

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS

INSTITUTO DE FÍSICA Gleb Wataghin

F896 MONOGRAFIA

Sensores baseados em ondas acústicas:
introdução e aplicações

Aluno: Allan Cassio Trevelin Covacevice

E-mail: allan.covacevice@gmail.com

Orientador: Prof. Dr. Odilon Divino Damasceno Couto Júnior

E-mail: odilon@ifi.unicamp.br

Departamento de física da matéria condensada

Instituto de física Gleb Wataghin

Universidade Estadual de Campinas

CAMPINAS – SP

NOVEMBRO 2012

Resumo

Neste trabalho introduzimos e discutimos os principais conceitos físicos envolvidos em na realização de um sensor biológico baseado em ondas acústicas. Iniciamos com uma introdução geral do fenômeno ondulatório em sólidos, discutindo o conceito de ondas propagantes e guias de onda.

Apresentamos na sequência a formulação matemática dos conceitos de tensão, deformação e piezoeletricidade, que nos permitem obter as equações de movimento de uma partícula em uma onda propagante num sólido e as relações de dispersão de ondas acústicas tipo *bulk* e de superfície.

Com estas ferramentas introduzimos os mecanismos de funcionamento de sensores químicos e biológicos baseados em ondas acústicas de cisalhamento (*Love waves*). Falamos sobre o processo de fabricação e a constituição destes sensores. Analisamos os modos de vibração e a resposta em frequência de ondas *Love* em diferentes materiais, o que nos permite fazer uma caracterização geral da velocidade de operação e eficiência deste tipo de sensor. No último capítulo, analisamos em detalhes as características de um sensor biológico projetado para detecção do bacteriófago M13. Este sensor serve como protótipo de sensores para a análise de presença de vírus e bactérias [como o *Escherichia coli* (*E. coli*)] em meios líquidos.

Abstract

In this paper we introduce and discuss the main concepts involved in the physical realization of a biological sensor based on acoustic waves. We begin with a general introduction of the wave phenomenon in solids, discussing the concept of wave propagation and waveguides. We present the following mathematical formulation of the concepts of stress, strain and piezoelectricity, which allow us to obtain the equations of motion of a particle in a wave propagating in a solid and the dispersion relations of bulk acoustic wave and surface type.

With these tools we introduce the functional mechanisms of chemical and biological sensors based on acoustic shear waves (Love waves). Talk about the manufacturing process and constitution of these sensors. We analyze the vibration modes and frequency response of Love waves in different materials, allowing us to make a general characterization of operating speed and efficiency of this type of sensor. In the last chapter, we analyze in detail the characteristics of a biological sensor designed to detect the bacteriophage M13. This sensor serves as prototype sensors for the analysis of viruses and bacteria [such as *Escherichia coli* (*E. coli*)] in liquid media.

Biografia do autor

Allan Cassio Trevelin Covacevice é nascido em São Bernardo do Campo, no ABC paulista, mas residiu e estudou maior parte de sua vida em Santo André, cidade vizinha. Aos 16 anos de idade manifestou interesse no estudo de física e ciências naturais. Em 2007 ingressou no curso de engenharia elétrica pela Universidade Estadual Paulista “Júlio de Mesquita Filho” - campus de Guaratinguetá – FEG, onde, insatisfeito com o curso, estudou durante um ano. Em 2008 ingressou no curso de bacharelado em física pelo Instituto de física Gleb Wataghin.

Sumário

Resumo	iii
Abstract	iv
Biografia do autor	vi
1 Ondas – Introdução	1
1.1 Ondas propagantes, estacionárias e guiadas	1
1.2 Descrição de uma onda plana	1
1.3 Frentes de onda	4
1.4 Representação de ondas em números complexos	5
1.5 Pacote de onda	5
1.5.1 Meios dispersivos e não-dispersivos	6
1.6 Reflexão de onda	7
1.6.1 Incidência normal e ondas estacionárias	8
1.6.2 Incidência oblíqua e ondas guiadas	9
2 Propagação de ondas em um sólido	13
2.1 Tensão, deformação e deslocamento	13
2.2 Equação do movimento	14
2.3 Equação da onda para um sólido não-piezoelétrico	17
2.4 Atenuação da equação de onda	18
2.5 Piezoelectricidade	18
2.6 Equação de onda para materiais piezoelétricos	20
3 Sensores de onda acústica	23
3.1 Introdução	23
3.2 Transdutores digitais – IDTs (Interdigital Transducers)	24

3.2.1 Delay line: uma configuração de dois IDTs.....	26
3.2.2 Fabricação e caracterização de IDTs.....	27
3.2.2.1 Materiais de substrato.....	27
3.3 Resposta em frequência de um IDT	28
3.3.1 Fluxo de potência e densidade de energia.....	31
3.4 Perturbações em propagações de ondas acústicas.....	31
4 Aplicação de sensores: o sensor bacteriófago M13	33
4.1 O sensor de bacteriófago M13.....	33
4.2 Ondas tipo Love: o que são:.....	33
4.3 Teoria e propagação de ondas tipo Love no biosensor.....	38
4.4 Sensibilidade à massa.....	40
4.5 Resposta do sensor ao processo de montagem.....	42
4.6 Resposta dos sensores à reação entre M13 e AM13.....	43
 Conclusão	 47
 Bibliografia	 48

1.1 – Ondas propagantes, estacionárias e guiadas:

Quando um sólido sofre uma perturbação mecânica, esta se propaga de modo a fazer o sistema abandonar o estado de equilíbrio. Essa perturbação dá origem a uma onda propagante.

Para um meio finito, a onda propagante pode ser refletida nas faces que delimitam esse meio, fenômeno que pode produzir uma onda estacionária ou uma onda guiada. Ondas guiadas se propagam através de guias de onda (1.6).

1.2 – Descrição de uma onda plana:

Descreve-se a propagação de uma perturbação através da variação temporal de algumas de suas propriedades.

Suponha que um certo parâmetro característico dessa propagação seja dado por $u(x, t)$ no tempo $t = t_0$ e posição $x = x_0$. Suponha também que essa onda se propague no sentido positivo de x e não seja atenuada pelo meio, ou seja, sua amplitude é constante. Se a velocidade de propagação dessa perturbação é v , então o deslocamento mostrado em (a) e (b) da figura 1.1 foi:

$$x - x_0 = v(t - t_0) \quad (1.1)$$

Rearranjando a expressão anterior, temos o seguinte resultado:

$$t - \frac{x}{v} = t_0 - \frac{x_0}{v} \quad (1.2)$$

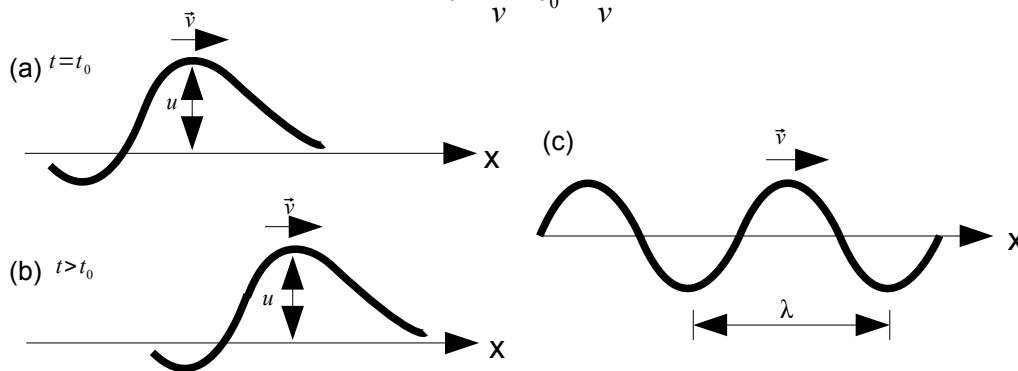


Figura 1.1. Perturbação propagante sem atenuação. Em (a), a perturbação está em x_0 e se propaga no sentido positivo de x . Em (b), ela se deslocou de $x - x_0$, mas ainda preserva sua propriedade u . Em (c), ilustra-se uma onda periódica com comprimento de onda λ .

Portanto, observamos que a quantidade $t - \frac{x}{v}$ se conserva para toda a propagação, enquanto não houver distorção ou atenuação do movimento. Podemos escrever u como:

$$u(x, t) = F\left(t - \frac{x}{v}\right) = f(x - vt) \quad (1.3)$$

Se a propagação ocorrer no sentido negativo de z , as expressões análogas seriam:

$$u(x, t) = G\left(t + \frac{x}{v}\right) = g(x + vt) \quad (1.4)$$

Se duas ondas se propagarem em sentidos opostos, então $u(x, t)$ será uma combinação linear das expressões acima:

$$u(x, t) = f(x - vt) + g(x + vt) \quad (1.5)$$

As funções matemáticas que melhor descrevem esse comportamento oscilatório são as funções senoidais, visto que qualquer perturbação pode ser escrita como uma soma de tais funções.

Suponha uma membrana sob perturbação periódica. O movimento dessa membrana será descrito pela seguinte equação:

$$u(x, t) = A \cos \omega\left(t - \frac{x}{v}\right), \quad (1.6)$$

onde ω é a *frequência angular*.

Uma condição necessária é que, após um período de oscilação T , a função tenha o mesmo valor que ela possuía em t , ou seja:

$$u(x, t + T) = u(x, t) \quad (1.7)$$

Logo, escrevemos:

$$A \cos \omega\left(t + T - \frac{x}{v}\right) = A \cos \omega\left(t - \frac{x}{v}\right) \quad (1.8)$$

A condição 1.8 só será verdadeira se $\omega T = 2\pi$. Portanto, estabelecemos a relação entre T e ω :

$$T = \frac{2\pi}{\omega} \quad (1.9)$$

Analogamente, temos a segunda condição necessária:

$$u(x + \lambda, t) = u(x, t), \quad (1.10)$$

onde λ é o *comprimento da onda*.

Assim, teremos a seguinte relação:

$$A \cos \omega \left(t - \frac{x + \lambda}{v} \right) = A \cos \omega \left(t - \frac{x}{v} \right) \quad (1.11)$$

Esta condição somente será verdadeira se $\omega \frac{\lambda}{v} = 2\pi$. Definimos $k = \frac{\omega}{v}$, o chamado *número de onda*. Relacionamos a frequência angular com a frequência f por $\omega = 2\pi f$. Com isso, temos mais duas relações importantes. A primeira delas é:

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} \quad (1.12)$$

A segunda relaciona velocidade da onda com a sua frequência e comprimento de onda:

$$f = \frac{\lambda}{v} \quad (1.13)$$

Sendo assim, podemos escrever a função de onda $u(x, t)$ como:

$$u(x, t) = A \cos \left[2\pi \left(\frac{t}{T} - \frac{x}{\lambda} \right) \right] = A \cos(\omega t - kx) \quad (1.14)$$

O termo dentro da função oscilatória é chamada de *fase*, ou seja, define-se a fase de uma onda, ϕ , por:

$$\phi = \omega t - kx \quad (1.15)$$

O número de onda, k , representa a variação da fase da onda em relação à posição, ou seja:

$$k = - \frac{\partial \phi}{\partial x} \quad (1.16)$$

A frequência angular, ω , representa a variação temporal da fase:

$$\omega = \frac{\partial \phi}{\partial t} \quad (1.17)$$

A velocidade de propagação, $v = \omega/k$, é chamada de *velocidade de fase*. Corresponde à velocidade que um observador deve possuir para estar em repouso em relação à onda.

1.3 – Frentes de onda:

Uma frente de onda é um conjunto de pontos de um meio que estão em uma mesma fase quando uma onda se propaga por esse meio. Em geral, as frentes de onda não são perpendiculares a nenhum eixo de coordenadas. Considere a figura 1.2, abaixo.

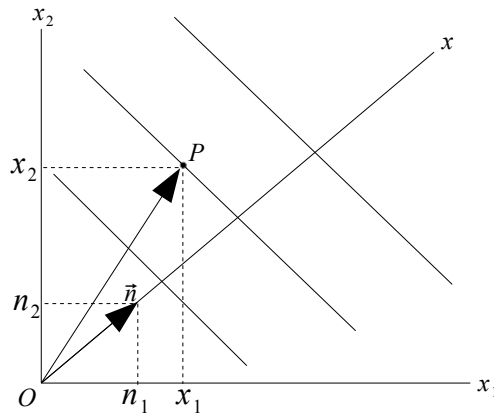


Figura 1.2. Frentes de onda para uma direção não-perpendicular aos eixos de coordenadas.

O ponto P da figura 1.2, localizado pelo vetor $\vec{x} = \vec{OP}$, está vibrando. A expressão para sua vibração envolve o vetor unitário \vec{n} , o qual é perpendicular às frentes de onda. A projeção de \vec{x} sobre o eixo x é dada por $x = \vec{x} \cdot \vec{n}$ e a função de onda, então, é descrita por:

$$u(x, t) = A \cos \left[\omega \left[t - \frac{\vec{n} \cdot \vec{x}}{v} \right] \right] \quad (1.18)$$

Aqui introduz-se o *vetor de onda*:

$$\vec{k} = k \vec{n} \quad (1.19)$$

Temos, portanto, para uma onda que se propaga na direção \vec{k} :

$$u(x, t) = A \cos(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{x}) \quad (1.20)$$

1.4 – Representação de ondas em números complexos:

De acordo com a relação de Euler:

$$e^{\pm i\theta} = \cos\theta \pm i \operatorname{sen}\theta, \quad (1.21)$$

onde $i = \sqrt{-1}$.

Observamos que a equação 1.20 corresponde à parte real da equação 1.21, onde $\theta = \omega t - \vec{k} \cdot \vec{x}$.

Portanto, a onda complexa é dada por:

$$u(x, t) = A e^{i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{x})} \quad (1.22)$$

Apenas a parte real da função complexa $u(x, t)$ pode ser medida fisicamente. A determinação da amplitude de oscilação A é dada por:

$$A^2 = u_c(x, t) u(x, t), \quad (1.23)$$

onde $u_c(x, t)$ é o complexo conjugado de $u(x, t)$.

Sejam $u(x, t) = e^{i(\omega t - a)}$ e $v(x, t) = e^{i(\omega t - b)}$. A média temporal do produto dessas duas funções é dado simplesmente por:

$$[u(x, t), v(x, t)] = \frac{1}{2} \Re [u(x, t) v_c(x, t)], \quad (1.24)$$

onde $[]$ simboliza a média temporal.

1.5 – Pacote de onda:

Vimos tratando de ondas monocromáticas até agora, ou seja, ondas cujas características (amplitude, frequência, fase, etc.) não variam durante a propagação. É interessante estudarmos ondas reais, mais complexas, de forma a deduzir informações importantes sobre o meio em que se propagam. Essas ondas, que, embora não sejam monocromáticas, podem ser descritas como uma sobreposição de infinitas ondas monocromáticas de diferentes amplitudes e frequências. A essa sobreposição infinita de ondas dá-se o nome de *pacote de ondas*.

Tomando como variável o número de onda k , escrevemos esse pacote de onda em uma dimensão como uma transformada de Fourier:

$$T_g = -\frac{\partial \delta \varphi}{\partial \omega} = \frac{x_0}{v}$$

$$u(x, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} A(k) e^{i(\omega t - kx)} dk, \quad (1.25)$$

onde $A(k)$ é a *densidade de amplitude* e $\omega = \omega(k)$.

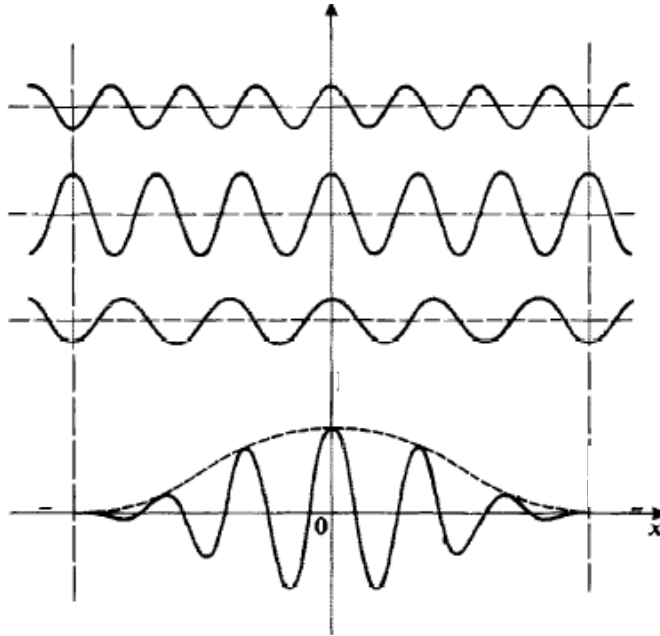


Figura 1.3. Três curvas se somam para formar um pacote de onda. Em $x = 0$, as três ondas estão em fase e interferem construtivamente. Quando uma delas se move, as ondas passam a interferir destrutivamente [1].

1.5.1 – Meios dispersivos e não-dispersivos:

A propagação de uma onda em um meio não-dispersivo não é afetada. Neste caso, se esse meio possuir comprimento x_0 , uma onda propagante com velocidade v apresentará cada ponto atrasado da mesma quantidade $t_0 = x_0/v$.

Assim sendo, a variação de fase será dada por:

$$\delta \varphi = \frac{-\omega x_0}{v} \quad (1.26)$$

Definimos *atraso de grupo* como:

$$(1.27)$$

Em meios dispersivos, a amplitude, $A(k)$, apresentará valores significantes apenas para valores de k muito próximos ao k da onda centrada, onde $k = k_0 = \omega_0/v(\omega_0)$. Nessas condições, expandimos a relação de dispersão $\omega(k)$ em torno de k_0 :

$$\omega(k) \approx \omega(k_0) + \frac{\partial \omega(k_0)}{\partial k} (k - k_0) \quad (1.28)$$

O termo $\frac{\partial \omega(k_0)}{\partial k}$ representa a velocidade com que o pacote de onda muda de fase.

Definimos a *velocidade de grupo*, C_g , como:

$$C_g = \frac{\partial \omega(k_0)}{\partial k} = v \quad (1.29)$$

1.6 – Reflexão de onda:

Quando o meio de propagação é finito, as propriedades do material mudarão bruscamente no momento que em a onda chegar a uma interface com outros materiais. Neste caso, haverá reflexão total ou parcial da onda em questão. As condições de contorno são determinadas pela onda, e, por continuidade, se uma componente dessa onda tiver valor nulo de um lado da interface, do outro lado também deverá tê-lo.

O mecanismo de reflexão é responsável pelas ondas guiadas em materiais chamados 'guias de onda'. Esses materiais confinam a onda em uma série de sucessivas reflexões internas em suas paredes e armazenam a energia dessa onda, atribuindo maior sensibilidade ao sensor de onda acústica, como veremos no capítulo 4 para um guia de onda de SiO_2 . O mecanismo de reflexão de ondas pode ocorrer por ondas incidentes normalmente ou obliquamente às paredes de um material.

1.6.1 – Incidência normal e ondas estacionárias:

Uma onda propagante se depara com um plano perpendicular totalmente refletor. Essa onda possui função de onda $u_I(x, t) = F_I(t - \frac{x}{v})$. O índice I representa onda incidente. Observe a figura 1.4, abaixo:

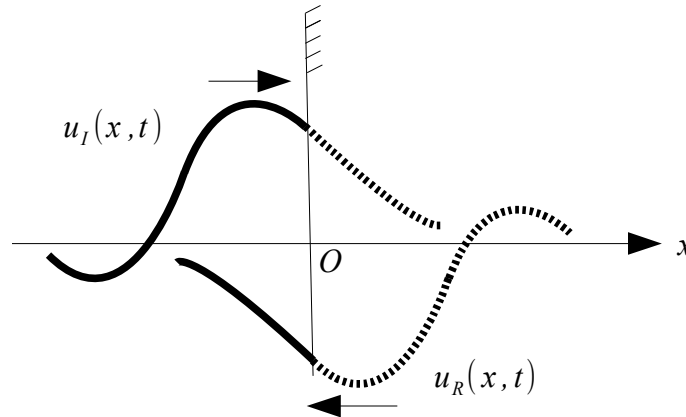


Figura 1.4. Reflexão total de $u_I(x, t)$ sobre uma parede totalmente rígida, produzindo uma onda refletida simétrica.

A figura mostra uma onda incidente sendo refletida quando depara-se com o plano totalmente refletor. A onda refletida é simétrica e inversa à onda incidente em relação a esse plano.

Supomos que a amplitude das ondas seja zero quando atingem o plano totalmente refletor, ou seja:

$$u_I(0, t) = u_R(0, t) = 0 \quad (1.30)$$

Além disso, temos as funções de onda das ondas incidente e refletida:

$$u_I(x, t) = F_I\left(t - \frac{x}{v}\right) \quad (1.31)$$

$$u_R(x, t) = F_R\left(t + \frac{x}{v}\right) \quad (1.32)$$

O movimento total é dado, portanto, por:

$$u_R(x, t) + u_I(x, t) = F_R\left(t + \frac{x}{v}\right) + F_I\left(t - \frac{x}{v}\right) \quad (1.33)$$

Utilizando a relação 1.30, obtemos que $F_R(t) = -F_I(t)$. Segue que a onda refletida é:

$$u_R(x, t) = -F_I\left(t + \frac{x}{v}\right)$$

Logo, o movimento completo, dado pela equação 1.33 é, para funções senoidais:

$$u_I(x, t) + u_R(x, t) = A\left[\cos\omega\left(t - \frac{x}{v}\right) - \cos\omega\left(t + \frac{x}{v}\right)\right] = 2A \operatorname{sen}\omega t \operatorname{sen}\left(\frac{\omega x}{v}\right) \quad (1.35)$$

Essa função perdeu completamente seu caráter de propagação. O resultado é uma onda estacionária. No caso da reflexão não ser total, a amplitude da onda refletida será menor que a amplitude da onda incidente. Neste caso, teremos:

$$u_I(x, t) + u_R(x, t) = A_I \cos\omega\left(t - \frac{x}{v}\right) - A_R \cos\omega\left(t + \frac{x}{v}\right) \quad (1.36)$$

A equação 1.36 pode ser expandida para escrevermos nos mesmos termos da expressão 1.35, obtendo o seguinte resultado:

$$u_I(x, t) + u_R(x, t) = (A_I - A_R) \cos\omega\left(t - \frac{x}{v}\right) + 2A_R \operatorname{sen}\omega t \operatorname{sen}\left(\frac{\omega x}{v}\right) \quad (1.37)$$

A razão entre as amplitudes máxima e mínima é dada pelo chamado *standing-wave ratio* (SWR):

$$SWR = \frac{A_I + A_R}{A_I - A_R} \quad (1.38)$$

1.6.2 – Incidência oblíqua e ondas guiadas:

Para o caso de uma incidência oblíqua, o vetor de onda, \vec{k} , não é mais perpendicular ao plano de reflexão. Segundo a figura 1.5, a função de onda incidente é escrita como:

$$u_I = A_I \cos(\omega t - k_1 x_1 - k_2 x_2) \quad (1.39)$$

A onda refletida possuirá um vetor de onda diferente, denominado \vec{k}' .

Assim, a função de onda refletida é $u_R = -A_R \cos(\omega t - k'_1 x_1 - k'_2 x_2)$ (o sinal negativo indica que a propagação está no sentido contrário de u_I).

O movimento total é descrito, portanto, por:

$$u = u_I + u_R = A_I \cos(\omega t - k_1 x_1 - k_2 x_2) - A_R \cos(\omega t - k'_1 x_1 - k'_2 x_2) \quad (1.40)$$

Por simplicidade, supomos que $A_I = A_R$.

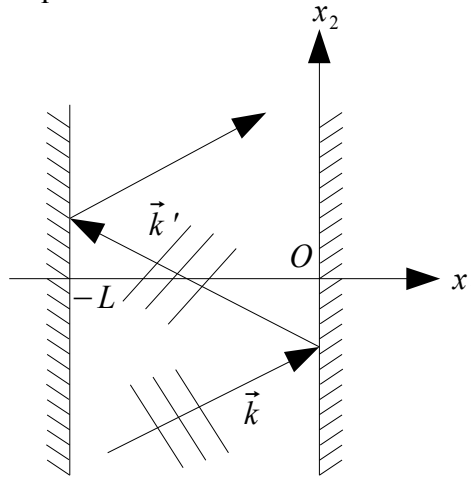


Figura 1.5. Sucessivas reflexões oblíquas entre duas paredes refletoras localizadas em O e -L.

A expressão 1.40 torna-se:

$$u = 2A \operatorname{sen}\left(\omega t - \frac{k_1 + k'_1}{2} x_1 - \frac{k_2 + k'_2}{2} x_2\right) \operatorname{sen}\left(\frac{k_1 - k'_1}{2} x_1 + \frac{k_2 - k'_2}{2} x_2\right) \quad (1.41)$$

As condições de contorno ditam que $u = 0$ em $x_1 = 0$. Portanto, temos as relações que tornam essa condição verdadeira:

$$k_1 = -k'_1 \quad \text{e} \quad k_2 = k'_2 \quad (1.42)$$

Simplificando a expressão 1.41 e aplicando as relações 1.42, obtemos o seguinte resultado:

$$u = 2A \operatorname{sen}(\omega t - k_2 x_2) \operatorname{sen}(k_1 x_1) \quad (1.43)$$

Portanto, os vetores de onda das ondas incidente e refletida são simétricos em respeito ao plano refletor.

Em relação às condições de contorno para o plano localizado em $x_1 = -L$, temos a seguinte condição:

$$k_1 = \frac{n\pi}{L}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (1.44)$$

Portanto, a expressão final é:

$$u = 2A \operatorname{sen}(\omega t - k_2 x_2) \operatorname{sen}\left(\frac{n\pi x_1}{L}\right) \quad (1.45)$$

A expressão 1.45 descreve uma onda que se propaga na direção Ox_2 delimitada pelos planos $x_1 = 0$ e $x_1 = -L$. Essa é uma onda guiada. Sua velocidade de fase, $v' = \frac{\omega}{k_2}$ é maior do que a velocidade de fase de uma onda não-guiada, $v = \frac{\omega}{k}$. Isso porque o ponto em que a frente de onda toca o plano refletor viaja mais rapidamente do que v , pois a onda viaja obliquamente.

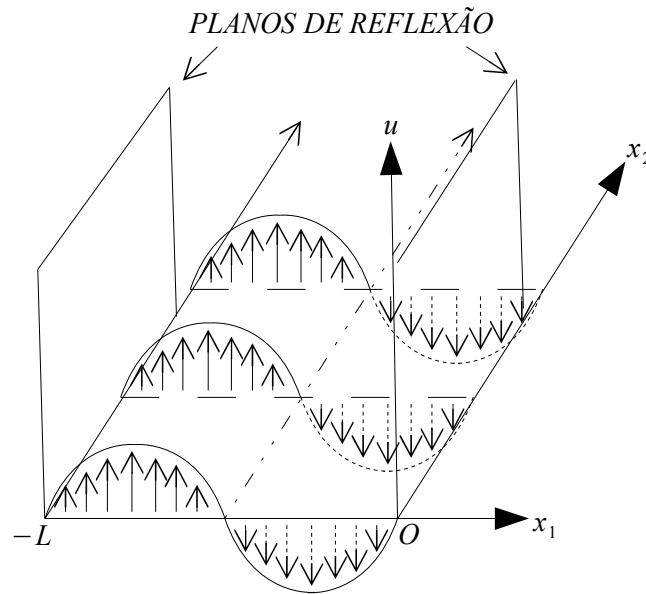


Figura 1.6. Propagação de uma onda guiada. Uma onda guiada possui planos nodais nos planos de reflexão e também, se $n > 1$, planos nodais dentro da guia. Neste exemplo, $n = 2$, correspondente ao primeiro modo antissimétrico.

Para cada valor de n , a solução 1.45 é um *modo de vibração* entre as paredes. O n -ésimo modo possui $(n - 1)$ planos nodais, os quais são equidistantes e paralelos uns aos outros e aos planos $x_1 = 0$ e $x_1 = -L$.

Propagação de ondas em um sólido

2. 1 – Tensão, deformação e deslocamento:

Um sólido é composto por átomos interligados por “molas”, de forma que todo o cristal é composto por muitos pequenos osciladores. Dessa forma, ao aplicarmos uma força sobre este sólido, estaremos tensionando-o, os átomos sairão de suas posições de origem e uma força de restauração surge.

Suponha que apliquemos uma força sobre uma amostra de um sólido. Cada partícula que o compõe se localizará por um vetor deslocamento $\mathbf{u}(x, y, z, t)$ em três dimensões.

Uma onda plana causa deslocamentos harmônicos na direção de sua propagação e, se esta onda se propaga no sentido positivo de x , ela pode ser representada como

$$\vec{u}(x, y, z, t) = (u_1 \vec{x} + u_2 \vec{y} + u_3 \vec{z}) e^{i(\omega t - kx)}, \quad (2.1)$$

onde \mathbf{x} , \mathbf{y} e \mathbf{z} são vetores unitários.

Não estamos interessados na translação do sólido, mas sim nas deformações causadas pela força. Esta deformação é dada pela matriz gradiente do vetor deslocamento. O gradiente de um campo vetorial é um tensor dado por uma matriz 3x3:

$$\nabla \vec{u} = \begin{bmatrix} \frac{\partial u_1}{\partial x} & \frac{\partial u_1}{\partial y} & \frac{\partial u_1}{\partial z} \\ \frac{\partial u_2}{\partial x} & \frac{\partial u_2}{\partial y} & \frac{\partial u_2}{\partial z} \\ \frac{\partial u_3}{\partial x} & \frac{\partial u_3}{\partial y} & \frac{\partial u_3}{\partial z} \end{bmatrix} \quad (2.2)$$

O gradiente de deslocamento representa mudanças na distância interatômica e rotações locais causadas pelo deslocamento. Da mesma forma que eliminamos a translação do sólido ao tomarmos o gradiente do deslocamento, devemos eliminar as contribuições de rotação de forma a escrever uma expressão somente para a deformação do sólido. Isso é feito somando-se o gradiente com o seu transposto.

O resultado é a deformação S (*strain*), cujos elementos de matriz são dados por:

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right), \quad (2.3)$$

onde $i, j = 1, 2, 3$ e $x_1 = x, x_2 = y$ e $x_3 = z$. A figura 2.1 mostra um sólido no qual se propaga uma onda plana.

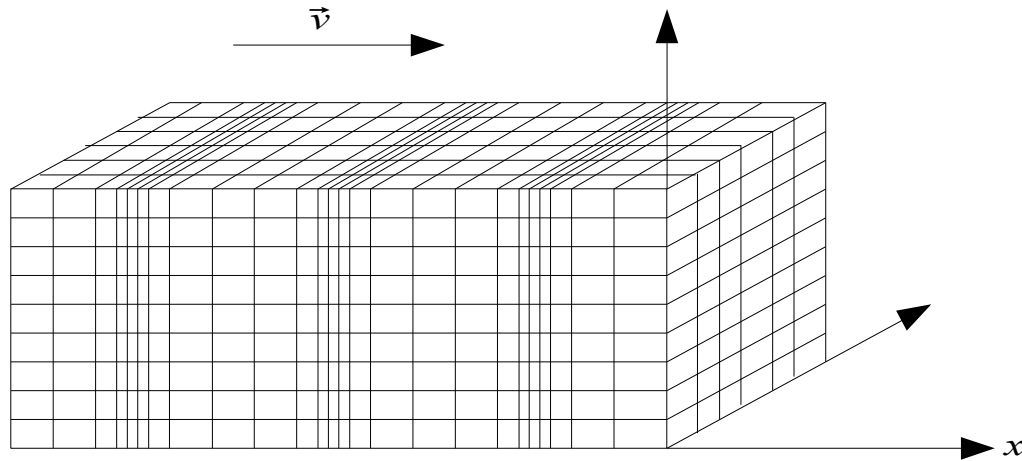


Figura 2.1. Onda plana propagante em um sólido na direção x . A onda produz regiões de compressão e rarefação ao longo de sua propagação.

No tensor S_{ij} , os elementos da diagonal S_{11}, S_{22}, S_{33} representam as deformações nas direções dos eixos x, y e z , respectivamente. Os termos fora da diagonal representam fisicamente a variação angular (em radianos) de elementos que inicialmente possuíam orientação em i e j , pois são componentes mistas dos três eixos coordenados. A aplicação de força sobre um sólido produz uma tensão sobre o mesmo. Esta, por sua vez, causa deformações no sólido. Dessa forma, definimos *tensão* como sendo a força por unidade de área aplicada sobre o material, enquanto que *deformação* é a mudança de comprimento por unidade de comprimento não tensionada.

2.2 – Equação de movimento:

Após definir deformação e tensão, podemos escrever a equação de movimento que descreve o movimento de deformações elásticas em um sólido.

Seja T_{ij} o tensor de tensão sobre um sólido elástico, a equação de movimento, descrita pela segunda lei de Newton é dada pela equação 2.4:

$$\sum_{j=1}^3 \frac{\partial T_{ij}}{\partial x_j} = \rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} , \quad (2.4)$$

onde ρ é a densidade (massa/volume) do sólido. Note que a equação 2.4 é, na verdade, um conjunto de 3 equações, uma para cada valor de $j = 1,2,3$.

É observado experimentalmente que pequenas deformações sobre um sólido são linearmente proporcionais à tensão aplicada sobre o mesmo. Isso é conhecido em uma dimensão como a lei de Hooke. Em três dimensões, para cristais não-piezoelétricos, essa relação é dada por:

$$T_{ij} = \sum_{k,l=1}^3 c_{ijkl} S_{kl} , \quad (2.5)$$

onde c_{ijkl} é chamado de coeficiente de rigidez e descreve a resposta de deformação para uma dada tensão.

Como $T_{ij} = T_{ji}$ e $S_{ij} = S_{ji}$ (relação de Maxwell, válida para todos os sólidos [2]), podemos escrever estes tensores em notação reduzida com menor número de índices, já que cada tensor pode ter, no máximo, 6 elementos únicos. Assim, a equação 2.5 é reescrita como (também conhecida por *engineering notation*):

$$T_I = \sum_{J=1}^6 c_{IJ} S_J \quad (2.6)$$

A tabela 2.1 sumariza essa representação:

Índice ij	Índice reduzido	Matriz de representação
11	1	$\begin{bmatrix} T_1 & T_6 & T_5 \\ T_6 & T_2 & T_4 \\ T_5 & T_4 & T_3 \end{bmatrix}$
22	2	
33	3	
23 ou 32	4	
13 ou 31	5	
12 ou 21	6	

O coeficiente de rigidez, c_{ij} , é um tensor 6x6, possui 36 valores possíveis e também é simétrico em relação à mudança dos índices. Assim, para descrever completamente um cristal, são necessários 21 valores distintos (6 diagonais e 15 fora da diagonal). Dependendo da estrutura cristalina, alguns cristais podem apresentar simetrias em relação a alguns planos. Nestes casos, alguns valores desses coeficientes serão iguais e um número reduzido de constantes será necessário para determinar as propriedades mecânicas de um cristal [2]. A tabela 2.2 [3] exibe alguns valores de c_{ij} para alguns materiais e os valores de ρ em Kg/m^3 :

Tabela 2.2 - Coeficientes de rigidez e densidade de alguns materiais [Ballantine – cp2]							
Material	Densidade (Kg/m^3)	Coeficiente de rigidez (10^{10}N/m^2)					
		C_{11}	C_{33}	C_{44}	C_{12}	C_{13}	C_{14}
Alumínio (policristalino)	2695	11.1		2.5			
Niobato de Lítio	4700	20.3	24.5	6.0	5.3	7.5	0.9
Polietileno	900	0.34		0.02			
Quartzo	2651	8.67	10.72	5.79	0.69	1.19	-1.79
Óxido de Zinco	5680	20.97	21.09	4.25	12.11	10.51	

Como exemplo, construímos o tensor c_i para o quartzo, cuja estrutura trigonal apresenta tensor c_{ij} dado por:

$$(c_{ij}) = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & c_{14} & -c_{25} & 0 \\ c_{12} & c_{11} & c_{13} & -c_{14} & c_{25} & 0 \\ c_{13} & c_{13} & c_{33} & 0 & 0 & 0 \\ c_{14} & -c_{14} & 0 & c_{44} & 0 & c_{25} \\ -c_{25} & c_{25} & 0 & 0 & c_{44} & c_{14} \\ 0 & 0 & 0 & c_{25} & c_{14} & \frac{c_{11}-c_{12}}{2} \end{pmatrix} \quad (2.7)$$

onde, no caso do quartzo, $c_{25} = 0$. O tensor 2.7 torna-se:

$$(c_{ij}) = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & c_{14} & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{11} & c_{13} & -c_{14} & 0 & 0 \\ c_{13} & c_{13} & c_{33} & 0 & 0 & 0 \\ c_{14} & -c_{14} & 0 & c_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} & c_{14} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{14} & \frac{c_{11}-c_{12}}{2} \end{pmatrix} \quad (2.8)$$

2.3 – A equação da onda para um sólido não-piezoelétrico:

Pela simetria na matriz de deformação na equação 2.5 podemos escrever:

$$S_{kl} = \frac{\partial u_k}{\partial x_l} \quad (2.9)$$

Derivando-se a equação 2.5 em relação a x_j e substituindo a relação 2.9, temos:

$$\rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} = \sum_{j,k,l=1}^3 c_{ijkl} \frac{\partial^2 u_k}{\partial x_j \partial x_l} \quad (2.10)$$

A equação 2.10 é a equação de onda para um sólido não-piezoelétrico e, na verdade, ela representa um conjunto de três equações, uma para cada valor de $i = 1, 2, 3$.

Em geral, a solução dessa equação de onda consiste em 3 tipos de ondas propagantes: uma onda compressional polarizada na direção de propagação (figura 2.1) e duas ondas de cisalhamento (se propagam no plano) polarizadas perpendicularmente à direção de propagação (figura 2.2).

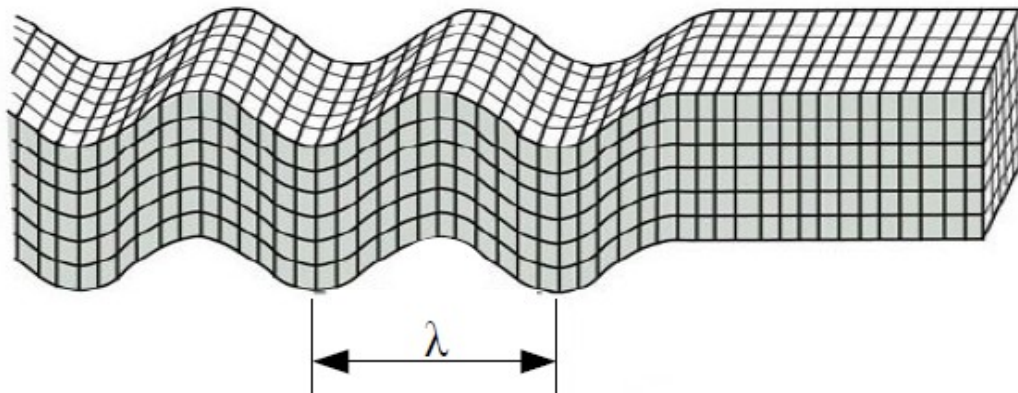


Figura 2.2. Ondas de cisalhamento (*shear*) polarizadas transversalmente à propagação propagando sobre a superfície de um sólido.

2.4 – Atenuação da equação de onda:

A equação 2.10 não levou em consideração efeitos de atenuação. Em geral, a propagação de uma onda plana em um cristal sofre um amortecimento, que pode surgir devido a fatores térmicos, espalhamento de fônons, espalhamento Raman ou outros. Tratamos aqui de espalhamento por fônons, que é o fenômeno mais observado em cristais de alta qualidade. Neste fenômeno, uma deformação da célula unitária de um cristal surge devido aos fônons. Isto modula da rede cristalina de outra forma, perturbando a sua periodicidade e espalhando elétrons. O que corresponde a inserir um fator de viscosidade na equação 2.10, a qual torna-se:

$$T_I = \sum_{J=1}^6 (c_{IJ} S_J + \eta_{IJ} \dot{S}_J), \quad (2.11)$$

onde o tensor η_{IJ} representa uma viscosidade que amortece a propagação da onda no cristal. Ele possui a mesma simetria que o tensor c_{IJ} , pois para cada orientação dentro do cristal existe um amortecimento diferente devido às redes cristalinas.

2.5 – Piezoelectricidade:

Uma associação de deformação juntamente com a polarização de certos cristais permite-nos criar ondas acústicas eletricamente. Quando um cristal não possui simetria em relação ao seu centro de inversão, a deformação deste modificará sua estrutura eletrônica, resultando em uma polarização (figura 2.3).

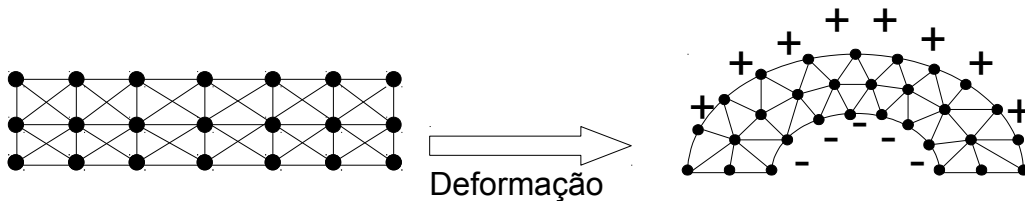


Figura 2.3. Polarização decorrente de uma deformação.

Classicamente, esse fenômeno ocorre como uma tentativa de manter a densidade de carga constante dentro do cristal, pois, quando há uma deformação, há variação de área superficial e de porções volumétricas dentro do cristal.

Quando se deforma um cristal piezoelétrico, suas ligações também são deformadas, abandonando seu estado de estabilidade elétrica, o que produz uma polarização.

O acoplamento entre campo elétrico e deformação pode ser levado em conta fazendo-se alterações sobre a equação 2.6 levando em conta efeitos eletromagnéticos. Assim, temos duas equações:

$$\left[\begin{array}{l} T_i = c_{ij}^E S_j - e_{ij} E_j \\ D_i = \epsilon_{ij}^S E_j - e_{ij} S_j \end{array} \right. , \quad \begin{array}{l} (2.12) \\ (2.13) \end{array}$$

onde e_{ij} são constantes piezoelétricas de deformação [carga/(comprimento)²], E_i são as componentes do campo elétrico, D_i são componentes do deslocamento elétrico, e ϵ_{ij} são constantes de permissividade elétrica.

As equações 2.12 e 2.13 são chamadas de *relações piezoelétricas constitutivas* e descrevem completamente a interação entre campo elétrico, tensão e deformação em um sólido piezoelétrico. A tabela 2.3 apresenta alguns valores numéricos para as constantes piezoelétrica de deformação e classe de simetria de alguns cristais.

Ao longo que as simetrias dos cristais aumentam, o número de constantes piezoelétricas únicas diminui da mesma forma que ocorre para os coeficientes de rigidez, responsáveis pelas propriedades mecânicas do cristal. Cristais que possuem pelo menos uma simetria em relação ao centro de inversão (ou seja, se traçarmos uma reta saindo de um ponto e passando pelo centro de simetria que está a uma distância d , esta reta encontrará um ponto exatamente simétrico à mesma distância do centro de inversão) são não-piezoelétricos e possuem constantes piezoelétricas iguais a zero, como observa-se na tabela 2.3.

Tabela 2.3 – Constantes piezoelétricas de deformação [Ball - cap2]

Material	Classe de simetria [Royce – cap 2]	Constantes piezoelétricas (C/m ²)					
		e _{x1}	e _{x4}	e _{x5}	e _{y2}	e _{z1}	e _{z3}
Arsenito de Gálio	Trig. 3m	0	0.154	0	0	0	0
Niobato de Lítio	Trig. 32	0	0	3.7	2.5	0.2	1.3
Quartzo	Hex. 6mm	0.171	-0.043	0	0	0	0
Óxido de Zinco	Cúbico 43m	0	0	-0.48	0	-0.573	1.32

2.6 – Equação de onda para materiais piezoelétricos:

Escrevendo a equação 2.12 em termos do potencial elétrico Φ , temos:

$$T_{IJ} = \sum_{k,l=1}^3 c_{ijkl} \frac{\partial u_k}{\partial x_l} + \sum_{k=1}^3 e_{ijk} \frac{\partial \Phi}{\partial x_l} \quad (2.14)$$

Aplicando a equação de movimento 2.4 em 2.12, obtemos:

$$\sum_{j,k,l=1}^3 c_{ijkl} \frac{\partial^2 u_k}{\partial x_j \partial x_l} + \sum_{j,l=1}^3 e_{ijk} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x_j \partial x_l} = \rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} \quad (2.15)$$

Comparando essa equação com a equação 2.10 de uma onda em um cristal não piezoelétrico, observa-se que um termo do potencial elétrico aparece. Como veremos mais adiante, este termo é responsável pela produção de ondas acústicas no cristal por um potencial elétrico. Essas ondas acústicas são soluções da equação 2.15 e devido às condições de contorno dessa equação, elas satisfazem uma relação de dispersão linear $\omega(k) = bk$, onde b é uma constante. Modos que satisfazem relações de dispersão lineares são chamados de acústicos.

A figura 2.4 apresenta alguns modos de vibração, soluções da equação 2.15, em um cristal piezoelétrico e faixas de velocidade de fase. A figura 2.5 mostra as relações de dispersão para a equação 2.15. As ondas acústicas de superfície (SAW), apresentadas na figura 2.5, são ondas cuja penetração num sólido não é maior do que um comprimento de onda.

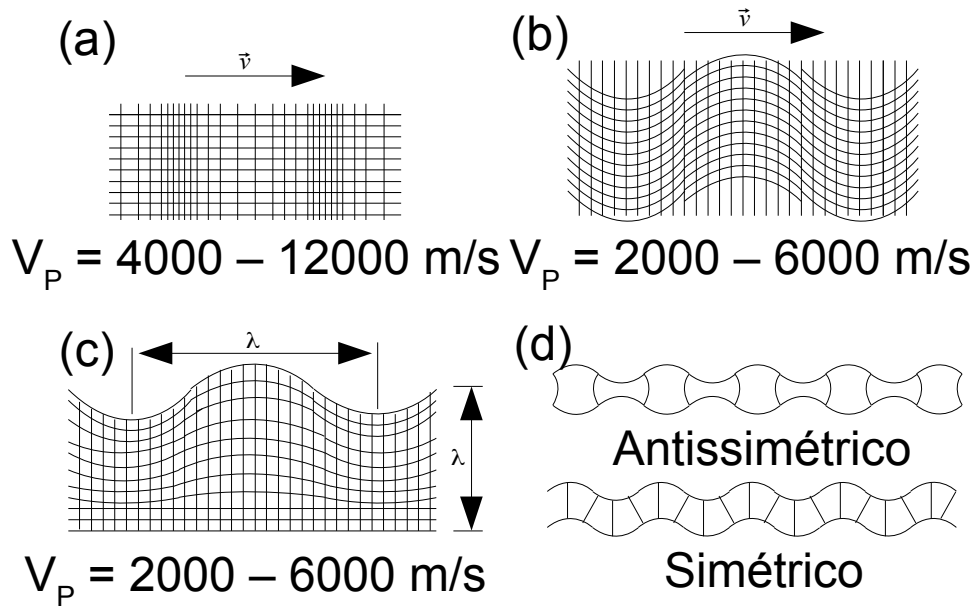


Figura 2.4. Propagação de ondas acústicas em cristais sólidos seccionados com velocidades típicas. As escalas estão exageradas para maior clareza. (a): onda tipo *bulk* longitudinal compressional. (b): onda tipo *bulk* transversal. (c): onda acústica de superfície (SAW) em um sólido não-infinito, onde a propagação em profundidade da onda não passa de um comprimento de onda. (d): ondas simétricas e antissimétricas APW (*acoustic plate waves*) [3].

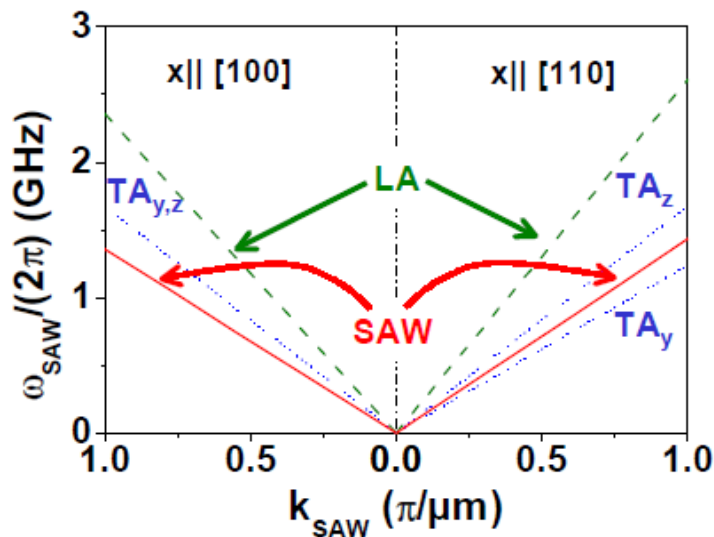


Figura 2.5. Relação de dispersão calculado para GaAs de modos longitudinais tipo bulk (LA - linhas verdes), modos tipo bulk transversais (TA - linhas azuis) e modos acústicos de superfície (SAW - linhas vermelhas)[4].

Observando a figura 2.5, observamos que as ondas acústicas de superfície (SAW) possuem velocidade de fase e de grupo menores que as ondas de modos tipo bulk.

3.1 - Introdução:

Sensores são ferramentas de medição capazes de detectar diversas quantidades, sejam elas quantidades físicas, químicas ou biológicas.

Um sensor atua em um sistema detectando variações em algum parâmetro que se deseja monitorar e, em resposta a essa variação, emite um sinal (geralmente um sinal elétrico) que pode ser armazenado em dispositivos de memória para futura análise. Essa resposta elétrica pode ser uma corrente elétrica, uma voltagem oscilatória, um pulso digital, etc.

Em um sensor típico, o processo de *transdução* ocorre. Esse processo converte uma informação monitorada (*input*) em uma informação que o mecanismo de funcionamento do sensor possa entender (por exemplo, um sensor de luz detecta luminosidade e, por transdução, essa informação corresponde a um comprimento de onda, intensidade ou frequência) e depois outro processo de transdução converte essa informação para um sinal de saída (*output*) elétrico. Além disso, muitos sensores possuem circuitos que ampliam esse sinal, de forma a torná-lo robusto, de maior sensibilidade a outros dispositivos de análise.

A figura 3.1, abaixo, é um diagrama de um sensor típico.

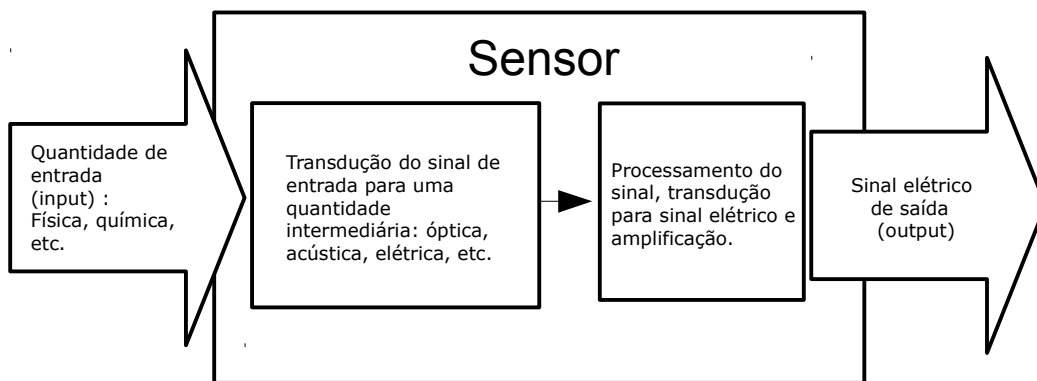


Figura 3.1. funcionamento básico de sensor.

Sensores são caracterizados de muitos modos diferentes. Dentre eles, os principais são:

- 1) Sensibilidade: medida da magnitude do sinal de *output* para uma dada magnitude do *input*;
- 2) Resolução: capacidade de resposta do sensor para um valor mínimo de variação no *input*. Se a variação real for menor que esse valor mínimo, o sensor não enxergará essa medida;
- 3) Seletividade: capacidade de distinguir quantidades diferentes a serem detectadas. Por exemplo, um sensor de vapores químicos pode estar sujeito à uma mistura de gases, porém apenas um deles deseja-se detectar.

3.2 – Transdutores digitais - IDTs (Interdigital Transducers):

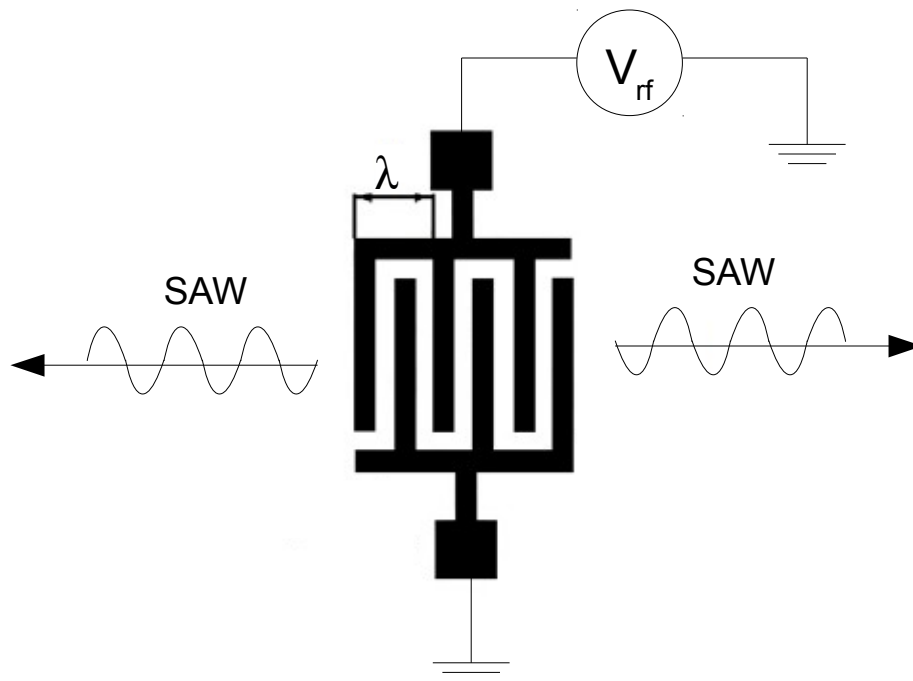


Figura 3.2. Transdutor interdigital (IDT) responsável pela produção de ondas acústicas.

Os transdutores são ressoadores (figura 3.3) utilizados para produzir ondas de acústicas em substratos piezoelétricos através do fenômeno piezoelétrico inverso. Esse fenômeno consiste na produção de vibrações mecânicas em um substrato através da aplicação de um potencial elétrico alternado.

A versão mais simples de IDT consiste em 2 “pentas” de eletrodos posicionados de frente um para o outro e com espaçamentos iguais a λ , um deles estando aterrado e o outro ligado a um sinal elétrico com rádio-frequência f .

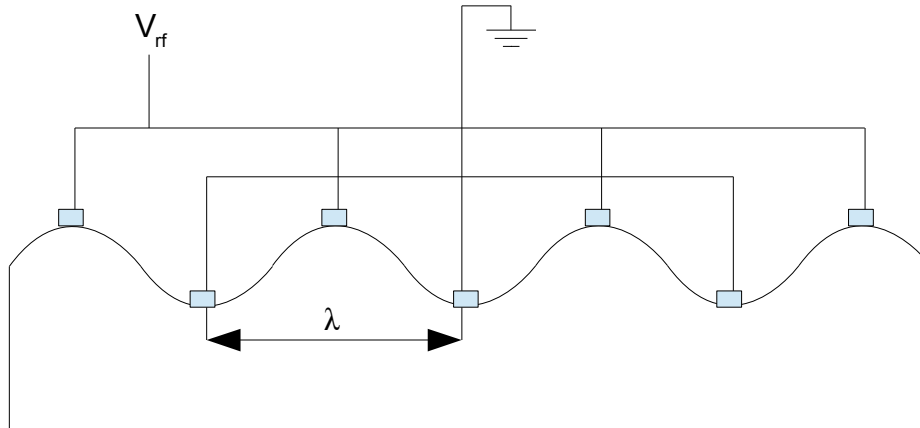


Figura 3.3. IDT como um ressonador sobre um substrato.

Na figura 3.3, cada dedo do IDT oscila sobre o substrato. Um ressonador consiste em um oscilador no qual a onda acústica oscila em fase com a frequência de V_{rf} , a tensão alternada. Segundo a figura, os três dedos aterrados devem estar em fase uns com os outros, enquanto que o mesmo deve ocorrer para os quatro dedos ligados à tensão. Quando os três dedos aterrados estiverem no mínimo, os quatro dedos sob tensão alternada estarão no máximo e vice-versa. De forma que há uma interferência construtiva entre as ondas geradas por cada dedo (considerados como fontes pontuais) o que proporciona a geração de uma onda de tensão mecânica que também tem um campo piezoelétrico associado e que se propaga pelo material conforme a figura 3.2.

Cada transdutor produz ondas ortogonalmente aos eletrodos e, para voltagens senoidais, o transdutor opera com maior eficiência quando a periodicidade p do transdutor é igual ao comprimento de onda do sinal aplicado. Isso ocorre quando o transdutor está excitado à frequência f_0 síncrona, ou seja, quando todas as vibrações interferem construtivamente.

Isto ocorre para uma frequência dada por:

$$f_0 = \frac{v}{\lambda}, \quad (3.1)$$

onde v é a velocidade de propagação da onda, que é igual à velocidade de grupo (equação 1.29).

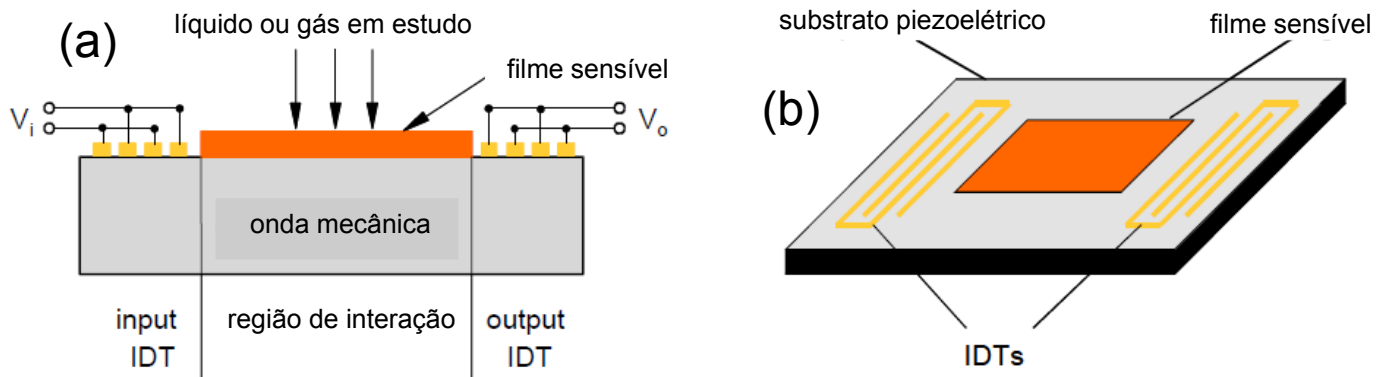


Figura 3.4. (a): sensor de onda de superfície acústica. (b): configuração entre IDTs para um sensor de ondas acústicas de superfície [5].

3.2.1 – Delay line: uma configuração de dois IDTs:

Um delay line consiste numa configuração de dois IDTs utilizados como input e output na qual, através de uma tensão V_i , o transdutor de input emite uma onda que se propaga na superfície do substrato piezoelétrico e, após um tempo finito, é detectado pelo transdutor de output, sendo que este último converte essa vibração em um sinal elétrico V_o , como mostrado na figura 3.4(a).

Esse tipo de arranjo de IDTs é bastante utilizado em biosensores. Se sobre o substrato piezoelétrico estiver uma película com reagentes biológicos, ao longo do tempo estes reagentes reagirão e formarão substâncias que se depositam sobre a película e, portanto, sobre o substrato. Outro exemplo de sensor de massa com delay line poderia ser um sensor de vapores químicos, onde moléculas desses vapores adsorveriam ao substrato.

Ondas acústicas de superfície são excitadas por IDTs (figura 3.4(b)): quando uma tensão é aplicada entre os eletrodos do IDT, um campo elétrico resultante é produzido. Se essa tensão é alternada no tempo, um campo de deformação é produzido sobre o cristal e induz à formação de uma onda estacionária acústica de superfície. Essa onda emerge de ambos os lados do IDT e as frentes de onda são paralelas aos dedos do mesmo.

Uma propagação de onda mecânica em um cristal piezoelétrico é acompanhada de um potencial que surge em decorrência das deformações.

No momento em que essa onda chega ao segundo transdutor, esse potencial induz uma corrente elétrica em cada eletrodo do IDT. Essas correntes se somam e são enviadas a um circuito externo ao sensor.

3.2.2 – Fabricação e caracterização de IDTs:

A estrutura em forma de pente (figura 3.2) dos IDTs é obtida através da deposição de filmes finos litograficamente padronizados sobre substratos ou filmes finos piezoelétricos. O filme de metal utilizado na fabricação de IDTs deve ser grosso o suficiente para não oferecer muita resistência elétrica, porém fino o suficiente para não oferecer muita resistência mecânica à onda acústica. IDTs típicos apresentam alumínio em camadas com espessuras da ordem de 1000Å . Outro metal aplicável é o ouro, porém a este deve-se aplicar finas camadas (aproximadamente 100Å) de cromo ou titânio/tungstênio, de forma a prover melhor adesão.

A caracterização de um IDT é muito importante quando se fala de sensores, pois esse processo é responsável pela determinação da impedância elétrica frente à onda acústica, da largura de banda, da frequência de operação e da área de sensibilidade dos sensores. Dessa forma, projetar IDTs não é uma tarefa simples, sendo auxiliada por programas de computação que modelam IDTs com base em respostas eletromecânicas em cada dedo. Como nem todos que trabalham com sensores possuem acesso a tais programas, muitas vezes os IDTs são produzidos num processo de tentativa e erro.

3.2.2.1 – Materiais de substrato:

Consideramos apenas os substratos piezoelétricos, pois sensores de ondas acústicas operam com o princípio de piezoeletricidade. Desta forma, o quartzo é o mais utilizado em sensores de ondas acústicas devido ao seu relativamente baixo coeficiente de temperatura, o qual determina a variação das propriedades físicas do material com o aumento de temperatura. Além do quartzo, vários outros materiais com baixos coeficientes de temperatura estão sendo caracterizados por técnicas de cristalografia e sendo utilizados em sensores em larga escala. A tabela 3.1 exhibe alguns valores medidos para velocidade e frequência de ondas acústicas em alguns dos materiais mais utilizados [6][7].

Tabela 3.1 – Valores de velocidade de propagação de ondas acústicas para modos SH em algumas direções cristalinas para diferentes materiais. Para um comprimento de onda típico de $\lambda = 5\mu\text{m}$, pode-se observar a faixa de frequência de operação de sensores baseados em tais materiais.

Material	Velocidade (m/s)	Frequência (MHz)
ST – quartz	5060 ^a	1012
Y – quartz	3764 ^a	752,8
36 YX - LiTaO ₃	4162 ^a	832,4
GaAs [001]	2096 ^b	419,2
SiO ₂ (guia de onda)	2850 ^a	570

Outro substrato importante é o niobato de lítio (LiNbO₃), o qual apresenta vantagens eletromecânicas apesar de seu coeficiente de temperatura ser muito grande, sendo muito difícil produzir um sensor que não seja de temperatura. Dessa maneira, o niobato de lítio é bastante utilizado em sensores de temperatura com alta precisão.

O arseneto de gálio (GaAs) é um material utilizado na fabricação de circuitos e é um piezoelétrico. Ele é aplicado a sistemas eletrônicos de alta velocidade, como frequências de micro-ondas (GHz) e, quando aplicado ao substrato, é muito sensível a variações de massa em sensores de ondas acústicas.

Outros materiais, tais como o ZnO e o AlN são bastante utilizados em sensores de ondas acústicas do tipo *bulk* por ser possível depositar filmes finos desses materiais através de processos de *sputtering* e, ao mesmo tempo, preservar suas propriedades piezoelétricas, pois os cristais são orientados em uma direção cristalográfica específica durante a deposição.

3.3 – Resposta em frequência de um IDT:

Cada dedo de um IDT pode ser considerado uma fonte discreta de ondas acústicas em um cristal piezoelétrico, já que a deformação produzida por piezoelectricidade varia com a posição perto de cada dedo. Uma função simples relaciona a voltagem aplicada a cada dedo, V_1 , ao potencial elétrico associado às ondas irradiadas em cada direção, Φ^\pm :

$$\Phi^{\pm} = \mu_s V_1 \quad , \quad (3.2)$$

onde Φ^+ corresponde à SAW propagante para a direita, Φ^- corresponde à SAW propagante para a esquerda e μ_s é uma constante que depende do substrato.

Quando um arranjo de dedos é excitado, como num IDT, o potencial de onda para Φ^+ calculada na posição x corresponde à soma vetorial de cada dedo:

$$\Phi^+(x) = \mu_s \sum_{n=0}^{N_f-1} V_n e^{ik(x-x_n)} \quad , \quad (3.3)$$

onde x_n é a posição do n -ésimo dedo excitado com voltagem V_n e N_f é o número total de dedos.

A equação 3.3 tem a forma de uma transformada de Fourier discreta. Conseqüentemente, a resposta do IDT será proporcional à transformada de Fourier da sequência de contribuições dos dedos do IDT.

Se N_f dedos idênticos estiverem espaçados periodicamente com período λ e estiverem excitados com uma voltagem alternada $V_n = (-1)^n V_0$, então a equação 3.3 se torna:

$$\Phi^+(0) = \mu_s V_0 \sum_{n=0}^{N_f-1} (-1)^n e^{-ink\frac{\lambda}{2}} \quad (3.4)$$

A soma na equação 3.4 é uma série geométrica onde os termos se tornam a unidade e se somam construtivamente quando $k\lambda/2 = m\pi$, com m ímpar e inteiro.

O IDT excita *harmônicos ímpares* em múltiplos ímpares da frequência síncrona: $f_m = mf_1$.

Afastando-se da frequência síncrona, a adição das componentes de cada dedo produz uma resposta como:

$$|\Phi^+(f)| = \left| \sin \frac{(X)}{X} \right| \quad , \quad (3.5)$$

onde $X = \frac{N_p \pi (f - f_0)}{f_0}$, f_0 é a frequência síncrona do IDT e N_p é o número de períodos do IDT

($N_p = N_f/2$). A figura 3.5 mostra a resposta calculada para um IDT em função do parâmetro X , chamado *parâmetro de dissonância*. É importante destacar que quanto maior for o número de pares de dedos dos IDTs, melhor será a resolução da resposta em frequência. Isso possui um limite, pois para N muito grande, surgem efeitos de reflexões acústicas, além de apresentar maior resistência mecânica.

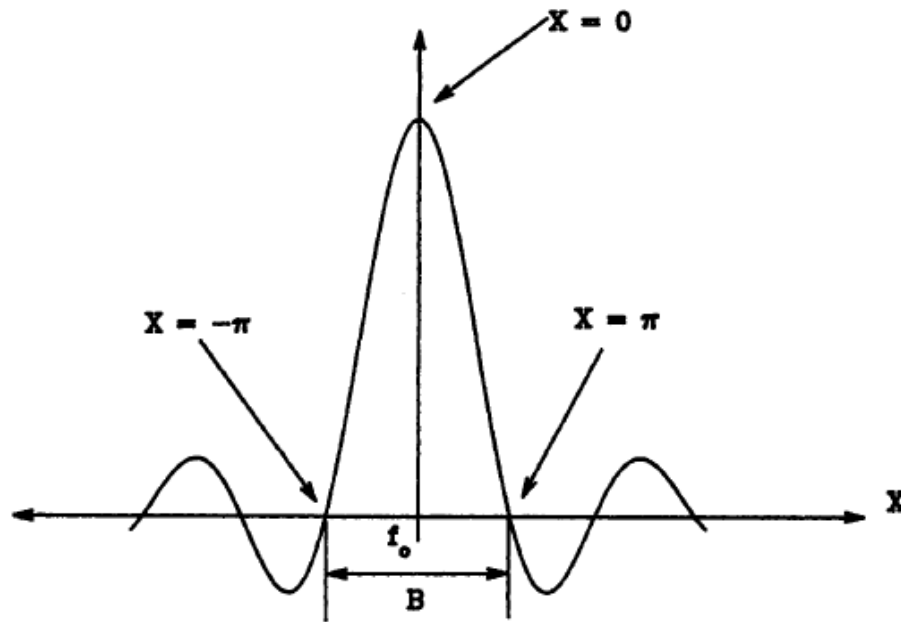


Figura 3.5. Resposta calculada do IDT pela equação 4.5 em função de X [3].

A figura 3.6 é um resultado experimental na medida de resposta em frequência entre dois IDTs [3]. Note que a escala vertical é logarítmica.

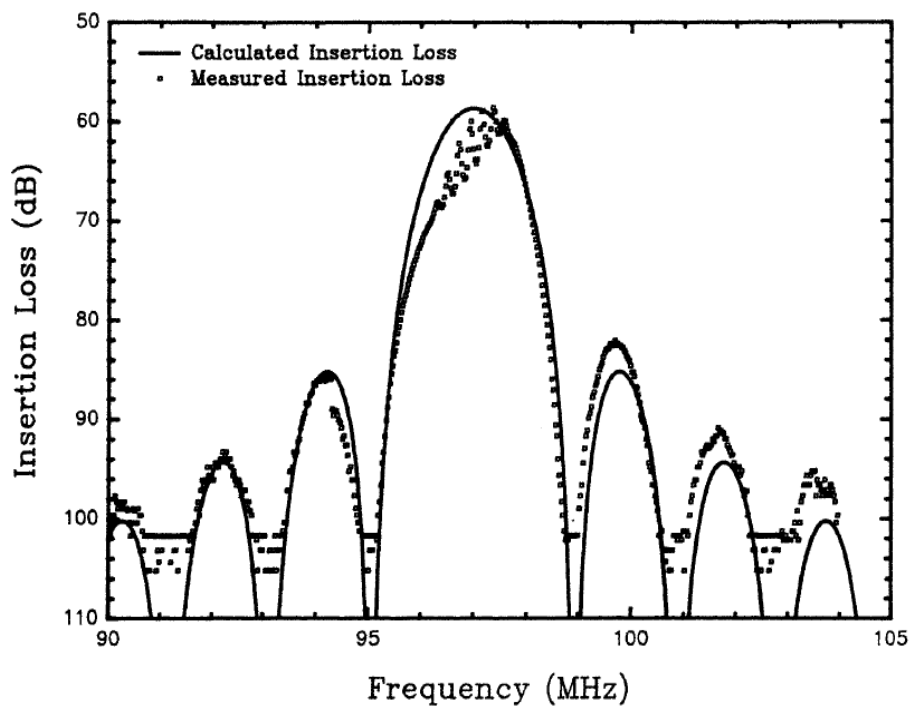


Figura 3.6. Medida de resposta em frequência entre dois IDTs.

3.3.1 – Fluxo de potência e densidade de energia:

Quando uma onda elástica se propaga por um volume, este apresenta energias potencial e cinética variáveis no tempo, pois sofre deformação. Para qualquer ponto no cristal, sua energia potencial é máxima quando a deformação for máxima sobre aquele ponto e este apresentar velocidade nula. Após isso, sua deformação vai diminuindo até zero enquanto sua velocidade vai subindo até um máximo, correspondendo a um máximo de energia cinética. Assim energia potencial e cinética se alternam como num oscilador massa-mola.

A densidade de energia cinética é definida por:

$$U_K = \frac{1}{2} \rho \sum_{i=1}^3 \left[\frac{\partial x_i}{\partial t} \right]^2 \quad (3.6)$$

A densidade de energia de deformação é definida como:

$$U_S = \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l=1}^3 c'_{ijkl} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \frac{\partial u_k}{\partial x_l} , \quad (3.7)$$

onde c'_{ijkl} são coeficientes de rigidez para um cristal rígido, ou seja, sem estar comprimido ou deformado.

A expressão 3.6 é equivalente à energia cinética $E_K = mv^2/2$, enquanto que a expressão 3.7 é exatamente a expressão de energia potencial de uma mola, pois as derivadas parciais nada mais são que a variação da posição com relação às coordenadas.

3.4 – Perturbações em propagações de ondas acústicas:

Em sensores de ondas acústicas, tipicamente são detectadas variações na velocidade ou atenuação da onda propagante quando ela interage com o material. Assim, pensamos em densidade de potência P (potência/área) e densidade de energia U (energia/volume).

Suponha um material em formato cúbico unitário pelo qual passa uma onda acústica.

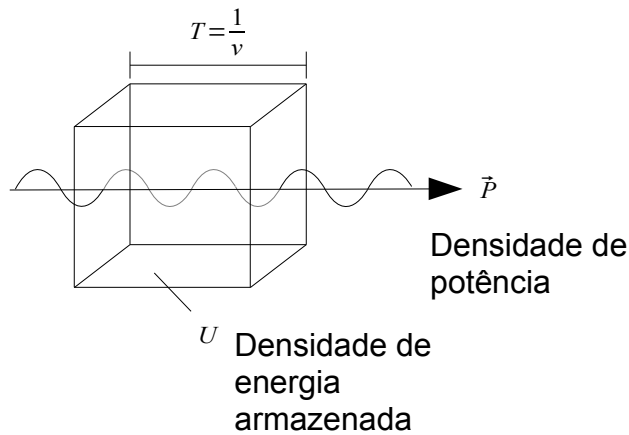


Figura 3.7. Energia armazenada em um volume depende das densidades de energia e potência.

O tempo de transição da onda pelo cubo é $T = 1/v$. Quando a onda passa pelo cubo, este armazena uma quantidade de energia igual ao tempo de transição vezes a potência incidente, ou seja, $U = P T = P/v$. Portanto:

$$P = Uv. \quad (3.8)$$

Se P for constante, então derivando implicitamente a expressão acima, obtemos:

$$\frac{\Delta v}{v_0} = -\frac{\Delta U}{U_0} = \frac{\Delta f}{f_0}, \quad (3.9)$$

onde o índice 0 indica que são valores na ausência de perturbação.

Este resultado é uma importante conclusão: uma variação na energia total do sistema leva a uma mudança de velocidade. Este é o princípio básico de funcionamento de um sensor acústico, onde alterações na velocidade são medidas e associadas às mudanças de energia do sistema causadas por fatores externos. A alteração na frequência é medida pelo segundo IDT na delay line e a resposta é uma curva do tipo apresentado na figura 3.6. Assim, monitorando $\Delta f/f_0$, teremos a resposta do sensor a um determinado estímulo.

4.1 – O sensor de bacteriófago M13:

O mercado de sensores recebeu especial atenção nos últimos anos. Produzir equipamentos de baixo custo e grande eficiência tem sido um desafio. Algo que muito se busca atualmente são sensores capazes de fazer medições em fluídos, aplicação crucial em medicina e na indústria de alimentos, por exemplo, no controle de doenças.

O sensor que apresentamos aqui é um modelo para sensores de vírus e bactérias. É um sensor bioquímico de massa, baseado na referência [8], que utiliza ondas acústica tipo Love capaz de detectar quantidades pequenas de bacteriófago M13, um vírus que infecta bactérias.

O M13 é um bacteriófago filamentosos com DNA de cadeia simples que ataca as bactérias *Escherichia coli*, as quais estão presentes em intestinos de organismos endotérmicos, tais como os seres humanos. Estas são agentes naturais da flora intestinal, sendo responsáveis pela defesa contra bactérias patogênicas e pela produção de vitamina K. O estudo de detecção do M13 está relacionado com contaminação de alimentos, poços de água, e outras fontes de contaminação alimentar.

O sensor de bacteriófago tem por objetivo determinar quantidades depositadas de M13 sobre um substrato imerso em meio líquido. Isto é obtido com a aplicação de uma camada de seu anticorpo, o AM13 (anti-M13), que funciona como um ligante para o M13. Ao se ligar com o AM13, por meio de uma reação química, o M13 adiciona sua massa à superfície, o que muda as propriedades de propagação da onda acústica no meio, que são detectadas através de mudanças de frequência de resposta do dispositivo. Este sensor funciona pelos mesmos mecanismos físicos de sensores químicos baseados em SAW, sendo, por este motivo, escolhido como modelo.

4.2 – Ondas tipo Love: o que são?

Ondas tipo Love são ondas transversais de cisalhamento. Elas produzem deformações transversalmente à sua direção de propagação e são muitas vezes classificadas como ondas SH (*shear horizontal*), conforme a figura 4.1(a).

Modos SH apresentam deslocamentos de partículas predominantemente paralelos à superfície e normais à direção de propagação (figura 4.1(b)).

A ausência de modos de vibração normais à superfície permite que essas ondas se propaguem em meios líquidos sem perder muita energia para este meio. No caso de uma onda de Rayleigh, por exemplo, que ao se propagar em meios de interface sólido-líquido, o deslocamento normal à superfície produz ondas compressoriais sobre o líquido, atenuando severamente a onda. Além disso, ondas Love podem ser geradas em frequências de centenas de MHz, o que aumenta a sua sensibilidade em comparação a outros tipos de onda acústica, como o TSM (thickness shear mode). Ondas TSM também são ondas tipo SH, mas podem ser geradas apenas em frequências de alguns MHz e são muito utilizadas em sensores biológicos de DNA [4].

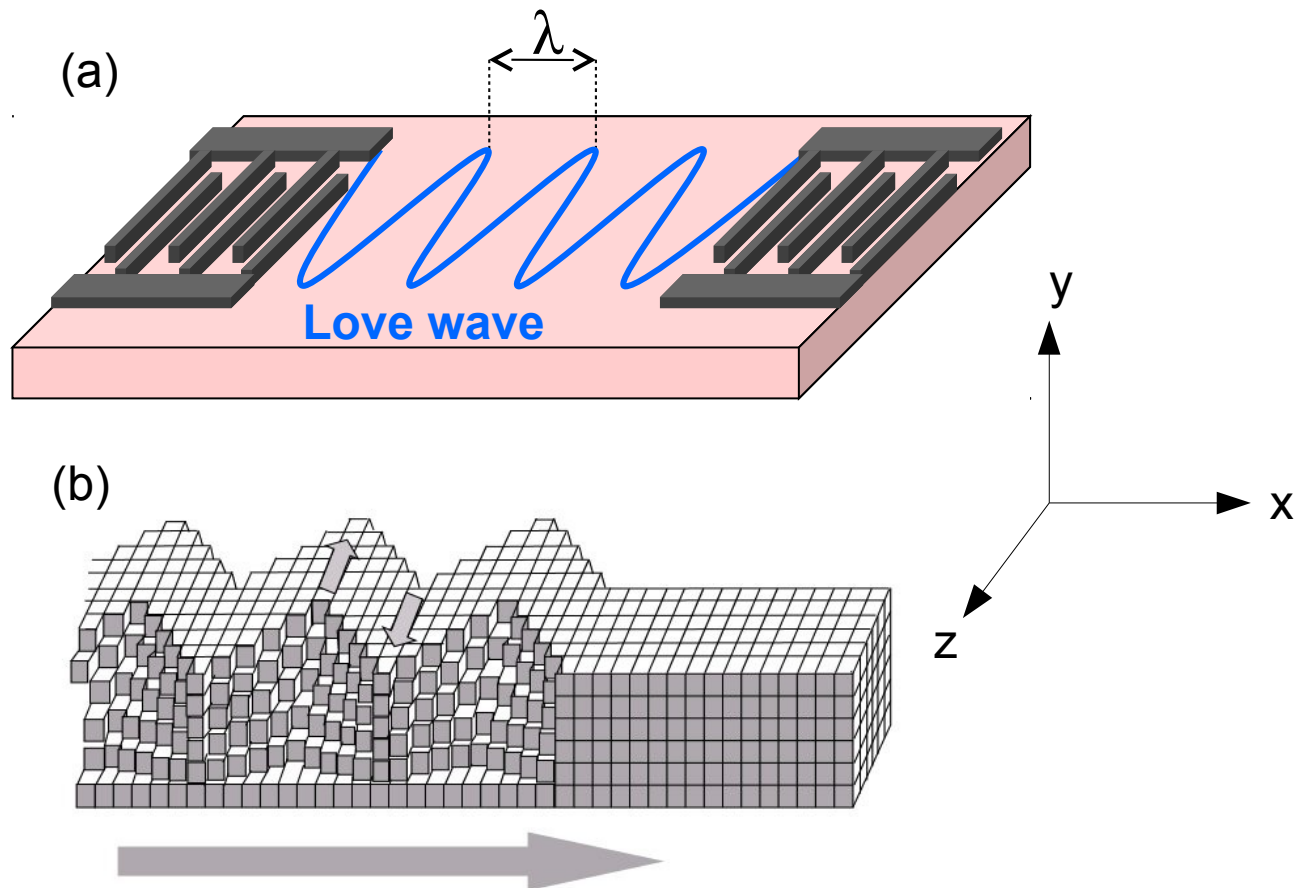


Figura 4.1. (a): Onda Love em uma configuração de IDTs. (b): Onda Love propagando sobre as primeiras camadas de um substrato.

Portanto, a principal vantagem de ondas Love em sensores biológicos é a sua aplicabilidade a sistemas líquidos. Configurações de SH-APM (*Shear Horizontal Acoustic Plate Modes*), desenvolvidos para operarem em líquidos, são compostos de substratos de quartzo que funcionam como guias de onda. Conforme a onda se propaga sobre esse meio, o substrato armazena energia de onda acústica entre as superfícies superior e inferior do substrato. Isso apresenta duas consequências imediatas:

- 1) A sensibilidade à variação de massa na superfície da configuração SH-APM depende da espessura do substrato;
- 2) Como ambas as faces do substrato estão deslocamento, a detecção pode ocorrer em qualquer superfície do substrato.

Ondas SH podem ser pensadas como uma superposição de ondas planas, de forma que o deslocamento de uma partícula associada ao n-ésimo modo de vibração e que se propaga na direção x possui apenas componente em z:

$$u_z(y) = u_{z0} \cos\left(\frac{n\pi y}{b}\right) e^{(i\omega t - \gamma_n x)}, \quad (4.1)$$

onde b é a espessura do substrato, u_{z0} é o deslocamento da partícula nas superfícies, n é o índice de modo transversal e t é o tempo. Esse modo de vibração é uma solução da equação de onda 2.15. Ele apresenta uma componente de propagação em x e um termo de penetração no cristal em y.

O termo γ_n é o número de onda, dado por:

$$\gamma_n = i \left[\left(\frac{\omega}{v_0} \right)^2 - \left(\frac{n\pi}{b} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}}, \quad (4.2)$$

onde v_0 é a velocidade de propagação não-perturbada do modo de menor ordem. A figura 4.4 mostra os primeiros modos de penetração no substrato.

Um IDT opera com maior eficiência quando sua periodicidade é igual ao comprimento de onda do modo propagante ao longo da superfície, λ_n . Portanto, a frequência ótima para os IDTs é dado pela relação $f_n = v_n / \lambda_n$, onde v_n é a velocidade de fase do n-ésimo modo propagante.

Modelando o quartzo como um meio isotrópico, o n-ésimo SH-APM será gerado mais eficientemente por IDTs com frequência aproximadamente igual a:

$$f_n = \frac{v_0}{\lambda} \left[1 + \left(\frac{n\lambda}{2b} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}} \quad (4.3)$$

A equação 4.3 dá uma aproximação para o espectro encontrado em um substrato de quartzo não-perturbado. A presença de IDTs, por exemplo, perturba a velocidade de fase, e, portanto, a frequência de excitação de cada modo.

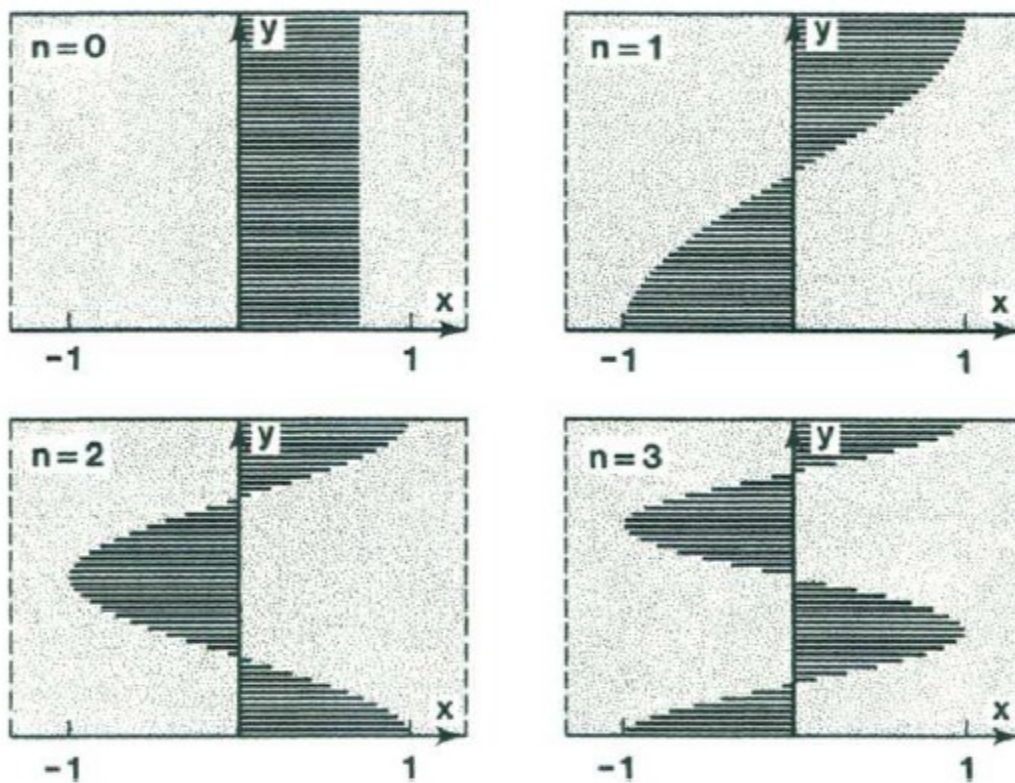


Figura 4.2. Perfis de penetração no substrato (em y) dos quatro primeiros modos isotrópicos SH-APM [3].

Quando massa é depositada sobre qualquer superfície do quartzo, ela oscila sincronamente com o quartzo sob influência da onda passante.

Uma camada de massa depositada na superfície resulta em um aumento de energia cinética da mesma que ocorre em contraste com uma diminuição da velocidade de propagação da onda, segundo a expressão:

$$\frac{\Delta f}{f_0} = \frac{\Delta v}{v_0} = -c_f \rho_s, \quad (4.4)$$

onde c_f é a sensibilidade de massa e ρ_s é a densidade de massa superficial (massa/área).

Ondas tipo Love apresentam uma vantagem que diz respeito à sensibilidade do sensor. Estas operam com frequências em torno de 100MHz, que é muito alta frequência para essa aplicação. Quanto maior a frequência de uma onda, a menor variação será detectada. Imagine que, para uma variação constante, aumentemos ou diminuamos a frequência da onda. O que ocorre é que para maiores frequências essa razão é menor. Em termos de resolução, essa razão é como um degrau de escada. Quanto menores forem os degraus, maior será a sensibilidade do sensor. Se os degraus forem muito grandes, pequenas ou grandes variações serão vistas da mesma forma pelo sensor, o que não é desejável.

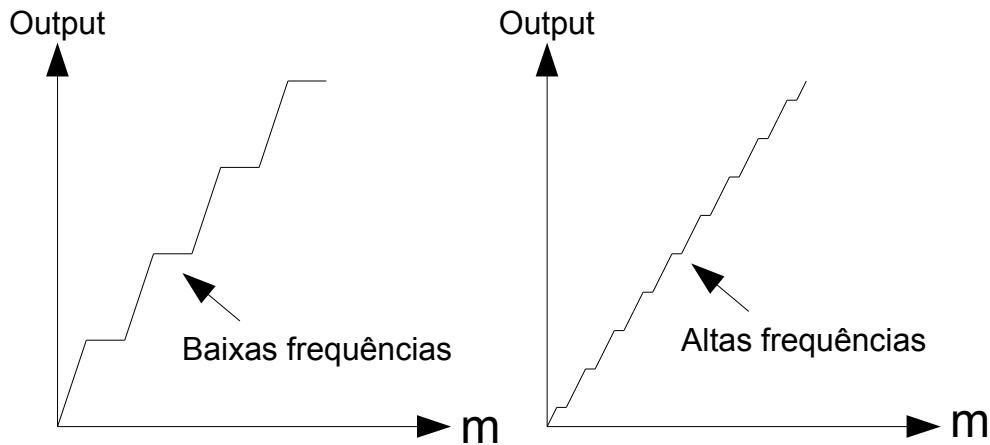


Figura 4.3. Gráfico qualitativo e exemplificado de sensibilidade do sensor em função de baixas e altas frequências.

4.3 – Teoria e propagação de ondas tipo Love no biosensor:

O mecanismo de propagação de ondas acústicas do tipo Love neste biosensor consiste basicamente de uma delay line sobre um substrato de quartzo, revestido por uma camada de SiO_2 , a camada guiante da onda. O sensor é composto por três camadas: A primeira delas, e mais abaixo, está o substrato (quartzo). Sobre o substrato está a camada de guiante de onda, SiO_2 , o qual também reveste o sensor contra o fluido, pois entre as camadas de quartzo e SiO_2 estão os IDTs que poderiam ser corroídos. Já sobre esta última, está a película reagente, composta de anticorpos AM13.

Ao longo do tempo de exposição, a reação entre M13 e AM13 depositará massa sobre o sensor e será observada uma variação na velocidade de fase da onda tipo Love. Os IDTs são posicionados paralelamente ao plano cristalográfico do quartzo, produzindo ondas que se propagam na direção de x , conforme a figura 4.4.

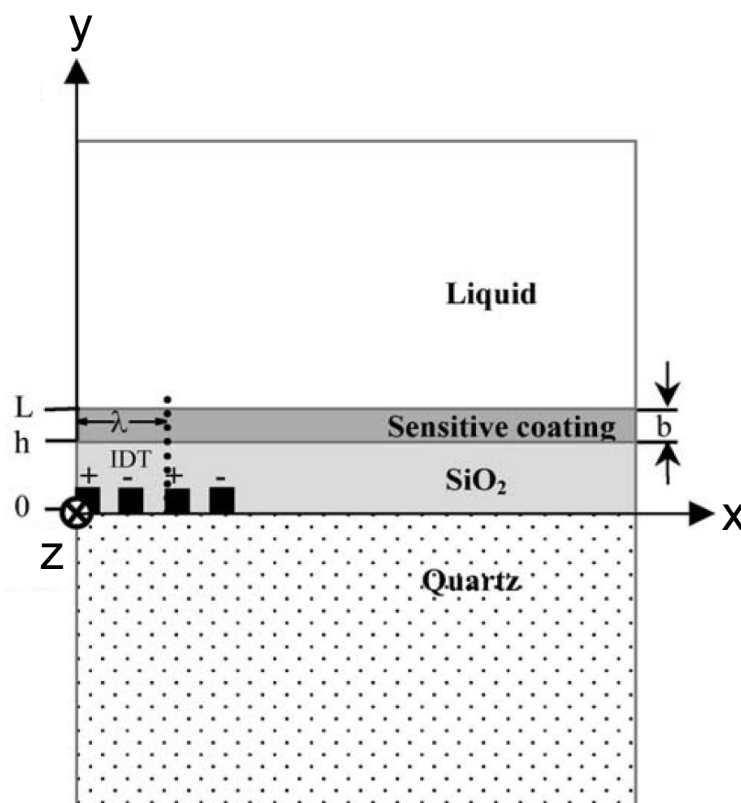


Figura 4.4. Configuração básica de uma delay line com ondas tipo Love e um revestimento de filme sensível [8].

A camada de SiO₂ não afeta a polarização da onda SH, pois ele é um guia de onda. Além disso, a boa sensibilidade da onda tipo Love consiste no confinamento de energia da onda na camada guiante de SiO₂, a qual deve ter espessura bem fina, da ordem de alguns micrômetros.

A formulação teórica para esse sensor envolveu um modelo de multicamadas composta de:

- Substrato piezoelétrico anisotrópico semi-infinito (quartzo);
- Guia de onda isotrópica de SiO₂ ;
- Película reagente isotrópica (*sensitive coating*);
- Meio líquido newtoniano semi-infinito e isotrópico.

Cada camada é caracterizada pelas constantes físicas do material: coeficiente de rigidez, $c_{ij,s,h,b,L}$; densidade, $\rho_{s,h,b,L}$; viscosidade do fluido η .

Os índices s , h , b , e L correspondem às camadas da figura 4.4: s para o substrato, h para a camada guiante, b para a película reagente e L para o conjunto película-camada guiante.

A onda se propaga na direção x , conforme a figura 4.4, e foram consideradas as condições de contorno nas interfaces e no infinito para formular a expressão para a velocidade de fase da onda.

Tem-se a expressão teórica [8]:

$$k \chi_b b = -\arctg \left[\frac{c_{44h} \chi_h}{c_{44b} \chi_b} \operatorname{tg} \left[k \chi_h h - \arctg \left(\frac{c_{44s} \chi_s}{c_{44h} \chi_h} \right) \right] \right] - \frac{1}{2} \arctg \left(\frac{k_L V_p \eta}{c_{44b} \chi_b} \right), \quad (4.5)$$

onde χ são valores definidos pelas seguintes relações:

$$\chi_s = C_a \sqrt{1 - \left(\frac{V}{V_s} \right)^2} \quad (\text{substrato}) ; \quad (4.6)$$

$$\chi_h = \sqrt{\frac{V^2}{V_h^2} - 1} \quad (\text{camada guiante}) ; \quad (4.7)$$

$$\chi_b = \sqrt{\frac{V^2}{V_b^2} - 1} \quad (\text{película reagente}) , \quad (4.8)$$

onde V é velocidade de propagação, $V_{s,h,b}$ é a velocidade de *bulk* da onda SH no substrato, na camada guiante e na película reagente e C_a é uma constante anisotrópica definida apenas para materiais anisotrópicos (neste caso, o substrato), dada por:

$$C_a = \sqrt{\frac{c_{66s}}{(c_{44s} - c_{46s}^2)} \left(\frac{1}{c_{44s}} \right)^2}, \quad (4.9)$$

onde $C_a = 1$ para materiais isotrópicos.

Usando-se relação de dispersão 4.5, é possível estimar a variação na velocidade de fase, V_p da onda. Note que, se $\eta = 0$, a expressão corresponderia a um sensor imerso em um gás.

4.4 – Sensibilidade à massa:

Na película reagente o M13 se liga ao seu anticorpo, passando de um estado líquido não-ligado a um estado sólido ligado. Ao ocorrerem estas reações, há o aumento na densidade da película, $\Delta\rho_b$, devido ao acúmulo de massa Δm sobre a mesma. A este aumento está associada uma mudança de fase da onda, ΔV_p .

A sensibilidade da velocidade de fase devido a esse efeito de massa sobre a película de área A é dada pela seguinte expressão, que é outra forma de escrever a equação 4.4:

$$c_f = \frac{\Delta V_p}{V_{p0}} \frac{A}{\Delta m} = \frac{\Delta V_p}{V_{p0}} \frac{1}{\Delta \rho_b b} \quad (4.10)$$

Na expressão 4.10, $\Delta V_p = V_p - V_{p0}$, onde V_p e V_{p0} são as velocidades de fase da onda quando a película tem densidades $\rho = \rho_b$ e $\rho = (\rho_b + \Delta\rho_b)$, respectivamente.

O grupo que pesquisou este sensor, utilizando a equação 4.5 e alguns parâmetros físicos deste sensor (mais detalhes ver [8]) são capazes de calcular a sensibilidade esperada para o sensor que desenvolveram. O resultado é apresentado na figura 4.5, onde a sensibilidade é calculada para diferentes comprimentos de onda, isto é, frequência de operação do sensor.

A figura 4.6 ilustra alguns parâmetros dos IDTs que compõem a delay line utilizada. A tabela 4.1 mostra quais são esses valores para este sensor em específico.

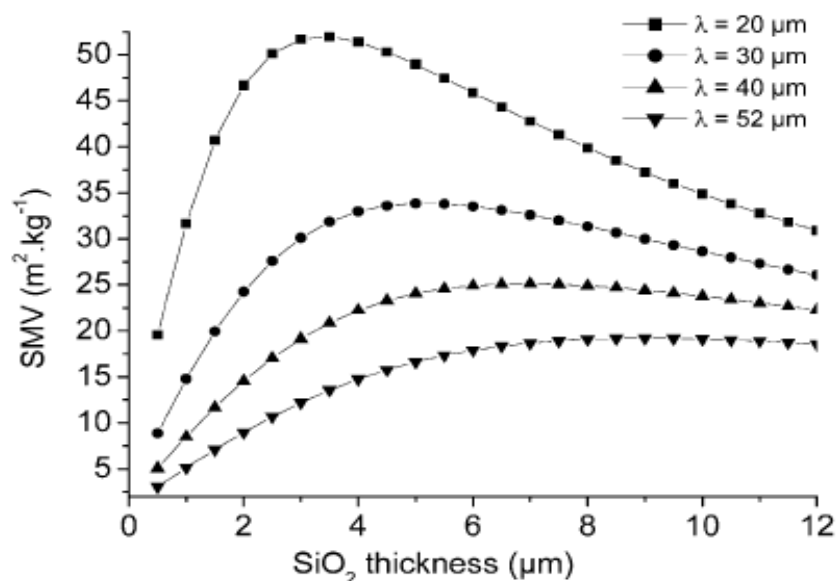


Figura 4.5. Influência do comprimento de onda e da espessura de SiO₂ sobre a sensibilidade do sensor.

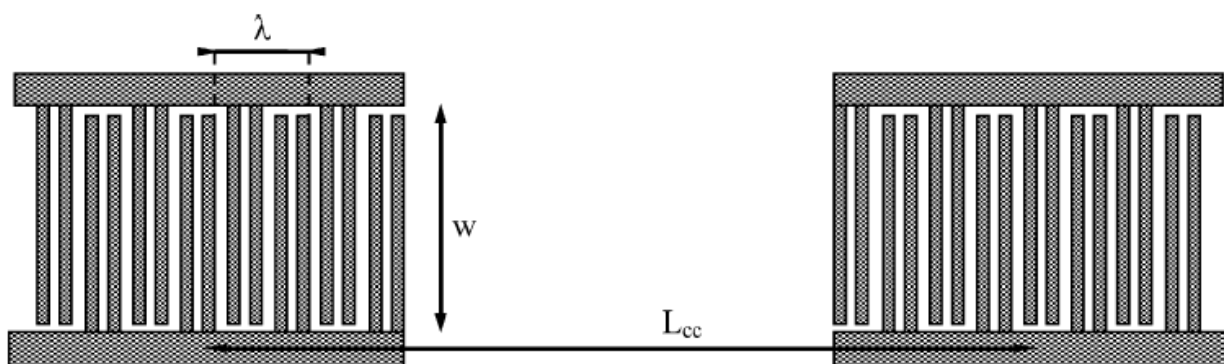


Figura 4.6. Parâmetros geométricos de uma delay line de ondas tipo Love.

Tabela 4.1 – Especificações da delay line

Substrato: quartzo	IDTs - alumínio				Camada guiante: SiO ₂
	λ(μm)	W (mm)	N	L _{cc}	h (μm)
	52	50 x λ = 2,6	50	125 x λ = 6,5	6

A figura 4.6 mostra IDTs com N pares de dedos onde W é a abertura, λ é a periodicidade do IDT (correspondente ao comprimento de onda) e L_{cc} é a separação entre os centros dos IDTs.

O parâmetro N é importante, pois permite atenuar ondas acústicas refletidas sob os IDTs, os parâmetros W e L_{cc} são determinísticos a respeito da área de sensibilidade do sensor e a relação de λ com a sensibilidade está ilustrada nos gráficos da figura 4.5.

Os IDTs foram feitos de alumínio por processo de fotolitografia, enquanto que a camada guiente de SiO₂ foi depositada sobre o substrato de quartzo por um processo de *Plasma Enhanced Chemical Vapor Deposition* (P.E.C.V.D), que permite a obtenção de uma camada de poucos micrômetros a baixas temperaturas (o quartzo deve ser mantido abaixo de suas temperaturas de transição de fase). Para a película reagente, utilizou-se de um polímero chamado Polimetilmetacrilato.

Uma observação importante a respeito de montagens com soluções biológicas refere-se à salinidade dessas soluções, a qual atribui-se condutividade elétrica, podendo ser um problema à configuração do oscilador. Outro fator diz respeito à corrosões do alumínio que compõe os IDTs.

4.5 – Resposta dos sensores ao processo de montagem:

A junção das estruturas eletrônicas e biológicas do sensor requer o preparo da película reagente em um meio favorável a ocorrer a reação desejada. Para isso, o sistema passa por um complicado processo de banhos esterilizantes e deposições de AM13. Na figura 4.7, consiste nas etapas de aplicação de etanol, PBS(*Phosphate Buffered Saline*) e DTPS (*Dithiobissuccinimidyl- propionate*). A figura 4.7(a) mostra a resposta do sensor durante o processo de esterilização com os diferentes reagentes. A figura 4.7(b) mostra um *zoom* nesta resposta ao se inserir o anticorpo AM13. Uma mudança na frequência em torno de -24KHz é observada, sendo que, a partir de 300 minutos a frequência satura. Esta saturação corresponde à distribuição do AM13 sobre toda a área do sensor, o que indica que o sensor está pronto para ser utilizado.

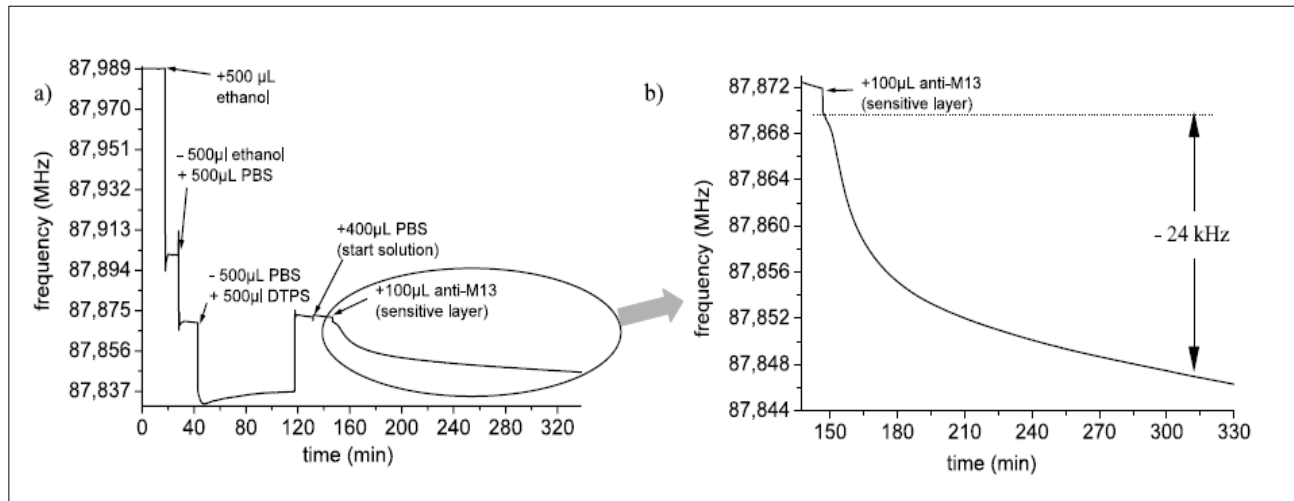


Figura 4.7. Sinal acústico durante a preparação da película reagente.

4.6 – Resposta dos sensores à reação entre M13 e AM13:

A figura 4.8 mostra a resposta em frequência do sensor quando o M13 é depositado sobre o mesmo. Observa-se que o comportamento é muito similar ao da figura 4.7(b). O sistema passa por uma breve fase de adaptação (fase 1, na figura) de cerca de 30s, em seguida, na fase 2, começa a reação entre M13 e o AM13 depositado sobre a película reagente. Segundo os autores, o sistema leva em torno de 100 minutos para que o M13 ocupe a maior parte da área disponível do sensor. Isto é expressado pela leve atenuação da frequência de resposta do IDT após os 100 minutos.

Por fim, o gráfico da figura 4.9 mostra a resposta em frequência do sensor biológico para algumas concentrações de M13. Analisando esse gráfico, observa-se que, para maiores concentrações de M13, o sinal acústico é maior.

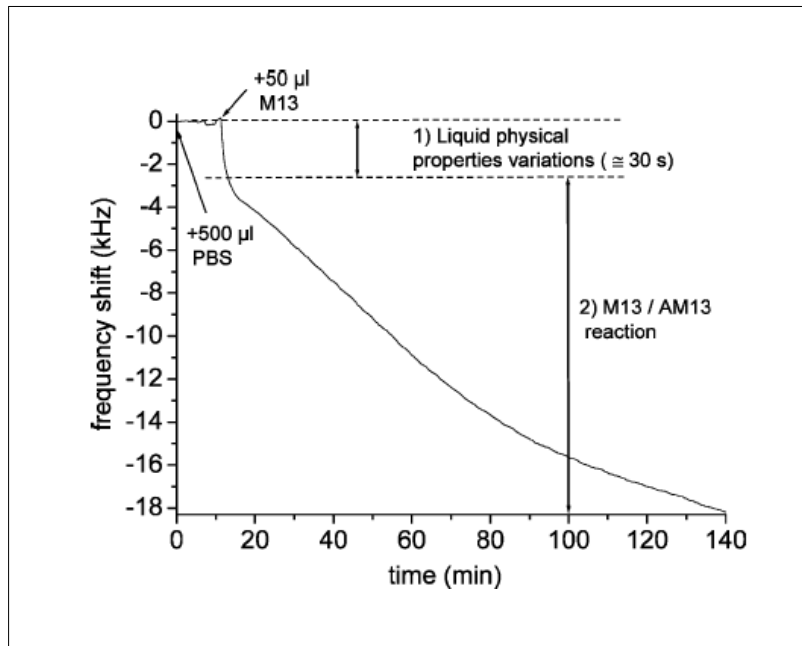


Figura 4.8. Sinal acústico do bacteriófago M13.

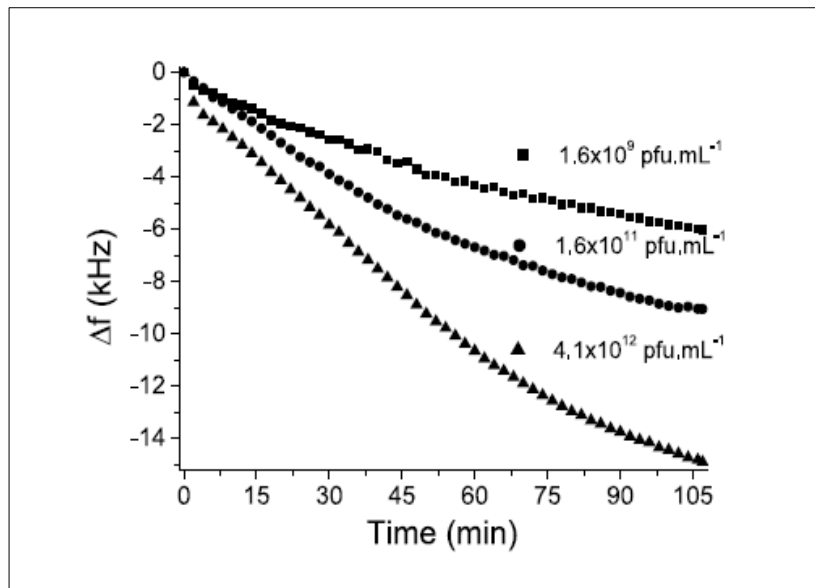


Figura 4.9. Sinal acústico do M13 para diferentes concentrações .

Isso é esperado, pois aumentando-se os reagentes, aumenta-se o número de reações e maior massa é depositada sobre a película, o que provoca maior mudança na velocidade de fase. Para pequenas concentrações, essa variação torna-se mais expressiva após decorrer muito tempo, pois nota-se que, diminuindo as concentrações, a curva começa a tornar-se mais suave. Para o funcionamento do sensor, no entanto, não é necessário esperar um tempo longo (acima dos 105 minutos mostrados na figura 4.7(b)) para determinar a concentração do vírus M13 em um determinado sistema. Como vimos na figura 4.9, esta concentração pode ser obtida pelo coeficiente angular da resposta em frequência do dispositivo. Segundo os autores, 60 minutos já são suficientes para este cálculo ser realizado com boa precisão. É importante destacar que 60 minutos é um tempo bastante curto para sensores biológicos em geral, que normalmente precisam de tempos bem maiores para fornecerem resultados precisos.

Ao que diz respeito à resposta, a sensibilidade máxima demonstrada foi de -1,2 KHz em 10 minutos mas pode ser consideravelmente melhorada, pois os autores não utilizaram um sistema preciso de controle de temperatura do sistema. Além disso, o comprimento de onda Love utilizado no experimento foi de 52 μm , o que, de acordo com a figura 4.5, corresponde à menor sensibilidade obtida através do modelo teórico apresentado pelos autores.

Conclusão

Os primeiros capítulos deste trabalho trataram de teoria. Neles, tratamos matematicamente a propagação de ondas acústicas em sólidos cristalinos e obtivemos um conjunto de equações (2.15) que, juntamente com as condições de contorno de cada caso, descrevem os possíveis modos de propagação de onda nestes materiais. Estes resultados formam a base para o estudo dos sensores de ondas acústicas.

Em relação aos sensores de ondas acústicas, apresentamos o IDT e a delay line, além de comentar sobre os processos de fabricação e caracterização de IDTs, e mostramos um sensor biológico do bacteriófago M13 em funcionamento, ilustrando sua aplicação, o tipo de onda utilizada e suas vantagens, conforme o tratamento teórico apresentado nos primeiros capítulos. Apesar de necessitar otimização, o experimento foi bem sucedido na medida em que demonstrou o princípio de detecção ao qual se propunha e na medida em que se mostrou bem mais rápido e eficiente na detecção do M13 em comparação com os sensores desenvolvidos até aquele momento. Outro destaque é a capacidade de resposta a altas concentrações de M13, conforme a figura 4.9. O sensor com onda tipo Love mostrou-se extremamente eficiente não apenas por ser aplicável a sistemas líquidos, mas também por sua sensibilidade.

Em geral, concluímos que os sensores de ondas acústicas são ferramentas extremamente poderosas no sentido em que apresentam grande potencial, pois apresentam baixo custo, boa sensibilidade e resolução, além de serem muito flexíveis em termos de aplicação, o que tem atraído muitos pesquisadores por todo o mundo.

Bibliografía

- [1] Cohen-Tannoudji. “Quantum mechanics”. Paris: Wiley-vch, 1992.
- [2] Royer, D.; Dieulesaint, E., “Elastic Waves in Solids I: Free and guided propagation”. New York: Springer, 2000.
- [3] Ballantine, D.S., Martin, S.J., Ricco, A.J., Frye, G.C., Wohltjen, H., White, R.M., Zellers, E.T., “Acoustic wave sensor theory, design, and physico-chemical applications”. Academic Press, San Diego 1997;
- [4] Maurício M. de Lima Jr and Paulo V. Santos “Modulation of photonic structures by surface acoustic waves” *Rep. Prog. Phys.* **68** 1639 (2005);
- [5] Rocha-Gaso, M.-I.; March-Iborra, C.; Montoya-Baidés, Á.; Arnau-Vives, A. Surface Generated Acoustic Wave Biosensors for the Detection of Pathogens: A Review. *Sensors* **2009**, *9*, 5740-5769;
- [6] N. Barié *et. Al* *Talanta* **62**, 71 (2004);
- [7] O.D.D. Couto Jr. *et. al.* *Phys. Rev. Lett.* **98**, 036603 (2007);
- [8] Tamarin O., Comeau S., Dejous C., Moynet D., Riebre D., and Beziam J., “Real time device for biosensing: design of a bacteriophage model using love acoustic waves. ” *Biosens. Bioelectron.* **18**, 755–763 (2003).