotolitografia e atividades práticas conduzidas no laboratório de litografia do CCSNano. Foram abordadas as etapas fundamentais do processo, como preparação do substrato, aplicação do fotorresiste e exposição à luz UV, além dos parâmetros de alinhamento e revelação necessários.

Já referente ao processo de microfabricação, foi desenvolvido o design da máscara para fotolitografia utilizando o software KLayout, com base na geometria de ressonadores descrita por Liu [1]. O dispositivo a ser fabricado, uma metasuperfície composta por um arranjo periódico de dois tipos de ressonadores em cadeia de anéis, conhecidos como ressonador de cadeia de anéis superior (U-RCR) e ressonador de cadeia de anéis inferior (L-RCR), está esquematizado na figura 1. Os materiais utilizados para construir os ressonadores e o substrato são, respectivamente, ouro e quartzo.

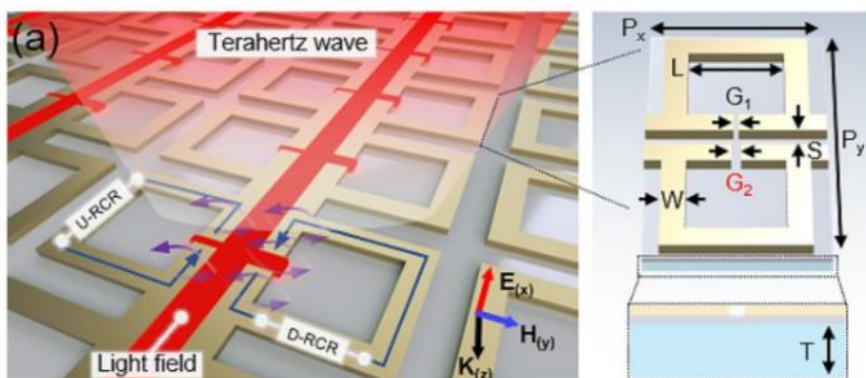


Figura 1. Figura (1) do artigo [1]: (a) Diagrama esquemático da metasuperfície QBIC excitada por onda THz e parâmetros geométricos: $P_x = 37 \mu\text{m}$ e $P_y = 74 \mu\text{m}$; espessura $T = 500 \mu\text{m}$; $L = 30 \mu\text{m}$; $W = 5 \mu\text{m}$; $S = 7 \mu\text{m}$; larguras dos gaps $G_1 = 2 \mu\text{m}$ e $G_2 = [2, 3, 4, 5] \mu\text{m}$.

Com o objetivo de analisar o comportamento eletromagnético da estrutura, foram realizadas simulações numéricas utilizando o software COMSOL Multiphysics. O modelo tridimensional para as diversas seções das cadeias de anéis U-RCR e L-RCR da metasuperfície foram construídas com as dimensões reais projetadas e submetidas a condições de excitação compatíveis com espectroscopia THz.

Por fim, foi realizado um estudo teórico da técnica de Espectroscopia no Domínio do Tempo Terahertz (THz-TDS), que será utilizada futuramente para caracterização do dispositivo fabricado. A capacitação envolveu o entendimento dos princípios físicos da geração e detecção de pulsos THz via lasers de femtosegundos, o funcionamento dos detectores baseados em amostragem temporal e a análise espectral por transformada de Fourier.

RESULTADOS E DISCUSSÃO:

A capacitação em fotolitografia envolveu o entendimento geral do processo de microfabricação, as atividades práticas desenvolvidas no CCSNano e o planejamento do processo que seria executado assim que a máscara com o padrão de exposição do projeto estivesse pronta. Inicialmente, o substrato de quartzo seria limpo e preparado para garantir boa adesão do fotorresiste. Em seguida, uma camada uniforme de fotorresiste seria aplicada por *spin coating* e passaria por um processo de aquecimento. Então, a amostra seria exposta à radiação UV por meio da máscara de campo escuro, que define as regiões do padrão óptico. Após a exposição, o fotorresiste seria revelado em solução, dissolvendo de forma seletiva as áreas expostas à luz. Com o padrão definido, seria realizada a deposição de uma fina camada de cromo, para adesão adequada do ouro, e uma camada de ouro sobre toda a superfície, incluindo tanto as áreas abertas quanto as cobertas pelo fotorresiste. Por fim, o processo de *lift-off* seria utilizado para remover o fotorresiste e o metal sobreposto, deixando o ouro apenas nas regiões originalmente expostas pela máscara. A figura 2 apresenta o design submetido para fabricação no Centro de Tecnologia da Informação Renato Archer (CTI).

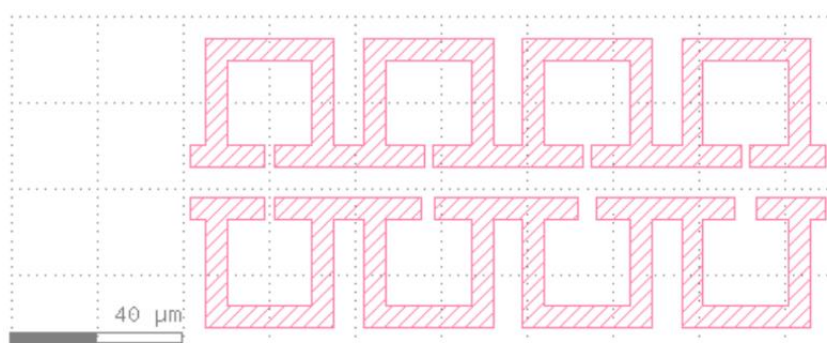


Figura 2: Modelagem da máscara desenvolvida no software KLayout e submetida para fabricação.

É importante destacar que a largura do gap G_2 no L-RCR é variável, introduzindo assimetria ao design, enquanto os outros parâmetros permanecem inalterados. A diferença de largura dos gaps, $\Delta G = G_2 - G_1$, e a assimetria, $\alpha = \Delta G / G_1$, são parâmetros chave para estudar as características eletromagnéticas da ressonância QBIC excitada. No artigo [1], são usados 4 valores de G_2 na estrutura, com vários gráficos mostrando os respectivos valores de fator Q e FoM para cada valor de α , e, com esses resultados, percebe-se que o melhor valor de α é de $\alpha = 0.5$, assim, as comparações de modelo BIC (sem as assimetrias, com o $G_2 = 2 \mu m$) e o modelo QBIC (com assimetria nas estruturas do gap dos anéis) são feitas com $\alpha = 0$ e $\alpha = 0.5$.

A revisão bibliográfica envolveu a leitura dos trabalhos de Suling Shen et al [2], relevante para o projeto no estudo acerca de radiação terahertz e de tecnologias de sensoriamento com a utilização de metamateriais; Bingwei Liu et al [1], de extrema relevância para o desenvolvimento do design do dispositivo para fabricação do ressonador de anel dividido SRR (Split Ring Ressonators) com tecnologia QBIC; e Kaori Fukunaga et al [3], importante na descrição de utilização de espectroscopia Terahertz e

identificação de compostos por meio da tecnologia THz. Além disso, os textos [4] e [5] também foram utilizados como embasamento teórico acerca do fenômeno BIC para posterior entendimento do fenômeno QBIC e de geração, detecção e espectroscopia de radiação Terahertz, respectivamente. A literatura indica que a combinação de estruturas QBIC com radiação THz resulta em modos confinados com fatores de qualidade elevados, ideais para aplicações em sensoriamento de alta precisão. Junto destas leituras, foi realizado o estudo do software de simulação COMSOL no intuito de complementar o entendimento acerca de metasuperfícies.

As simulações numéricas realizadas no software COMSOL Multiphysics utilizando o módulo “Electromagnetic Waves, Frequency Domain”, tiveram como objetivo avaliar a resposta espectral S11 de cada célula unitária do ressonador, ou seja, o conjunto U-RCR e L-RCR para cada alfa. A estrutura simulada foi composta por três domínios, os quais as dimensões geométricas adotadas seguiram a estrutura proposta pelo artigo de Liu [1]: o substrato dielétrico de quartzo (SiO_2), a superfície metálica do metamaterial em ouro (Au), representando os ressonadores U-RCR e L-RCR, e uma camada de ar de 20 μm na parte superior. Cada simulação considerou uma única célula unitária, com condições de contorno periódicas aplicadas nas laterais, e excitação por um único porto (Port 1) definido acima da superfície, emitindo uma onda plana normal à estrutura. O ouro foi modelado segundo o modelo de Drude, enquanto o substrato de quartzo foi definido conforme dados do próprio software. A malha foi refinada na interface metal-substrato para capturar os efeitos ressonantes de forma eficiente. O espectro simulado variou de 1,5 a 2,5 THz e permitiu a obtenção das curvas S11 para cada bloco, que se refere ao parâmetro de reflexão do sinal, revelando as frequências ressonantes associadas às estruturas U-RCR e L-RCR. O parâmetro S11 representa a razão entre a potência refletida e a potência incidente no porto, sendo uma medida da eficiência com que a onda eletromagnética é acoplada à estrutura metamaterial. Os mínimos acentuados obtidos na curva S11 indicam fortes acoplamentos ressonantes e, logo, revelam a presença de modos localizados com alta intensidade de campo na interface entre o metal e o substrato. Esses modos podem estar associados a estados quase-ligados ao contínuo (QBICs), caracterizados por largura de banda estreita e alto fator de qualidade (Q). Dessa forma, a análise da resposta espectral S11 foi extremamente importante para identificar as condições de ressonância, o desempenho óptico da estrutura e sua sensibilidade a variações geométricas.

Quanto ao estudo da geração e detecção da radiação THz, o aparato experimental se baseia na técnica de espectroscopia no domínio do tempo (THz-TDS), utilizando um laser de femtosegundos Yb:KGW e materiais não-lineares para gerar pulsos THz por diferença de frequência em cristal de BNA. A detecção ocorre via efeito eletro-óptico em cristal de GaP, com leitura feita por um sistema acoplado a um fotodetector balanceado. A reconstrução do pulso no tempo e sua análise espectral via transformada de Fourier permitem obter o coeficiente de transmissão da amostra, que, por meio da fórmula de Tinkham, fornece informações sobre sua condutividade óptica. Essa metodologia é essencial para caracterizar o ressonador QBIC e avaliar sua sensibilidade.

CONCLUSÕES:

O projeto desenvolvido permitiu o avanço na capacitação em técnicas de microfabricação por fotolitografia, assim como no entendimento do funcionamento de ressonadores THz baseados em metasuperfícies QBIC. Os estudos dirigidos, a execução do design da máscara, as simulações numéricas no COMSOL e o aprofundamento na técnica de espectroscopia THz-TDS foram fundamentais para sedimentar o caminho da fabricação e caracterização do dispositivo, cujas propriedades ressonantes simuladas indicam potencial para sensoriamento óptico com alta sensibilidade espectral.

BIBLIOGRAFIA

- [1] Liu, B., Peng, Y., Jin, Z., Wu, X., Gu, H., Wei, D., Zhu, Y., Zhuang, S. (2023). **Terahertz ultrasensitive biosensor based on wide-area and intense light-matter interaction supported by QBIC**. Chemical Engineering Journal (Lausanne, Switzerland: 1996), 462(142347), 142347.
- [2] Shen, S., Liu, X., Shen, Y., Qu, J., Pherson, E. M., Wei, X., Sun, Y. (2021). **Recent Advances in the Development of Materials for Terahertz Metamaterial Sensing**. Advanced Optical Materials. 10.1002/adom.202101008.
- [3] Fukunaga, K., Picollo, M. **Terahertz spectroscopy applied to the analysis of artists' materials**. Appl. Phys. A 100, 591–597 (2010). <https://doi.org/10.1007/s00339-010-5643-y>
- [4] Marinica, D., C., Borisov, A., G., Shabanov, S., V. **Bound States in the Continuum in Photonics**. Vol. 100, no. 18, 8 May 2008, <https://doi.org/10.1103/physrevlett.100.183902>.
- [5] Lee, Y-S. **Principles of Terahertz Science and Technology**. Physics Department, Oregon State University. New York, Springer, 2009.
- [6] Ottomaniello, A., Vezio, P., Tricinci, O., Den Hoed, F., Dean, P., Tredicucci, A., Mattoli, V. **Highly Conformable Terahertz Metasurface Absorbers via Two-Photon Polymerization on Polymeric Ultra-Thin Films**. Nanophotonics, vol. 12, no. 8, 20 Feb. 2023, pp. 1557–1570, <https://doi.org/10.1515/nanoph-2022-0667>.
- [7] Chen, X., Ye, L., Yu, D. **Terahertz Sensing with a 3D Meta-Absorbing Chip Based on Two-Photon Polymerization Printing**. Photonics Research, vol. 12, no. 5, 12 Apr. 2024, p. 895, <https://doi.org/10.1364/prj.519652>