

Desarrollo de un sistema biosensor opto-mecánico basado en cantilevers



Tesis Doctoral E. David Fariña Santana

Directores: Laura M. Lechuga Mar Álvarez José Ramón Sendra

Las Palmas de Gran Canaria, Julio 2014

Anexo I

D. PEDRO PÉREZ CARBALLO SECRETARIO DEL INSTITUTO UNIVERSITARIO DE MICROELECTRÓNICA APLICADA DE LA UNIVERSIDAD DE LAS PALMAS DE GRAN CANARIA,

CERTIFICA,

Que el Consejo de Doctores del Departamento en su sesión de fecha.....tomó el acuerdo de dar el consentimiento para su tramitación, a la tesis doctoral titulada **"Desarrollo de un sistema biosensor opto***mecánico basado en cantilevers"* presentada por el doctorando D. E. David Fariña Santana y dirigida por la Doctora Laura M. Lechuga Gómez, la Doctora M. Mar Álvarez Sánchez y el Doctor José Ramón Sendra Sendra.



Instituto: INSTITUTO UNIVERSITARIO DE MICROELECTRÓNICA APLICADA

Programa de doctorado: INGENIERÍA DE TELECOMUNICACIÓN AVANZADA

Título de la Tesis

DESARROLLO DE UN SISTEMA BIOSENSOR OPTO-MECÁNICO BASADO EN CANTILEVERS

Tesis Doctoral presentada por D/Dª E. DAVID FARIÑA SANTANA

Dirigida por el Dra. D^a. <u>LAURA M. LECHUGA GÓMEZ</u> Codirigida por el Dra. D^a. <u>M. MAR ÁLVAREZ SÁNCHEZ</u> Codirigida por el Dr. D. <u>JOSÉ RAMÓN SENDRA SENDRA</u>

La Directora, La Codirectora, El Codirector, El Doctorando,

(firma)

(firma)

(firma)

(firma)

Las Palmas de Gran Canaria, a 18 de Julio de 2014

Formatted for LATEX by MultiMarkdown

A mis abuelos...

Resumen

El presente trabajo expone la puesta en marcha de un sistema biosensor basado en microcantilevers de óxido de silicio como elemento transductor, clasificado como biosensor opto-nanomecánico.

Los biosensores basados en transductores mecánicos analizan la alteración de ciertos parámetros físicos en su estructura debido a las reacciones de interacción molecular producidas en sus superficies. Uno de los transductores mecánicos más empleados es el cantilever, una estructura en voladizo anclada en uno de sus extremos. Las interacciones en la superficie del cantilever se traducen en dos efectos, su deflexión y/o un cambio en su frecuencia de resonancia, lo que determina los dos modos de operación de los sistemas nano-mecánicos basados en cantilever: estático y dinámico.

El sistema de detección de la deflexión de los cantilever más común es la configuración tradicional de Meyer y Amer, donde un haz láser incide en el extremo libre del cantilever y su reflejo es recogido por un sensor de posición (PSD) o un fotodiodo de cuadrante detectando su movimiento. Esta solución posee la ventaja de ser una técnica muy sensible y con una implementación sencilla, aunque su sensibilidad depende en gran medida del punto de incidencia del haz en el cantilever y su capacidad de realizar medidas multiplexadas es bastante compleja.

Este trabajo de investigación que se presenta pretende aportar una solución al problema de integración de las matrices de biosensores micromecánicos. La solución desarrollada en este trabajo se basa en transformar el microcantilever en una guía de onda por la que se propaga la luz, y detectar su movimiento empleando una guía de onda cercana a su extremo libre. El movimiento del microcantilever modifica el acople de la luz entre ambas guías siendo detectada por un fotodetector, por ello esta solución se ha bautizado como *cantilever óptico*. La principal ventaja de esta solución es su capacidad de integración.

El aumento de la sensibilidad pasa por la optimización de las dimensiones del dispositivo, para lo que se han realizado simulaciones que combinan la propagación de la luz con la deflexión del cantilever. A partir de estos estudios, se han fabricado los dispositivos en Sala Blanca, para finalmente caracterizarlos en un sistema experimental automatizado, controlado desde una aplicación que muestra y almacena la respuesta del dispositivo en tiempo real.

La aplicación como biosensor del dispositivo diseñado y fabricado se verifica mediante la realización de tres procesos de interacción molecular sobre una de las superficies del cantilever óptico, generando una diferencia de estrés superficial que provoca la deflexión del dispositivo. Los procesos realizados son: la activación química de la superficie empleando tioles *SH-PEG-COOH*, la creación de monocapas nanométricas de polielectrolítos, y finalmente la detección de la hormona de crecimiento. Estos procesos validan el uso del transductor opto-mecánico fabricado como biosensor, y por lo tanto su viabilidad para el desarrollo de sistemas completamente integrados que integren los elementos necesarios para la creación de un dispositivo *lab-on-a-chip*.

Agradecimientos

Este trabajo no hubiera sido posible sin la colaboración de muchas personas que con su apoyo y confianza me han transmitido la fuerza necesaria para terminarlo, a todos ellos muchísimas gracias.

Me gustaría comenzar agradeciendo a mis directores, cada uno ha sabido aportar lo mejor de si, Laura por su confianza y apoyo incondicional, Mar por su visión práctica de materializar las ideas como nadie lo hace y a José Ramón por mostrarme un camino apasionante y ver mas allá de lo que muchos somos capaces, gracias a los tres.

Gracias al IUMA y a su director Antonio Nuñez por todo el apoyo recibido desde la distancia, al Ciber-BBN, al Institut Català de Nanociència i Nanotecnologia (ICN2) por la financiación económica sin la cual este trabajo no hubiera sido posible.

Me gustaría agradecer especialmente a Carlos Dominguez por su experiencia e implicación en la fabricación de los dispositivos, por despejar el camino de dudas para volver a creer en el dispositivo. Y por supuesto gracias a quien considero mi "Mentor", Alfonso por saber transmitir el conocimiento como nadie y el valor del trabajo bien hecho.

Sin duda agradecer al grupo nanoB2A, a los que están y a los que se han ido, cada uno forma parte de este trabajo de una forma u otra, gracias por el continuo apoyo en el día a día. A los de siempre Boja, Ana, Xavi, Silvia, Orlando, Laurita, Cesar y María gracias por mezclar la amistad con el trabajo, gracias a "la banda" Iraís, Jesús, Daniel y Sam por darle el toque picante al grupo, a las nuevas incorporaciones Sonia, Carlos y Joel, a las chicas de bimodales Stefania y Daphne, por esos debates de óptica comparando ambos proyectos y por estos últimos meses de café y escritura. Por supuesto a mis hermanos Bert y David, espero que nunca se terminen nuestras ideas para conquistar el mundo, y mis "cuñadas" Rebeca y Mari Carmen, por ponerme siempre los pies en la Tierra y dar importancia a lo que realmente merece la pena.

A mis amigos de siempre Teo, Xerach y Jose por no cambiar en todos estos años, a mi "socio" Jorge por su paciencia y por discutirme siempre las cosas, he aprendido muchísimo, a mi primo Dani, por ser como un hermano.

Y por último a los verdaderos sufridores de esta aventura, a los que más quiero, a mi familia, mi padre por hacerme creer en lo imposible y enseñarme a luchar hasta alcanzarlo, a mi madre por ser mi mejor amiga y estar siempre dispuesta a todo, a mi hermano Javi y mi "hermana" Mónica, por la alegría con la que siempre me abrazan, a Juan y Pepita por tratarme como un hijo, y a ti Montse, por todos estos años de alegría en los que los buenos momentos han borrado los malos, por tu paciencia infinita y por tus ganas de hacer siempre lo mejor para los dos. A todos son el mejor tesoro que podría encontrar, gracias.

Índice general

	Resumen		VII
	Agradeci	mientos	XI
Índi	ce general		XIII
Índi	ce de figura	as	XVI
Índi	ce de tabla	s	XXII
	Listado d	le publicaciones y patentes	1
	Motivatio	on y objetivos	5
	Estructu	ra de la memoria	7
1	Biosenso	res	9
	1.1. Intr	oducción general	9
	1.2. Sist	emas Micro-Mecánicos	13
	1.3. Bio	MEMS	13
	1.3.1.	Biosensores basados en cantilevers	14
	1.3.2.	Técnicas de detección de las respuesta nano-	
		mecánicas	17
	1.3.3.	Dispositivos Micro-Opto-Mecánicos	20
2	Física de	los dispositivos opto-mecánicos	23
	2.1. Mee	cánica y dinámica del cantilever	23
	2.1.1.	Modo de operación estático	24
	2.1.2.	Modo de operación dinámico	34
	2.2. Pro	pagación de la luz en guías de ondas	42
	2.2.1.	La luz como onda electromagnética	42
	2.2.2.	Reflexión en una interfaz	46
	2.2.3.	Guías de onda	49

2.2	2.4. Acoplamiento de modos
\mathbf{Simu}	lación y diseño de los cantilevers ópticos
3.1.	El cantilever óptico
3.2.	Parámetros del cantilever óptico
3.3.	Flujo de trabajo de las simulaciones
3.4.	Simulaciones mecánicas
3.4	4.1. Cálculos iniciales
3.4	4.2. Descripción del modelo de simulación
3.4	4.3. Simulaciones mecánicas
3.5.	Simulaciones ópticas
3.5	5.1. Modos de propagación
3.5	5.2. Interfaz guía-cantilever
3.5	5.3. Distancia guía-cantilever
3.5	5.4. Interfaz cantilever-guía de salida
3.5	5.5. Estudio del índice de refracción
3.5	5.6. Estudio de la deflexión del OWC
3.5	5.7. Conclusiones simulaciones ópticas
3.6.	Conclusiones generales de simulación $\ldots \ldots \ldots \ldots$
Fabri	cación de los cantilevers ópticos
4.1.	Consideraciones para el diseño de las máscaras
4.2.	Descripción de las máscaras litográficas
4.3.	Contenido del juego de máscaras
4.4.	Proceso de fabricación
4.4	4.1. Preparación de las obleas
4.4	4.2. Definición de las guías de onda
4.4	4.3. Apertura de la ventana superior
4.4	4.4. Definición de los OWC
4.4	4.5. Liberación de los OWC
4.4	4.6. Ajuste del espesor de los OWC
4.5.	Fabricación de los cantilevers ópticos
4.6.	Caracterización estructural de los dispositivos fabricados
4.7.	Pulido de chip
~	
Siste	ma experimental: diseño, implementación y carac-
5 1	Evente de luz y sistema de enfectue
0.1. 5 0	Colde de fluie y sistema de fluidice
0.⊿. ⊑ 2	Centra de Inujo y sistema de Inuldica
0.3. 5-4	Sistema detector de senai
5.4. 5 5	
5.5.	Aplicación de control

	5.5.1. Arquitectura del software
	5.5.2. Interfaz de usuario
	5.5.3. Sistema de adquisición y tratamiento de datos
	5.5.4. Sistema automático de focalización
	5.5.5. Sistemas de medidas multiplexadas
	5.6. Caracterización del sistema experimetal
	5.6.1. Sistema de control del foco
	5.6.2. Análisis del ruido \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots
6	Evaluación del cantilever óptico como biosensor
	6.1. Caracterizacion de los OWC
	6.1.1. Caracterización de las guías de referencia
	6.1.2. Caracterización de la deflexión
	6.1.3. Resultados del cambio de índice de refracción
	6.2. Evaluación de interacciones biológicas
	6.2.1. Materiales y métodos
	6.2.2. Inmovilización de tioles
	6.2.3. Inmovilización de polielectrolitos
	6.2.4. Medida de hormona de crecimiento hGH
7	Conclusiones y perspectivas futuras
	7.1. Conclusiones generales
	7.2. Perspectivas futuras
I	Apéndices
A	Mecánica continua
	A.1. Estrés mecánico
	A.2. Tensor de estrés
	A.3. Tensor de deformación
	A.4. Relación entre el estrés y la deformación $\ldots \ldots \ldots$
в	Procesos de Fabricación
	B.1. MARC-PXA - Marcado de obleas
	B.2. NETG-GEN - Limpieza general
	B.3. NETG-SIM - Limpieza simple
	B.4. OHC-XXX - Crecimiento de óxido de silicio
	B.5. DNITAAA - Deposición estándar de 180 nm de nitruro
	de silicio
	B.6. DNITXXX - Deposición semiestandar de nitruro de

B.7.	FOTO-FCD - Fotolitografía	176
B.8.	FOTO-ESP - Fotolitografía especial	177
B.9.	FOTO-FKD - Fotolitografía doble cara	177
B.10.	GGIR-ESP - Grabado seco especial	177
B.11.	DEC-RESI - Decapado de resina	177
B.12.	DIAMIOX11 - Deposición de óxido PECVD TEOS 1:1 $% \left({{\left[{{\left[{{\left[{\left[{\left[{\left[{\left[{\left[{\left[$	177
B.13.	PGIOXXXX - Grabado seco de óxido	177
B.14.	PGIOXGUI - Grabado seco de óxido de silicio	178
B.15.	QGOXRXXX - Grabado húmedo de óxido	178
B.16.	GHUM-ESP - Grabado húmedo especial	178
B.17.	PRE-GRAV - Mejora de la resina	178
B.18.	QUAD-ESP - Grabado seco especial	178
B.19.	P601DEEP - Grabado profundo de silicio	178
B.20.	MZ550ING - Deposición de Aluminio	179
B.21.	AMRIEING - Ataque seco de ingenieria	179
B.22.	QGALCXXX - Grabado humedo de aluminio	179
B.23.	MSTMHING - Micromecanizado de silicio en TMAH $$. $$.	179
Bibliografía 18		

Listado de acrónimos

191

Índice de figuras

1.1.	Internet de las cosas (IoT)	10
1.2.	Esquema de un biosensor	10
1.3.	Sensor de Glucosa comercial	11
1.4.	Biosensores de campo evanescente: a) modo confinado en una guía: b) modo plasmónico	19
1.5.	Modos de operación del microcantilever: a) modo estático; b) modo dinámico.	12
1.6.	Sistema de detección óptica empleado en equipos de AFM	18
1.7.	Detección interferométrica.	19
1.8.	Esquema del cantilever óptico	21

ÍNDICE DE FIGURAS

1.9.	Otros diseños posteriores de cantilevers ópticos: a) guía de recogida multimodal presentado por P.G.Nordin b) cantilever óptico de polímero SU–8 presentado por M.Nordstrom	21
2.1.	Deflexión de un microcantilever cubierto con oro debido al ensamblamiento molecular sobre su superficie (Nanotechnology 21(2010) 077501)	0.4
<u> </u>	21(2010), 075501)	24
2.2.	se ejerce una fuerza F en un material.	26
2.3.	Deformación del microcantilever: a) deflexión del microcantile- ver; b) sección del microcantilever bajo deformación.	29
2.4. 2.5.	Parámetros geométricos de la deflexión de un microcantilever . Parámetros dinámicos del microcantilever: frecuencia de reso-	33
	nancia y factor de calidad	35
2.6.	Respuesta de un resonador armónico amortiguado forzado	37
2.7.	Comparativa de la respuesta de un microcantilever en líquido y	
0.0	en gas	39
2.8.	La luz como onda electromagnètica	42
2.9.	Ley de Snell, reflexion de un haz en una interfaz de dos materiales.	40
2.10.	(TE): b) transversal magnética (TM)	48
2.11	$G_{11}(s, b)$ transversar magnetica $(1, N)$. \dots	50
2.12.	Guías de ondas según la distribución del índice de refracción:	00
	a) de salto; b) gradual	50
2.13.	Guías de ondas acanaladas: a) empotradas $(strip \ embedded)$; b)	
	elevadas (<i>strip loaded</i>); c) sobrecargadas (<i>rib waveguide</i>)	51
2.14.	Estructura de la guía de onda slab	52
2.15.	Constate de propagación de los modos guiados	53
2.16.	Modos de una guía de onda slab: a) modos radiados; b) modos	
	de radiación del sustrato; c) modos guiados; d) físicamente no	
	realizable.	56
2.17.	Solución gráfica de la ecuación de dispersión para modos TE	-
	para una guía simétrica $(a=0)$, y otra asimétrica $(a=50)$.	58
2.18.	Sistema de acoplamiento de la luz en una guía de onda plana:	01
	a) acopledirecto; b) redes de difracción	61
3.1.	Principio de funcionamiento del cantilever óptico: a) vista	
	general; b) sección del dispositivo	64
3.2.	Clasificación de los parámetros del diseño del cantilever óptico.	65
3.3.	Deflexión del microcantilever en función de su espesor y longitud	68
3.4.	Frecuencia de resonancia y factor de calidad Q del microcanti-	
	lever en función de sus dimensiones.	69

3.5.	Amplitud del ruido térmico en función de las dimensiones del microcantilever	70
36	Geometría del modelo de simulación mecánico	71
3.7	Mallado del modelo de simulación	72
38	Simulación de la deflevión de un microcantilever	72
3.0	Madas da assilación del microcantilever: a) mada fundamental:	10
5.9.	h) mode de primer orden: e) mode de corrunde orden	79
9 10	b) modo de primer orden, c) modo de segundo orden	75
3.10. 9.11	Modelo I: Estructura geometrica de la estructura siab	75
3.11.	Mallado del Modelo I: a) mallado de la estructura; b) detalle	70
0.10	del mallado en la zona de entrada.	76
3.12.	Indice efectivo de la guía de onda en función de su espesor.	77
3.13.	Propagación de un modo en una guía de onda slab: a)	
	propagación de un modo; b) perfil del campo E_z para tres	
	espesores de núcleo	77
3.14.	Indice efectivo del microcantilever en función de su espesor: a)	
	medio externo aire; b) medio externo agua.	78
3.15.	Modelo II: a) interfaz entre la guía de entrada y el microcanti-	
	lever; b) detalle del mallado del modelo II	79
3.16.	Eficiencia de la interfaz guía entrada - cantilever según el medio	
	y las dimensiones de la estructura: a) agua; b) aire	80
3.17.	Perfil del campo eléctrico a la entrada de la guía y a la salida	
	del microcantilever	81
3.18.	Campo eléctrico normalizado resultado de la propagación en la	
	interfaz guía de entrada - cantilever a) $h_c = 250 \ nm$ - agua b)	
	$h_c = 250 \ nm$ - aire c) $h_c = 350 \ nm$ - agua d) $h_c = 350 \ nm$ - aire.	82
3.19.	Modelo III con margen de protección.	83
3.20.	Influencia de la distancia de seguridad L_s en la interfaz guía de	
	entrada - cantilever en función del espesor del microcantilever.	
	Se considera una guía de onda de espesor 130 nm : a) agua; b)	
	aire	84
3.21.	Campo eléctrico normalizado en la interfaz guía de entrada $(h_w =$	
	130 nm) - cantilever ($h_c = 250 \text{ nm}$) según la distancia de segu-	
	ridad: a) $0.5 \ \mu m$ b) $1 \ \mu m$ c) $2 \ \mu m$ d) $3 \ \mu m$.	85
3.22.	Modelo IV: a) dispositivo al completo: b) detalle del mallado	
-	del Modelo IV en la zona del <i>gap</i> .	85
3.23.	Eficiencia total del dispositivo respecto al espesor del microcan-	00
0.20.	tilever rodeado de agua: a) $L_a = 1 \ \mu m$: b) $L_a = 2 \ \mu m$	86
3 24	Detalle de la propagación en el <i>agn</i> : a) $h_s = 250 nm L_s = 1 \mu m$	00
5.21.	b) $h_c = 250 nm L_c = 2 \mu m^2 c h_c - 700 nm L_c - 1 \mu m^2 d$	
	$L_g = 2 \mu m, c_f n_c = 100 \mu m, d_f$	87
3 95	Influencia del índice de refracción en la respuesta del microcan	01
0.40.	tilever según su espesor	88
		00

ÍNDICE DE FIGURAS

3.26.	Problema de superposición de los nodos del mallado: a) mallado superpuesto; b) corrección del mallado.	90
3.27.	Respuesta del cantilever óptico en función del desplazamiento: a) $h_{-} = 120 \text{ nm} L_{-} = 1 \text{ um} \text{ b} h_{-} = 120 \text{ nm} L_{-} = 2 \text{ um}$	00
3.28.	a) $h_w = 150 \ nm$, $L_g = 1 \ \mu m$, b) $h_w = 150 \ nm$, $L_c = 2 \ \mu m$ Sensibilidad optica del cantilever óptico: a) $h_w = 130 \ nm$,	90
3.29.	$L_g = 1 \ \mu m$; b) $h_w = 130 \ nm$, $L_c = 2 \ \mu m$	91
3.30.	Respuesta del microcantilever multimodal ($h_c = 700 \ nm$) para distintos índices de refracción	92
3.31.	Figura de mérito en función del espesor del cantilever para las distancia de gap seleccionadas.	93
4.1.	Detalle de diseño de los $OWC v2$: a) $taper$ a la entrada del cantilever óptico b) extremo libre con dos distancias de gap	96
4.2.	Chips de cantilevers ópticos: a) primera versión; b) segunda versión.	97
4.3. 4.4.	Situación de los motivos de alineamiento en la oblea. \ldots \ldots Máscaras 1 <i>GUIDES N2</i> : a) motivos de un chip; b) motivos de alineamiento; c) detalles de la guía en la zona del microcantilever, con la información de la longitud y distancia da con del microcantilever.	98
4.5.	Máscaras 2 <i>WINDO N3</i> : a) motivos de un chip; b) motivos de alineamiento; c) motivo de la ventana superior en la zona del microcantilever (guías en color gris)	100
4.6.	Máscaras 3 <i>CANTIS N4</i> : a) motivos de un chip; b) motivos de alineamiento: c) motivo del microcantilever (guías en colo gris).	100
4.7.	Máscaras 4 <i>BCWIN N6</i> : a) motivos de un chip; b) motivo de la ventana inferior para taladrar la oblea (guías en colo gris)	101
4.8.	Máscara de chips tipo $OWC-1$: a) detalle de la ventana; b) detalle de un grupo de microcantilevers con diferentes distancia	100
4.9.	de gap Máscara de chips tipo OWC 4 con distintas longitudes de captiloures	102
1 10	Proceso completo de fabricación de los cantilevers ónticos	104
1.10. / 11	Resultado del proceso de fotolitografía de las guías de ondas	111
4.11. 4.19	Detalle de la distancia de <i>gan</i> : a) microcantilever con distancia	111
1.14.	de gap de 1 μm ; b) microcantilever con distancia de gap de 2 μm .	112

4.13.	Grabado de los microcantilevers: a) microcantilever con distan-	
	cia de gap de 1 μm ; b) microcantilever con distancia de gap de	119
1 1 1	$2 \mu m$.	110
4.14. 4 15	Besultado de la fabricación de los dispositivos: a) oblea con	115
1.10.	43 <i>chins</i> : b) <i>chin</i> con 18 cantilever óptico (OWC) y guías	
	de referencia: c) imagen de microscópio electrónico de barrido	
	(SEM) de la zona de la ventana con los cantilevers ópticos	115
4.16.	Imagen de SEM de los cantilevers ópticos: a) Detalle de la	
	distancia de gap y la deflexión del OWC; b) Conjunto de	
	cantilevers con distancia de gap de 0 μm , 1 μm y 2 μm	116
4.17.	Deflexión inicial de los OWC: a) longitud 100 μm ; b) espesor en la zona central de OWC de longitud 100 μm ; c) longitud 200 μm	
	d) espesor en la zona central de OWC de longitud 200 μm	117
4.18.	Diferencias del espesor del microcantilever generado por el	
	sobre-ataque del silicio: a) imagen SEM de un microcantilever;	
	b) interferencia causada por el gradiente de espesor del	
	microcantilever.	118
4.19.	Efecto del sobre-ataque producido en la fabricación de los	
	dispositivos: a) esquema del sobre-ataque; b) guía de entrada	110
1.00	en voladizo; c) guia de entrada defectuosa	119
4.20.	Estado de las guías de entradas debido al ataque profundo de	110
1 91	SIIICIO	119
4.21.	chips	120
4.22.	Proceso del pulido de las entradas y salida de las guías a) previo	120
	al pulido: b) después del pulido	121
4.23.	Mejora introducida al aplicar el pulido óptico a las guías de	
	entrada y salida (Medidas realizadas empleando el sistema ex-	
	perimental del necuaciónnsecciónnsecciónnsecciónndiceapéndi-	
	$ceCapítulo 5). \dots \dots$	121
5 1	Diagrama de bloques del sistema experimental	194
5.2	Componentes mecánicos del sistema experimental	124
5.3	Sistema de fuente de luz y control de enfoque	124
5.4.	Sistema central donde se situa la celda de fluio con el chip	120
0.1	de microcantilevers: a) elementos del subsistema; b) corte	100
	transversal de la celda de flujo.	126
5.5. 5. <i>c</i>	Sistema detector del haz de respuesta del cantilever óptico	128
ə.0.	Sistema experimental empleado para la caracterización y	100
57	Diagrama LIMI, de agragaciones de la aplicación de control	129
5.7.	Diagrama UML de agregaciones de la aplicación de control	130

5.8.	Diagrama UML de actividades de la aplicación
5.9.	Interfaz de usuario de la aplicación de control del sistema
	experimental
5.10.	Diagrama productor-consumidor implementado en la adquisi- ción y tratamiento de los datos
5.11.	Representación gráfica del algoritmo de búsqueda de la máxima eficiencia de acople: a) plano inicial; b) plano central; c) plano final
5.12.	Esquema de colas implementada por el <i>Modelo Actor</i>
5.13.	Panel para la configuración de la posición de los dispositivos seleccionados para realizar una medida
5.14.	Atenuación de los elementos ópticos del sistema
5.15.	Atenuación introducida en el dispositivo
5.16.	Evolución del proceso de estabilización de señal: a) búsqueda del máximo acoplamiento y estabilización; b) ruido causado por el
F 17	control de enfoque
J.17.	óptico
6.1.	Sistema experimental para la caracterización de la deflexión del cantilever: a) vista superior del sistema experimental con las imágenes de las cámaras para el alineamiento del microcantilever mecánico con el cantilever óptico; b) deflexión del cantilever óptico forzado por el cantilever mecánico
6.2.	Respuesta de los microcantilevers fabricados en función del desplazamiento y comparación entre la medida realizada y la simulación
6.3.	Eficiencia y sensibilidad del cantilever en agua
6.4.	Respuesta del dispositivo frente al cambio de índice de refracción del medio que rodea al cantilever óptico
6.5.	Proceso de silanización y biofuncionalización
6.6.	Proceso de funcionalización de un cantilever empleando la plataforma de biodeposición
6.7.	Inmovilización del tiol <i>SH-PEG-COOH</i> en la superficie metali- zada del cantilever óptico
6.8.	Proceso de inmovilización de capas de polieletrolitos de distintas cargas
6.9.	Imagen de fluorescencia para verificar la inmovilización de la proteína en la superficie de óxido de silicio del cantilever óptico. El microcantilever CN1 se considera el control, el CN2 y el CN3 han sido procesados con la proteína fluorescente

6.10.	Respuesta del microcantilever en el proceso de silanización: a) inmovilización del CTES; b) inmovilización del anti cuerpo	
6.11.	monoclonal anticuerpo monoclonal (mAb-hGH) Detección de la proteína hGH y regeneración de la superficie	157
	con HCl: a) 6,6 $\mu g/ml$ hGH; b) 5 $\mu g/ml$ hGH	159
A.1. A.2.	Tensor de estrés	$\begin{array}{c} 169 \\ 171 \end{array}$

Índice de tablas

1.1.	Comparativa de sensibilidades de sensores	13
1.2.	Comparativa de sensibilidades de sistemas de detección mecánico	16
4.1.	Preparación de las obleas.	105
4.2.	Definición de las guías de ondas.	106
4.3.	Definición de la ventana superior del chip	107
4.4.	Definición de los microcantilevers en la ventana	108
4.5.	Apertura de la ventana de los microcantilevers.	109
4.6.	Establecimiento del espesor del microcantilever	111
4.7.	Deflexión del extremo libre del OWC para las distintas obleas .	114
5.1.	Especificaciones del amplificador PDA200C	128
5.2.	Especificaciones del amplificador PDA200C	143
5.3.	Ruido termico del cantilever ($\eta_{z0} = 0.197$, $S_{z0} = 4.88 \cdot 10^5 [m^{-1}]$).	143
6.1.	Potencia óptica detectada en las guías de referencia según su	
	anchura	146
6.2.	Valores de índice de refracción absoluto (n) de la concentración	
	de etanol en agua.	149

Listado de publicaciones y patentes

Publicaciones

- B. Sepúlveda, L.G. Carrascosa, D. Regatos, M.A. Otte, <u>D. Fariña</u> and L.M. Lechuga. "Surface Plasmon Resonance Biosensors for Highly Sensitive Detection in Real Samples". Proceeding of SPIE, 7397, 73970Y1-73970Y11, 2009.
- D. Regatos, <u>D. Fariña</u>, A. Calle, A. Cebollada, B. Sepúlveda, G. Armelles and L.M. Lechuga, "Au/Fe/Au multilayer transducers for Magneto-Optic Surface Plasmon Resonance sensing". J. Applied Physics, Vol. 108, 054502, 2010.
- D. Fariña, M.Álvarez, J.R.Sendra and L. M. Lechuga, "Biosensores opto-nanomecánicos basados en microcantilevers", Intekhnia, 6(1), 45– 55, 2011.
- D. Regatos, B. Sepúlveda, <u>D. Fariña</u>, L G. Carrascosa, and L. M. Lechuga. "Suitable combination of noble/ferromagnetic metal multilayers for enhanced magneto-plasmonic biosensing". Optics Express 19, 8336–8346, 2011.
- M.Alvarez, <u>D. Fariña</u>, Alfonso M. Escuela, J.R.Sendra and L. M. Lechuga, "Development of a surface plasmon resonance and nanomechanical biosensing hybrid platform for multiparametric reading", The Review of a Scientific Instruments 84(1) 015008, 2013.
- 6. S. Dante, D. Duval, <u>D. Fariña</u>, A.B. González-Guerrero and Laura M. Lechuga. "Linear phase read-out using wavelength modulation for improved interferometric biosensors". Submitted to ACS Photonics

- D. Fariña, M.Álvarez, S.Marquez, C.Dominguez and L.M. Lechuga, "Improving sensitivity of optical waveguide microcantilever biosensor" [En preparación].
- 8. <u>D. Fariña</u>, M.Álvarez, S.Marquez, C.Dominguez and L.M. Lechuga, "Sensitivity enhanced of nanomechanical photonic transducers" [En preparación].

Contribuciones a Congresos

- D. Regatos, A. Calle, <u>D. Fariña</u>, A. Cebollada, G. Armelles, B. Sepúlveda and L. M. Lechuga, "MagnetoOptical Surface Plasmon Resonance Biosensor (MOSPR)", IBERSENSOR'2008. 6th IberoAmerican Conference on Sensors, Sao Paulo (Brasil), Noviembre 2008.
- D. Regatos, <u>D. Fariña</u>, A. Calle, A. Cebollada, G. Armelles, B. Sepúlveda and L. M. Lechuga, "Modulation techniques to improve the limits of detection of surface plasmon resonance sensors", SSP4 (Fourth Internacional Conference on Surface Plasmon Photonics), Amsterdam (Holanda), Junio 2009.
- D. Regatos, B. Sepúlveda, <u>D. Fariña</u>, G. Armelles and L.M. Lechuga, "Sensitivity study of magneto-plasmonic transducers for biosensing implementation", EUROPT(R)ODE IX (10th European Conference on Optical Chemical Sensors and Biosensors), Prague (Czech Republic), Marzo 2010.
- 4. M. Álvarez, <u>D. Fariña</u>, A.M. Escuela, L.G. Carrascosa, J.R. Sendra and L.M. Lechuga, "Multiparameter reading by integration of SPR and nanomechanical biosensing technique", IV NyNA. IV Workshop en Nanociencias y Nanotecnologías Analíticas, Zaragoza (España), Septiembre 2010.
- M. Álvarez, <u>D. Fariña</u>, A.M. Escuela, L.G. Carrascosa, J.R. Sendra and L.M. Lechuga, "CANTIPLASMON: Multiparameter reading by integration of SPR and nanomechanical biosensing techniques", IBERSEN-SOR'2010. 7th IberoAmerican Conference on Sensors, Lisboa (Portugal) Noviembre 2010.
- M. Alvarez, <u>D. Fariña</u>, K. Zinoviev, C. Domínguez and L.M. Lechuga, *"Microcantilever biosensing platforms for point-of-care diagnostics devices"*, BNC-b Research Meeting, Barcelona (España), Julio 2011.

- S.Marquez, M. Álvarez, <u>D. Fariña</u>, C.Domiguez, and L.M. Lechuga, "Array of microbridge resonators for the development of BioMEMS platforms", VI International conference on Surfaces, Materials and Vacuum, Mérida (Méjico), Septiembre 2013.
- S.Dante, D.Duval, A.B.González-Guerrero, <u>D. Fariña</u>, C.Dominguez and L.M. Lechuga, "Wavelength Modulated Bimodal Interferometer for High Sensitive Biosensing Applications", Advance Photonics 2014 (Optical Sensors Meetings), Barcelona (España), Julio 2014.
- Salomón Márquez, M. Álvarez, <u>D. Fariña</u>, C. Dominguez and L.M. Lechuga, "Array of Microbridge resonators with Integrated Microfluidic Channels for Biosensing Applications", IEEE Sensors 2014, Valencia (España), Noviembre 2014.

Patentes

Título: "MÉTODO PARA EL ANÁLISIS DEL ÍNDICE DE REFRACCIÓN DE UN MEDIO DIELÉCTRICO ADYACENTE A UN MEDIO PLASMÓNI-CO Y DISPOSITIVO CORRESPONDIENTE".

Inventores: Borja Sepúlveda, David Regatos, <u>David Fariña</u>, Gaspar Armelles y Laura M. Lechuga.

Número de solicitud: P201030166 (PCT/ES2011/070085). País y fecha de prioridad: España, 10 Febrero 2010. Entidad titular: CSIC y CIBER-BBN

Motivación y objetivos

El desarrollo de técnicas de microfabricación en las últimas décadas ha permitido el auge de los Sistemas Micro-Electro-Mecánicos (MEMS). Esto ha abierto nuevas líneas de investigación en campos como el de las telecomunicaciones, la electrónica o la medicina, aprovechando las ventajas de reducir las dimensiones de los dispositivos. Estas ventajas han sido aprovechadas en el desarrollo de biosensores nano-mecánicos con alta sensibilidad y rápida respuesta denominados Sistemas Biológicos o Biomédicos Micro-Electro-Mecánicos (BioMEMS). Para su desarrollo se requiere de la participación de diversas disciplinas, que involucran campos tan amplios como la física mecánica, óptica, bioquímica, electrónica o incluso el desarrollo de software.

Los BioMEMS más utilizados son las micropalancas o *microcantilevers*, un dispositivo con dimensiones nanométricas, anclado en un extremo y con el otro extremo libre, inicialmente empleados como elemento transductor del Microscopio de Fuerzas Atómicas (AFM). Existen diversas técnicas para la detección de la deflexión del microcantilever, la propuesta en este trabajo hace uso de la óptica integrada, por ello se denominan *cantilever ópticos (OWC)*. En este caso el microcantilever actúa como una guía de onda por la que viaja la luz, detectando su deflexión gracias a la perdida de eficiencia en el acoplamiento de la luz entre el microcantilever y una guía de onda de recogida situada muy próxima al extremo libre.

Aprovechar las ventajas de este tipo de BioMEMS supone el desarrollo de una plataforma biosensora que permita la detección de analitos en tiempo real sin necesidad de marcadores. Para ello en este trabajo se han definido los siguientes objetivos:

- Análisis teórico del dispositivo opto-mecánico, así como la optimización de sus dimensiones para maximizar su sensibilidad y su eficiencia bajo las condiciones en las que se realizan las medidas de interacción biomolecular.
- Fabricación y caracterización de los dispositivos diseñados, junto con el desarrollo del sistema experimental, que permitan obtener la respuesta del dispositivo.
- Demostración del sistema BioMEMS como biosensor.

Estructura de la memoria

Este trabajo está organizado en 8 capítulos con el siguiente contenido:

- Capítulo 1 Biosensores. En este capítulo se define lo que es un biosensor, presentando la clasificación según el sistema de transducción empleado, prestando especial atención a los biosensores que emplean sistemas de transducción mecánicos combinados con sistemas ópticos (MOEMS).
- Capítulo 2 Física de los dispositivos opto-mecánicos. En este capítulo se describen los fenómenos físicos que intervienen en los dispositivo opto-mecánicos, comenzando con el comportamiento mecánico de los microcantilever y la dependencia de la sensibilidad con sus dimensiones para cada modo de operación del cantilever: estático o dinámico. En una segunda parte, se presentan los conceptos de óptica integrada relacionados con la propagación de la luz en guías de ondas.
- Capítulo 3 Simulación y diseño de los cantilevers ópticos. En este capítulo se optimizan los parámetros que intervienen en la sensibilidad del cantilever óptico, divididos según naturaleza mecánica u óptica. Para ello se hace uso de simulaciones mediante elementos finitos, combinando los efectos de deflexión con el guiado de la luz en los microcantilevers, siendo posible obtener su eficiencia y su sensibilidad según sus dimensiones.
- Capítulo 4 Fabricación de los cantilevers ópticos. A partir de las dimensiones obtenidas de las simulaciones de los dispositivos, se presentan las máscaras fotolitográficas diseñadas junto con los pasos de fabricación necesarios y el resultado de su fabricación en Sala Blanca.

- Capítulo 5 Sistema Experimental: diseño, implementación y caracterización. En este capítulo se describe el sistema experimental desarrollado, compuesto por componentes ópticos y mecánicos que permiten introducir la luz en el microcantilever, así como la detección de su respuesta. Ademas se describe el sistema de control automático de enfoque que que permite la reproducibilidad y el multiplexado de las medidas. Finalmente se realiza la caracterización de los niveles de potencia en cada punto del sistema experimental, lo que permite obtener los valores de eficiencia de los cantilevers ópticos.
- Capítulo 6 Evaluación del cantilever óptico como biosensor. En este capítulo se obtiene de forma experimental la respuesta de los dispositivos en función de su deflexión y del cambio de índice de refracción del medio que los rodea, y se realiza la comparación con las simulaciones realizadas. Finalmente se presentan las medidas biosensoras, donde se han empleando diversas técnicas de funcionalización de la superficie del microcantilever, para concluir con la detección de la hormona de crecimiento (hGH).
- Capítulo 7 Conclusiones. En este capítulo se resumen los logros alcanzado en este trabajo junto con las perspectivas futuras a partir de las cuales es posible mejorar aun más el biosensor optomecánico propuesto.

Capítulo 1

Biosensores

1.1. Introducción general

Si observamos nuestro alrededor encontraremos que estamos rodeados de sensores. Si hace unas décadas el desarrollo de los microprocesadores generó un salto tecnológico muy importante, con un gran impacto económico y social, hoy en día son los sensores los que inundan la sociedad. Muchos de ellos están instalados en sistemas con microprocesadores y sistemas de comunicación que les permiten almacenar y transmitir su estado en servidores remotos.

Cualquier dispositivo de telefonía móvil de última generación puede llegar a integrar decenas de sensores que controlan su temperatura, geolocalización, inclinación, aceleración, la mayoría poseen cámaras, sensores táctiles, de iluminación, de proximidad, antenas para distintos protocolos de comunicación, etc. y todo ello en un dispositivo que sostenemos en la palma de la mano.

Internet revolucionó la forma de comunicación de las personas y en los últimos años se han incorporado a la "red" los sensores, empleándola como una plataforma donde expresan su estado y se comunican, en lo que se denomina *Internet of Things* (IoT) (figura 1.1). Esta relación entre sensores tiene un impacto directo en una nueva forma de vida de los seres humanos, dando pie a la creación de la base tecnológica de las nuevas ciudades inteligentes o eficientes llamadas *smart cities*. La transformación de las ciudades en *smart cities* es posible gracias al uso de los sensores. Desde sensores de temperatura o humedad que permiten regular de forma automática el ambiente de las casas o plantas industriales, a sensores de contaminación o radiación ultravioleta

que pueden advertir a los usuarios de posibles incidencias. Incluso sensores instalados en envases de productos alimenticios que indican el estado en el que se encuentra el producto interior.



Figura 1.1: Internet de las cosas (IoT)

El crecimiento del uso de sensores se acelera con la necesidad de medir y controlar todas aquellas magnitudes que aportan algún beneficio o protegen o previenen de algún peligro. Dentro de este contexto podríamos definir un biosensor como un dispositivo que posee un transductor capaz de convertir un cambio de un parámetro físico-químico, generado por una interacción biológica entre un receptor biológico y su analito, en una señal que pueda ser cuantificada (figura 1.2).



Figura 1.2: Esquema de un biosensor

Este principio es el empleado por el primer sistema biosensor, utilizado para medir la concentración de glucosa en sangre, desarrollado en el año 1962

1.1. INTRODUCCIÓN GENERAL

por Clark y Lyons [1]. En la figura 1.3 se muestra un sensor comercial de glucosa, basado en una combinación de una capa enzimática con un electrodo amperométrico.



Figura 1.3: Sensor de Glucosa comercial

Existen multitud de biosensores, por lo que no existe una única clasificación de los mismos. Pueden clasificarse en función del tipo de interacción, por el método de detección (directa o indirecta), por el elemento biológico de reconocimiento (enzima, anticuerpo, células, etc.), o por su sistema de transducción. Desde el punto de vista de la ingeniería es quizás esta última, la clasificación según su sistema de transducción, la más interesante. Según esta clasificación los biosensores pueden ser ópticos, piezoeléctricos, nano-mecánicos o electroquímicos.

Los biosensores basados en sistemas de transducción ópticos son aquellos en los que se analiza la variación de cierto parámetro de la luz, como la longitud de onda, la intensidad o la polarización, cuando el material biológico interfiere en su propagación. Un caso particular de este tipo de elemento transductor hace uso del *campo evanescente*, definido como la parte de una onda de luz guiada que se propaga por fuera del núcleo de una guía de onda (figura 1.4-a). En estos biosensores la capa biológica receptora actúa como cubierta de la guía, por lo que el campo evanescente se propaga a través de ella. Al producirse la interacción biológica, las propiedades ópticas en la cubierta varían, modificando el modo de propagación. Este es el principio de funcionamiento de biosensores que emplean guías de onda como los biosensores basados en fibras ópticas, interferómetros Mach-Zehnder [2], guías bimodales [3] o anillos resonadores [4]. Otro tipo de biosensor que emplea el campo evanescente como elemento transductor son los de resonancia de plasmón superficial (SPR) [5], donde el campo evanescente es generado por los modos plasmónicos excitados en la interfaz entre un dieléctrico y un metal (figura 1.4-b).



Figura 1.4: Biosensores de campo evanescente: a) modo confinado en una guía; b) modo plasmónico

Los biosensores que emplean un transductor piezoeléctrico miden cambios de resonancia en un material de tipo piezoeléctrico cuando el receptor biológico inmovilizado reconoce a su analito complementario.

Los biosensores electroquímicos transforman la señal producida entre el elemento de reconocimiento y el analito en la variación de una magnitud eléctrica. Pueden ser potenciómetricos, amperométricos o conductimétricos, como es el caso del sensor de glucosa.

Finalmente los biosensores nano-mecánicos son aquellos en los que el receptor biológico se inmoviliza sobre una superficie que responde mecánicamente a la reacción con el analito. Esta respuesta puede estar motivada por dos efectos, un incremento en la masa equivalente del transductor o la modificación de las fuerzas en la superficie que generan un estrés superficial [6]. Para este tipo de aplicaciones, se emplean principalmente Sistemas Micro-Electro-Mecánicos (MEMS) o Sistemas Nano-Electro-Mecánicos (NEMS) con forma de micropalancas o voladizos, denominados *microcantilevers*, con dimensiones en el orden de las micras o incluso nanómetros, y cuya respuesta mecánica es del orden de nanómetros.

La elección del sistema de detección es fundamental para obtener la mayor
sensibilidad en una aplicación biosensora determinada, además es necesario optimizar factores externos al sistema de transducción que pueden alterar su sensibilidad, comenzando por la optimización de los bioreceptores y su anclaje, hasta el diseño de los sistemas electrónicos de control del biosensor. En la Tabla 1.1 se muestra una comparativa de los distintos biosensores, mostrando sus límite de detección (LOD). Se pueden diferenciar dos tipos de LOD, uno referente a la cantidad de masa mínima por área detectada en la superficie del biosensor, o el cambio mínimo de unidades de índices de refracción (RIU) del medio que rodea al biosensor, ampliamente utilizados en los sensores de campo evanescente para determinar su nivel de sensibilidad y por tanto de aplicabilidad.

Biosensor	LOD pg/mm^2	LOD (RIU)	Referencia
Plasmón Superficial (SPR)	1-5	$10^{-5} - 10^{-8}$	[5]
SPR Localizado (LSPR)	s.d.	10^{-4}	[7]
Interferómetro Mach-Zehnder (MZI)	0.01 - 0.06	$10^{-7} - 10^{-8}$	[2] [8]
Guías bimodales (BiMWG)	s.d.	10^{-7}	[3]
Anillos Resonadores	1	10^{-7}	[4] [9]
Cristales Fotónicos	0.4	10^{-5}	[10]
Mecánico - microcantilevers	0,2 ng/ml	s.d	[11]

Tabla 1.1: Comparativa de sensibilidades de sensores

1.2. Sistemas Micro-Mecánicos

Los sistemas micro-mecánicos han alcanzado una notable importancia en los últimos años gracias a su gran sensibilidad para la detección de movimiento. Esto ha generado una gran familia de dispositivos, denominados MEMS o NEMS, destinados a esta labor. Estos sensores permiten conocer la inclinación, la aceleración o la presión, y que gracias a su reducido tamaño y a su bajo consumo se han incorporado a millones de equipos electrónicos.

La evolución de los dispositivos MEMS/NEMS ha sido posible gracias al desarrollo de técnicas de microfabricación [12] que han permitido la producción de este tipo de dispositivos de alta resolución y reducido tamaño. Estas técnicas además permiten una alta capacidad de producción en masa, reduciendo drásticamente los costes de fabricación.

1.3. BioMEMS

La tecnología de fabricación de los MEMS se trasladó rápidamente al diseño de dispositivos destinados a aplicaciones biológicas o biomédicas en lo

que se denominó Sistemas Biológicos o Biomédicos Micro-Electro-Mecánicos (BioMEMS). Gracias a estas tecnologías es posible diseñar sistemas capaces de identificar, inmovilizar, cultivar [13] [14], separar [15], purificar y manipular células, biomoléculas, toxinas y otros agentes biológicos [16] [17]. La integración de estas herramientas junto con otros sistemas como detectores, actuadores, microfluídica o incluso sistemas de comunicación que permiten cuantificar o configurar el dispositivo, se han denominado sistemas Lab-on-a-chip o Micro Sistemas de Análisis Total (μ -TAS).

Son diversas las aplicaciones en las que los BioMEMS tienen un gran impacto, como la búsqueda y desarrollo de nuevos fármacos y nuevas técnicas para su administración haciendo uso de micro-agujas [18] [19]. En este caso el uso de matrices de BioMEMS permite estudiar de forma simultánea multitud de factores que intervienen en ciertas enfermedades, así como los mecanismos biológicos que las generan y los tratamientos más efectivos [20].

Otro campo de aplicación de los BioMEMS es el desarrollo de microherramientas quirúrgicas menos invasivas, que permiten realizar cortes muy precisos o realizar endoscopias integrando todos los sensores de imagen, iluminación, telemetría y control en una cápsula [21]. Estas cápsulas pueden llegar a controlar su posición en el interior del cuerpo gracias al uso de microrobots [22].

En el campo de las prótesis, el diseño de sistemas micro-implantables de componentes activos favorecen la regeneración de tejidos nerviosos [23]. Otros pueden actuar como sensores de imágenes, que al excitar los nervios ópticos, tal y como lo hacen las células fotoreceptoras de la retina, simulan una imagen en el cerebro [24].

Los BioMEMS diseñados para actuar como biosensores tienen como ventaja su gran biocompatibilidad y su reducido tamaño, que les permite trabajar con una menor cantidad de muestra biológica y su posibilidad de operar en medios líquidos con una gran sensibilidad y rápida respuesta. Las interacciones de bioafinidad de los biosensores BioMEMS son cuantificadas empleando diversos sistemas de detección entre los que destacan los eléctricos, ópticos, piezoeléctricos, acústicos o una combinación de ellos. Los BioMEMS que han tenido más repercusión son las micropalancas o microcantilevers.

1.3.1. Biosensores basados en cantilevers

El nacimiento de los biosensores micro-mecánicos se produce con el desarrollo del Microscopio de Fuerzas Atómicas (AFM) [25] en 1986. El AFM es un tipo de Microscopio de Sonda de Barrido (SPM) empleado para obtener imágenes

1.3. BIOMEMS

topográficas de muestras a escala nanométrica.

El principio de funcionamiento del AFM consiste en el uso de una palanca de dimensiones micrométricas con una punta extremadamente fina, del orden de Ångströms, que se acerca a la superficie bajo estudio hasta que los átomos de la punta y de la superficie interaccionan, generando fuerzas que producen la deflexión de la micropalanca. Esta deflexión es amplificada por un sistema óptico basado en un láser enfocado en el extremo del microcantilever y un detector de posición. Un sistema piezoeléctrico desplaza la muestra para obtener una imagen topográfica de la misma.

La sensibilidad del AFM ha ido en aumento gracias al estudio del comportamiento de la respuesta mecánica de las micropalancas [26], como su deflexión [27] [28], su respuesta en frecuencia [29], su ruido térmico [30] o la influencia del entorno en su comportamiento. Además del estudio de su mecánica, gracias al desarrollo de nuevas tecnologías de lectura y mejoras en métodos de fabricación de los microcantilevers, se comenzó a considerar estos sistemas mecánicos como dispositivos biosensores [31].

En el año 2000 la división de investigación de IBM en Zurich prescindió de la punta del AFM y emplearon el microcantilever como biosensor para la detección de la hibridación de ADN, detectando la deflexión producida por el cambio en el estrés superficial [32]. Los cambios en la estructura del microcantilever se traducen en dos efectos que dan lugar a sus modos de operación: modo estático (deflexión del microcantilever - figura 1.5-a) y el modo dinámico (cambio de su frecuencia de resonancia - figura 1.5-b). Las principales ventajas del uso del microcantilever como biosensor son: (i) su capacidad de realizar procesos de detección sin marcadores, (ii) monitorización en tiempo real del proceso de detección, (iii) necesidad de pequeñas cantidades de material biológico, (iv) su capacidad de minituariación y creación de dispositivos portable, (v) su capacidad de realizar medidas multiplexadas.

Existen diversos métodos de lectura del movimiento del microcantilever cuando actúa como biosensor, permitiendo en muchos casos la lectura de múltiples dispositivos de forma simultánea. Las más comunes son la capacitiva, piezoresistiva, piezoeléctrica y la óptica, entre las que destacan las lecturas interferométricas o mediante el uso de óptica integrada. En la Tabla 1.2 se presenta una comparativa de los sistemas de detección empleados así como sus límites de detección y su deflexión mínima detectable (DMD).



Figura 1.5: Modos de operación del microcantilever: a) modo estático; b) modo dinámico.

Sistema de detección	Modo de operación	Dimensiones (μm)	LOD	DMD	Ref.
Piezoresistiva	Estático		10ng/ml (PSA)		[33]
	Estático	200 x 100 x 7.6	-, , ,	0.4	[34]
				nm	
	Estático	200x 50x2.		0.03	[35]
				nm	
Óptica	Estático	500x100x0.5	$1nM \ 20 \mathrm{ng/ml} \ \mathrm{(AR-GCN4)}$		[36]
	Estático	600 x 20 x 0.65	0,2 ng/ml		[11]
Óptica	Estático	$110x \ 45x0.65$	s.d.	0.06	[37]
integrada				pm	
Óptica	Estático	$100x \ 20x2.2$	s.d.	$1 \mathrm{nm}$	[38]
interferométrica					
	Estático	500 x 100 x 1	s.d.	$0.5 \mathrm{nm}$	[39]
Óptica	Dinámico		$10^{19}g/\sqrt{Hz}$		[40]
Resonadores					-

Tabla 1.2: Comparativa de sensibilidades de sistemas de detección mecánico

1.3.2. Técnicas de detección de las respuesta nano-mecánicas

La respuesta de los sensores micro-mecánicos puede ser cuantificada mediante diversos sistemas de detección. En su elección intervienen diversos factores como el modo de operación del sistema micro-mecánico, las especificaciones de sensibilidad o su forma de integración.

1.3.2.1. Detección capacitiva

Es una técnica muy sensible empleada en entornos gaseosos donde el microcantilever actúa como conductor de un condensador, separado de otra capa conductora por el medio en estudio. Al producirse la deflexión, la distancia entre las placas se modifica, cambiando la capacitancia de la estructura. Este método tiene ciertas limitaciones en la amplitud de la detección y el entorno en estudio, ya que no permite trabajar en medios electrolíticos, limitando su aplicación biosensora [41].

1.3.2.2. Detección piezoresistiva

El uso de materiales piezoresistivos que modifican su conductividad eléctrica con la deflexión de la micropalanca es ampliamente utilizada. La variación de la resistividad del material debida a la deflexión puede ser medida empleando puentes de Wheatstone [42]. Esto permite una alta capacidad de integración para trabajar en sistemas multiplexados, por contra tanto el material como las conexiones a la electrónica deben estar aislados para evitar cortocircuitos entre los terminales, sin olvidar la posible disipación de calor producida por la circulación de corriente en el material, generando derivas térmicas en la estructura.

1.3.2.3. Detección piezoeléctrica

Este sistema de detección emplea un material piezoeléctrico como elemento transductor. Normalmente el uso de estos materiales incrementa las dimensiones del microcantilever para alcanzar niveles de sensibilidad comparables a los obtenidos con otras técnicas. Por este motivo es un método empleado especialmente en MEMS que trabajan en modo dinámico, ya que además de la detección permite la excitación del propio MEMS, consiguiendo altas sensibilidades. Otra gran ventaja de este método de detección es su capacidad de integración con matrices de micropalancas, por lo que han sido ampliamente desarrollados [43] [44]. De la misma forma que para los microcantilevers con sistemas de detección piezoresistiva, las conexiones deben estar completamente aisladas del medio de medida.

1.3.2.4. Detección óptica

Los sistemas de detección óptica emplean un haz láser para detectar el movimiento del microcantilever. Esta técnica fue presentada por Meyer y Amer en 1988 [45] para los equipos de AFM (figura 1.6). El sistema consiste en la detección del desplazamiento de un haz láser focalizado en el extremo libre del microcantilever, y cuya reflexión incide en un detector óptico, que puede ser un fotodiodo de dos o cuatro cuadrantes, donde la detección se obtenie a partir de la diferencia de señal entre los cuadrantes, o un detector sensible a la posición (PSD) donde la posición del punto de incidencia del haz de luz en la zona de detección se deduce a partir de la variación de resistencia entre sus terminales.



Figura 1.6: Sistema de detección óptica empleado en equipos de AFM.

Las ventajas de la solución de Meyer y Amer es su sencillez y el bajo coste de implementación, por el contrario sus desventajas residen en la poca capacidad de integración de lectura de múltiples microcantilevers y la complejidad asociada al sistema de alineamiento necesario. Otro inconveniente es el efecto bimetálico debido a la necesidad de recubrir con oro una de las superficies del microcantilever para aumentar el reflejo del láser, o la influencia del índice de refracción en la trayectoria del haz al cruzar una interfaz aire-líquido [46].

Detección interferométrica Este sistema de detección emplea la interferencia que se genera entre un haz de referencia y el haz que incide en el dispositivo de medida. El análisis de la deflexión o de la frecuencia de resonancia del microcantilever se realiza mediante fotodiodos. Estos recogen la respuesta ondulatoria resultante de la interferencia constructiva y destructiva entre el haz reflejado en el extremo del dispositivo I_{mems} y el haz de referencia I_{ref} (ver figura 1.7) [47]. Otra forma de analizar la deflexión de matrices de microcantilevers es mediante el uso de cámaras CCD^1 . El tratamiento de las imágenes obtenidas permite analizar el patrón de interferencia que se crea en los microcantilevers cuando poseen cierto grado de curvatura [48] [39] [38].



Figura 1.7: Detección interferométrica.

Detección por óptica integrada Se trata de un método de detección reciente que se encuentra en vía de desarrollo. La óptica integrada tiene como objetivo la integración de los elementos necesarios para la generación, la transmisión y la detección de una señal óptica en un tamaño muy reducido. El diseño adecuado de estos dispositivos proporciona el control de la propagación de la luz permitiendo maximizar su sensibilidad.

El principio generalmente utilizado hace uso de guías de ondas para transmitir la luz hasta el transductor donde se produce la interacción. Esta interacción provoca cambios en el haz transmitido y es recuperado por otra guía de onda que lo traslada hasta un detector óptico.

El uso de este sistema de detección permite reducir el tamaño de los elementos utilizados para crear su sistema equivalente empleando componentes discretos, además de reducir costes de producción a gran escala. Cuando se emplea la óptica integrada en dispositivos biosensores, el beneficio de poder realizar medidas multiplexadas los hace especialmente interesantes, lo que ha dado lugar a una categoría de dispositivos MEMS denominada Sistemas Micro-Opto-Electro-Mecánicos (MOEMS).

¹Siglas en inglés "Charge-Coupled Device"

1.3.3. Dispositivos Micro-Opto-Mecánicos

Los Sistemas Micro-Opto-Electro-Mecánicos (MOEMS) son una clase especial de MEMS, donde la detección o manipulación de señales ópticas se realiza a pequeña escala, integrando sistemas mecánicos, eléctricos y ópticos. Los MOEMS tienen una gran aplicación en el campo de las telecomunicaciones, donde se han desarrollado dispositivos como interruptores ópticos, matrices de conmutación [49] o fuentes de luz como los láser de cavidad vertical y emisión vertical (VCELS)s ajustables.

Otro campo donde se han integrado los MOEMS es en la instrumentación, realizando tareas de tratamiento de la luz, como su focalización [50] o en la creación de microscopios de tipo confocal, CLSM, donde se emplean micro-espejos que controlan la posición del haz láser con gran resolución y velocidad [51] [52].

En el campo de los biosensores también se han empleado los MOEMS, en este caso el transductor es un elemento micro-mecánico que hace uso de la detección óptica para determinar la respuesta del sistema mecánico cuando se produce cierta reacción biomolecular.

Uno de los primeros MOEMS a nivel internacional se desarrolló en un trabajo conjunto entre el grupo de investigación donde se ha realizado este trabajo y el Centro Nacional de Microelectrónica de Barcelona (CNM), dentro de un proyecto europeo [53]. Dichos MOEMS consistían en matrices de microcantilevers que actuaban como guías de onda y cuyo desplazamiento era observado gracias a la pérdida de eficiencia de acople entre el propio microcantilever y una guía de onda de recogida (figura 1.8), que generaba una variación de potencia óptica adquirida por un detector [54].

El diseño propuesto tiene como principal objetivo el diseño de matrices de microcantilevers cuya respuesta pueda ser monitorizada de forma simultánea. Para ello, el uso de la óptica integrada permite alimentar varios dispositivos a partir de una única fuente óptica y, de esta forma, obtener la lectura simultánea de sus respuestas, todo ello en un *chip* de tamaño reducido y que puede ser producido en masa gracias a su compatibilidad con tecnología semiconductor complementario de óxido metálico (CMOS).

Estos mismos objetivos fueron emulados por otros grupos, posteriormente al trabajo presentado por nuestro grupo de investigación, P.G. Nordin de la Universidad de Brighan Young, presentaba un dispositivo similar (figura 1.9-a). La principal diferencia entre ambos dispositivos reside en el diseño de la guía de recogida, junto con los materiales empleados y en consecuencia la longitud



Figura 1.8: Esquema del cantilever óptico.

de onda de trabajo. Esta guía de onda de salida permite detectar el sentido del desplazamiento del microcantilever, gracias a la asimetría generada por la deposición de silicio amorfo en la mitad de la guía de onda, de tal forma que esta acepta dos modos de propagación. Posteriormente la guía se divide para monitorizar la respuesta de cada modo y obtener, aplicando la diferencia de ambas señales, la posición del extremo libre del microcantilever [55].



Figura 1.9: Otros diseños posteriores de cantilevers ópticos: a) guía de recogida multimodal presentado por P.G.Nordin b) cantilever óptico de polímero SU–8 presentado por M.Nordstrom.

Otros autores han presentado diseños similares, empleando polímeros como el SU–8, gracias a sus buenas propiedades mecánicas y ópticas [56]. M.Nordstrom presentó un cantilever óptico fabricado en polímero SU–8, donde la medida de deflexión del cantilever se puede obtener mediante dos modos de

operación: transmisión y reflexión [56]. En transmisión el sistema actúa de igual forma que el presentado en este trabajo, una guía de entrada se transforma en el cantilever y una guía de salida recoge la luz transmitida por este. En el modo de reflexión, la luz es introducida por el la guía de salida (tomando como referencia el modo de operación en transmisión), que alcanza el extremo libre del cantilever y es reflejada nuevamente hacia la fuente, el nivel de intensidad de esta señal reflejada determina la posición del microcantilever, disminuyendo al perderse el alineamiento entre la guía y el microcantilever. La gran ventaja de este método es la independencia de la señal de respuesta frente a las variaciones del medio que rodea al microcantilever. Sin embargo, la guía de entrada, el cantilever y la guía de recogida se sitúan en el mismo plano, por lo que la sensibilidad para desplazamientos reducidos se ve limitada.

Otros autores han propuesto otros mecanismos de detección, que hacen uso de elementos de óptica integrada para determinar el movimiento nanométrico de los sistemas micro-mecánicos, como son el uso de cristales fotónicos [57], o anillos resonadores [40]. Sin embargo hasta la fecha no se tiene conocimiento de la aplicación de estos dispositivos opto-mecánicos como biosensores, en comparación con otros mecanismos de detección de la respuesta nanomecánica [58].

El objetivo fundamental de este trabajo ha sido la optimización de la sensibilidad del dispositivo opto-mecánico originalmente propuesto por nuestro grupo para su uso en la detección de interacciones biomoleculares en medios líquidos. La optimización va dirigida no solo a conseguir el mayor nivel de sensibilidad posible sino también a conseguir sistemas multiplexados que nos permitan la evaluación simultánea de diversas interacciones biomoleculares de reconocimiento en la misma muestra. El objetivo final es ofrecer un sistema biosensor de alta sensibilidad, multiplexado, y de tamaño reducido susceptible de ser integrado en una plataforma "lab-on-a-chip" para su uso como sistema de diagnóstico descentralizado.

Capítulo 2

Física de los dispositivos opto-mecánicos

Para realizar la optimización de la sensibilidad del cantilever óptico es necesario estudiar los parámetros que intervienen en su comportamiento como biosensor. Por ello, en este capitulo se presenta tanto la física que describe el comportamiento mecánico, que maximiza la respuesta del dispositivo cuando se produce una interacción biológica en su superficie, como la teoría relacionada con la propagación de la luz dentro de una guía de onda, que permite optimizar la respuesta en la señal óptica causada por la deflexión.

2.1. Mecánica y dinámica del cantilever

Los biosensores mecánicos basados en *microcantilevers* que operan en modo estático detectan la interacción biológica a partir de la diferencia de estrés superficial entre sus superficies. El análisis de la naturaleza de este estrés superficial y la deflexión que induce en el microcantilever es de vital importancia para obtener dispositivos más sensibles, por ello, en los siguientes apartados se exponen las ecuaciones que intervienen en la relación de deflexión y estrés superficial, así como su dependencia con las dimensiones y material del microcantilever.

La respuesta dinámica del microcantilever se caracteriza fundamentalmente por su frecuencia de resonancia y su factor de calidad. El modo de operación dinámico consiste en la detección de la variación de la respuesta en frecuencia del microcantilever al producirse la interacción biomolecular. Es por ello, que en este capítulo se estudiará la influencia en la respuesta dinámica en función de las dimensiones, materiales y medio de oscilación de los microcantilevers, y el impacto que tienen en el cálculo de su ruido térmico.

2.1.1. Modo de operación estático

El modo de operación estático se basa en la deflexión de la micropalanca debido a la diferencia de estrés superficial entre la superficie superior e inferior. Uno de los métodos más comunes para conseguir esta situación es la de recubrir con oro una de las caras del microcantilever. El oro es uno de los materiales más empleados en determinado tipo de biosensores ya que permite activar químicamente la superficie con monocapas auto-ensambladas (SAM)de tioles (figura 2.1).



Figura 2.1: Deflexión de un microcantilever cubierto con oro debido al ensamblamiento molecular sobre su superficie (Nanotechnology 21(2010), 075501).

El objetivo del análisis del modo de operación estático es obtener la ecuación que gobierna la deflexión del microcantilever generada por una diferencia de estrés superficial. Para ello, en los siguientes apartados, se definen los conceptos de *estrés superficial*, *tensión superficial* y *energía superficial* y su relación mediante la ecuación de Shuttlerworth. La ecuación de movimiento de una micropalanca se obtiene empleando la mecánica continua¹ mediante los tensores de estrés, deformación y elasticidad relacionados por la ley de

 $^{^1 \}rm{Una}$ breve introducción a la mecánica continua se expone en el Capítulo A

Hooke. La aplicación de la mecánica de películas delgadas permite obtener una aproximación simplificada de la ecuación del movimiento del extremo libre del microcantilever, a partir de la cual se obtiene la ecuación de Stoney que relaciona la deflexión con la diferencia de estrés superficial.

2.1.1.1. Estrés, tensión y energía superficial

De todos los parámetros que intervienen en la física de los dispositivos micro-mecánicos, tres de ellos son generalmente confundidos: la tensión superficial, el estrés superficial y la energía libre de superficie. El origen de esta confusión reside en la terminología empleada por muchos autores, dado que en determinadas ocasiones el valor numérico de estos parámetros es idéntico. Hoy en día aun no se ha llevado a cabo la estandarización del uso de estos parámetros, dada la dificultad de obtener valores experimentales que avalen las teorías presentes en la literatura.

La tensión superficial se define como el trabajo por área necesario para crear una nueva superficie reversible, ya sea por división o por el incremento de átomos en la superficie [59]. Esta acción de transferir átomos de una zona a otra se produce en deformaciones plásticas o en la deformación de fluidos, donde los átomos poseen una mayor libertad de movimiento.

El estrés superficial se define como el trabajo reversible por unidad de área necesario para estirar elásticamente un sólido, provocando un aumento en su superficie. Esto implica la variación de la distancia entre los átomos de la superficie [59]. En este caso el número de átomos en la superficie permanece constante y solo se modifica la distancia entre ellos [60]. Esta propiedad tiene lugar en las deformaciones elásticas.

La figura 2.2 muestra el comportamiento de las moléculas de cierto material sometido a una fuerza y su relación con las definiciones de *tensión superficial* y *estrés superficial*.

La ecuación más extendida que relaciona el estrés superficial (γ) con la energía energía total libre de superficie de Helmholtz H por unidad de área (A) fue propuesta por Shuttlerworth (ecuación 2.1) [61]:

$$\gamma = F + A \frac{\partial F}{\partial A}$$
 donde $F = \frac{H}{A}$ (2.1)

La ecuación 2.1 se ha considerado como una de las más importantes de la física de superficie, interpretándola como la ecuación termodinámica que expresa el exceso de estrés superficial de una superficie sólida. Su desarrollo



Figura 2.2: Diferencias entre estrés superficial y tensión superficial cuando se ejerce una fuerza F en un material.

comenzó con los trabajos realizados por Gibbs en el campo de la termodinámica para líquidos [62] y fue actualizado para sólidos por parte de Shuttlerworth, Couchmann-Davison y Lippman. Esta ecuación ha sido empleada y analizada por multitud de autores que han tratado de confirmarla [63] [64]. Sin embargo, otros autores la han considerado inconsistente [65] [66] y otros simplemente como mal interpretada [67].

2.1.1.2. Estrés y deformación de una micropalanca

El análisis de la deflexión de una micropalanca, desde el punto de vista de la mecánica continua, hace uso de los tensores de estrés σ y de deformación ε , relacionados a través de la ley de Hooke, y el tensor de elasticidad (α):

$$\sigma_{ij} = \sum_{k,l} \alpha_{ijkl} \varepsilon_{kl} \tag{2.2}$$

Donde i, j, k, l toman valores de las coordenadas x, y, z. El tensor de elasticidad α es un tensor de orden cuatro, que representa las propiedades del material y a menudo depende de parámetros como la temperatura o presión. Considerando medios homogéneos e isótropos, se puede escribir la ley de Hooke en función

de los parámetros del material como²:

$$\sigma_{ij} = 2G\varepsilon_{ij} + \lambda\varepsilon_{kk}\delta_{ij} \quad \text{Donde} \begin{cases} \delta_{ij} = 1 \quad \forall i = j, \quad \delta_{ij} = 0 \forall \quad i \neq j \\ G = \frac{E}{2(1+\nu)} \\ \lambda = \frac{\nu E}{(1+\nu)(1-2\nu)} \\ \varepsilon_{kk} = (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) \end{cases}$$
(2.3)

Donde E es el módulo de Young, ν es el coeficiente de Poisson, δ_{ij} es la delta de Kronecker, λ es el primer parámetro de las constantes de Lamé y G es el módulo de elasticidad transversal y segunda constante de Lamé.

Para el caso especial de una micropalanca, simplificando las relaciones anteriores en el plano x, y, se puede obtener que la deformación y estrés normal $(\varepsilon_{zz}, \sigma_{zz})$ solo se anulan simultáneamente cuando el coeficiente de Poisson es nulo $(\nu = 0)$. Por lo tanto, se pueden distinguir dos casos particulares: de estrés plano y de deformación plana.

$$\begin{cases} \sigma_{zz} = \sigma_{xz} = \sigma_{yz} = 0 & \text{Estado de estrés plano} \\ \varepsilon_{zz} = \varepsilon_{xz} = \varepsilon_{yz} = 0 & \text{Estado de deformación plana} \end{cases}$$
(2.4)

El comportamiento de una micropalanca sometida a un cambio de estrés superficial se asemeja al caso de estrés plano, dado que las componentes de estrés normal al plano x, y son nulas, por lo que el número de ecuaciones de la ecuación 2.5 para el caso en estudio quedaría reducida a:

$$\begin{cases} \varepsilon_{xx} = \frac{1}{E} [\sigma_{xx} - \nu(\sigma_{yy})] \\ \varepsilon_{yy} = \frac{1}{E} [\sigma_{yy} - \nu(\sigma_{xx})] \\ \varepsilon_{zz} = -\frac{\nu}{E} (\sigma_{xx} + \sigma_{yy}) \\ \varepsilon_{xy} = \frac{(1+\nu)}{E} \sigma_{xy} \\ \varepsilon_{yz} = 0 \\ \varepsilon_{xz} = 0 \end{cases}$$
(2.5)

 $^{^2\}mathrm{El}$ desarrollo de las ecuaciones se muestra en la sección A.4

Se observa como la componente de deformación ε_{zz} no es nula, lo que implica que se produce una deformación fuera del plano x, y. Con el resto de componentes de deformación se puede reescribir el tensor de elasticidad α reduciéndolo a una matriz de 3x3 denominada matriz de rigidez:

$$\begin{bmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{xy} \end{bmatrix} = \frac{E}{(1+\nu)(1-2\nu)} \begin{bmatrix} 1-\nu & \nu & 0 \\ \nu & 1-\nu & 0 \\ 0 & 0 & 1-2\nu \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varepsilon_{xx} \\ \varepsilon_{yy} \\ \varepsilon_{xy} \end{bmatrix}$$
(2.6)

Obtener una solución analítica de las ecuaciones que relacionan el estrés y la deformación para calcular el desplazamiento del extremo libre de una micropalanca anclada es muy complejo. En cambio se puede obtener por métodos numéricos, empleando elementos finitos o empleando aproximaciones que sustituyan la diferencia de estrés superficial de las caras de la micropalanca por un conjunto de momentos que actúen en el extremo libre.

2.1.1.3. Mecánica de películas delgadas

Para el calculo del desplazamiento se considera el principio de Saint-Venant, donde el resultado de aplicar una distribución de fuerza y momentos en una región discreta de un sólido puede ser sustituida por otra distribución de fuerza y momentos que genere el mismo resultado en el sólido elástico en la zona en estudio, siempre que se observe a una distancia lo suficientemente alejada (alrededor de cinco veces el diámetro del área sobre la que se aplica la fuerza [68]).

La ecuación del movimiento de una micropalanca se obtiene aplicando el principio de Saint-Venant y el modelo desarrollado por J. Bernoulli y L.Euler denominado *"Teorema de Euler-Bernoulli para micropalancas delgadas"*. Según estos teoremas el resultado de aplicar una fuerza transversal es la generación de un momento transversal a la propia fuerza y al eje de la micropalanca.

Considerando una micropalanca sometida a diferencias de estrés superficial, una de sus caras está sujeta a estrés tensivo y, por lo tanto, su área aumenta. De la misma forma, la otra superficie está sujeta a un estrés compresivo por lo que su área es inferior a la cara opuesta. Por lo tanto, debe existir un plano paralelo a ambas superficies que no vea modificada su área, al que se le conoce como *eje o superficie neutra*. Esta situación se puede observar en la figura 2.3-a.

Para que este modelo tenga validez la micropalanca debe cumplir las siguientes condiciones:



Figura 2.3: Deformación del microcantilever: a) deflexión del microcantilever; b) sección del microcantilever bajo deformación.

- El material debe ser elástico, homogéneo e isótropo.
- Debe tener un espesor uniforme y simétrico respecto a su eje neutro.
- La relación de aspecto de la micropalanca debe cumplir que $L \ll b$ y $L \ll h$, donde L, b y h son la longitud, ancho y espesor del microcantilever respectivamente. Bajo estas condiciones la micropalanca se encuentra en un estado de *estrés plano*, con estrés de cizalladura despreciable.
- Las fuerzas y torques aplicados al microcantilever deben ser suficientemente pequeños para que su comportamiento sea lineal.

Partiendo de un microcantilever bajo las condiciones anteriormente descritas y sometido a una fuerza puntual en el extremo libre (figura 2.3-b), se puede realizar la aproximación:

$$ds \approx r d\theta \tag{2.7}$$

Donde ds es la distancia entre dos puntos vecinos y r el radio de curvatura del microcantilever definida como: la distancia existente entre estos puntos y el punto de corte de las perpendiculares que crean con el eje neutro del microcantilever. La inversa del radio de curvatura se define como *curvatura del microcantilever*, κ . El ángulo θ es el ángulo que forman las perpendiculares de los dos puntos y z el desplazamiento del eje neutro respecto a su posición original:

$$\kappa = \frac{1}{r} = \frac{d\theta}{ds} \tag{2.8}$$

Para desplazamientos pequeños se puede aproximar $ds \approx dx$. Definiendo la función de desplazamiento del microcantilever en función de la pendiente en cada uno de sus puntos como $u_z(x)$ se tiene:

$$\tan \theta = \frac{du_z(x)}{dx} = u'_z(x) \tag{2.9}$$

Por lo tanto, derivando a ambos lados de la ecuación 2.9 e igualando ambas definiciones de la curvatura, se obtiene:

$$\kappa = \frac{d\theta}{dx} = \frac{u''_z(x)}{1 + u'_z(x)^2} \tag{2.10}$$

Dado que $u'_z(x)^2 \ll 1$, y obteniendo el momento M en la dirección x ejercido por una variación en la longitud debida a la curvatura, se puede relacionar el radio de curvatura r con el momento de inercia transversal I del microcantilever mediante la *ecuación de Euler-Bernoulli*:

$$\kappa = \frac{1}{r} \approx \frac{d^2 u_z(x)}{dx^2} = \frac{M}{EI}$$
(2.11)

Donde E es el modulo de Young. Sustituyendo el valor del momento para una fuerza puntual en el extremo libre e integrando la ecuación de Euler-Bernoulli sobre la longitud del microcantilever se obtiene su ecuación de deflexión:

$$u_z(x) = \frac{F}{6EI}(3Lx^2 - x^3) \tag{2.12}$$

Considerando un comportamiento lineal de la deflexión del microcantilever, según la ley de Hooke, se cumple:

$$F = ku_z \tag{2.13}$$

Donde k representa la constante elástica del microcantilever y u_z la deflexión. Sustituyendo en la ecuación 2.12 se obtiene la constante elástica de un microcantilever de longitud L:

$$k = \frac{Ebh^3}{4L^3} \quad \| \quad \text{Para} \quad I = \frac{bh^3}{12} \tag{2.14}$$

La ecuación de Euler-Bernoulli (ecuación 2.11) se puede aplicar a cualquier distribución de fuerzas y momentos sobre el microcantilever. Bajo condiciones de equilibrio donde el balance de fuerzas y de momentos deben ser nulos, se puede obtener la deflexión del microcantilever para una distribución de fuerzas f(x) [68]:

$$\frac{d^4 u_z(x)}{dx^4} = \frac{f(x)A}{EI}$$
(2.15)

Siendo A el área de la sección transversal de la micropalanca. Esta ecuación es aplicable también en el estudio dinámico del microcantilever cuando se analiza su respuesta en función del tiempo.

2.1.1.4. Ecuación de Stoney

En los biosensores nano-mecánicos que operan en modo estático, la deflexión generada por la interacción del analito en una de sus superficies es equivalente a la generada por la deposición de una película delgada bajo estrés. El estudio del radio de curvatura de la estructura permite obtener información sobre el estrés superficial generado por esta nueva película. Este efecto fue estudiado por G.C.Stoney [69]. Su trabajo proporciona la relación de la fuerza por unidad de sección transversal de la película o *estrés normal* P (según nomenclatura de Stoney) y el radio de curvatura r que se genera [70]:

$$Pt = \frac{Eh^2}{6r} \tag{2.16}$$

Si se combina la ecuación 2.16 con la ecuación de Euler-Bernoulli (ecuación 2.11) se puede relacionar el radio de curvatura r con el cambio de fuerza por unidad de longitud $\Delta \sigma$ (diferencia de estrés superficial) de la lámina bajo estrés:

$$\Delta \sigma = \frac{Eh^2}{6r(1-\nu)} \tag{2.17}$$

Donde h es el espesor de la película delgada, E el modulo de Young y ν el coeficiente de Poisson. El uso de esta ecuación está muy extendido en el análisis de sensores nano-mecánicos, aunque solo es correcta con algunas suposiciones:

• El espesor de la película y del sustrato deben ser pequeños comparados con el ancho del microcantilever.

- El espesor de la película debe ser mucho menor que la del sustrato.
- El material del sustrato debe ser homogéneo, isótropo y linealmente elástico.
- La película debe ser isótropa.
- Todas las componentes del estrés en la dirección del espesor se anulan, y las rotaciones y deformaciones son infinitesimalmente pequeñas.

La ecuación de Stoney es ampliamente utilizada en la literatura para calcular el estrés superficial de microcantilevers, aunque esta considera la influencia del anclaje como despreciable. Esto solo es válido cuando la relación entre la longitud y su espesor es mucho mayor a la unidad y tiende a infinito $L/b \to \infty$. Varios autores han estudiado el efecto del anclaje en condiciones en las que L/b >> 1 [71] [72] [28].

Además del anclaje, para la validez de la ecuación de Stoney, se debe cumplir que el espesor del microcantilever sea varias veces mayor que el espesor de la capa biológica, de lo contrario la ecuación de Stoney no se cumple ya que para microcantilevers muy delgados el tensor de deformación induce un mayor estrés al microcantilever [73].

2.1.1.5. Relación entre la deflexión y el estrés superficial

Los sistemas experimentales que miden la respuesta de un microcantilever, ya sea con fines topográficos como los microcantilever de AFM, o cuando se emplean como biosensores, basan su principio de medida en obtener su deflexión. Por lo tanto, se debe encontrar una ecuación que relacione esta distancia con el estrés superficial al que es sometido el microcantilever.

Considerando deflexiones pequeñas y una deformación circular del microcantilever, la relación entre el radio de curvatura r y el ángulo del vector normal θ del punto situado en el extremo del microcantilever p viene dada por (ver figura 2.4):

$$\theta_p \approx \frac{L}{r}$$
(2.18)

Sustituyendo esta relación en la ecuación de Stoney se obtiene:

$$\Delta \sigma \approx \frac{Eh^2}{6L(1-\nu)} \theta_p \tag{2.19}$$



Figura 2.4: Parámetros geométricos de la deflexión de un microcantilever

Para obtener la relación entre la deflexión y el ángulo θ_p se calcula la pendiente en cada punto a lo largo del eje x considerando una deformación circular pura:

$$\tan \theta = \frac{du_z(x)}{dx} \approx \frac{x}{\sqrt{r^2 - x^2}} \tag{2.20}$$

Dado que el radio de curvatura r es mucho mayor que la longitud del microcantilever L, este se puede obtener integrando la ecuación 2.20 y calculando el valor para x = L:

$$r = \frac{L^2}{2\Delta z} \tag{2.21}$$

Donde Δz es el desplazamiento vertical del eje neutro del microcantilever. Sustituyendo en la ecuación 2.18:

$$\theta_p = \frac{2\Delta z}{L} \tag{2.22}$$

Por lo tanto, sustituyendo en la ecuación 2.19 se obtiene la relación entre el estrés superficial y la deflexión de un microcantilever rectangular como:

$$\Delta \sigma \approx \frac{Eh^2}{3L^2(1-\nu)} \Delta z \tag{2.23}$$

Como se introdujo en el sección 2.1.1.4 este desplazamiento causado por la diferencia de tensión superficial no tiene en cuenta el anclaje del microcantilever. Considerando la función de desplazamiento del extremo del microcantilever obtenido por el modelo de Euler-Bernoulli (ecuación 2.12), se puede calcular el ángulo θ_p para $u_z(L) = \Delta z$ como:

$$\theta_p \approx \frac{du_z(x=L)}{dx} = \frac{3}{2L}\Delta z$$
(2.24)

De esta forma la relación del desplazamiento con la diferencia de estrés superficial se puede escribir de la forma:

$$\Delta \sigma \approx \frac{Eh^2}{4L^2(1-\nu)} \Delta z \tag{2.25}$$

Esta ecuación es más exacta que la presentada por Stoney, sin embargo esta no es universal y depende de las dimensiones y propiedades físicas del material del microcantilever. Sader et al. incorporaron estos factores y establecieron varias ecuaciones para el estudio de la defexión de diversas estructuras [28], obteniendo ecuaciones más complejas que tienen en cuenta estos factores en el anclaje. Otra simplificación hace uso de una constante K para ajustar los valores de deflexión [74]:

$$\Delta \sigma \approx \frac{Eh^2}{3KL^2(1-\nu)} \Delta z \tag{2.26}$$

2.1.2. Modo de operación dinámico

El modo dinámico se basa en el estudio de las propiedades dinámicas del microcantilever, analizando la variación de su respuesta en frecuencia, al modificar la masa efectiva del microcantilever cuando se depositan las moléculas a detectar en su superficie. Este modo de operación elimina los problemas derivados del efecto bimetálico, producido al depositar una capa de oro en solo una de las superficies del microcantilever, y de esta forma generar un cambio de tensión superficial entre las caras del microcantilever al producirse la interacción biomolecular.

La respuesta dinámica de los microcantilevers está definida por dos parámetros fundamentales que describen su comportamiento y su sensibilidad: su frecuencia de resonancia y su factor de calidad. La frecuencia de resonancia fundamental de un microcantilever es la frecuencia con la que oscila en torno a su punto de equilibrio. El factor de calidad se define como la relación entre la frecuencia de resonancia y su ancho de banda a 3dB (ver figura 2.5).



Figura 2.5: Parámetros dinámicos del microcantilever: frecuencia de resonancia y factor de calidad.

2.1.2.1. Modelo del oscilador armónico

El comportamiento dinámico de un microcantilever se puede aproximar al del oscilador armónico amortiguado y forzado, con frecuencia angular de resonancia igual a:

$$w_0^2 = \frac{k}{m} \quad \Rightarrow \quad w_0 = \sqrt{\frac{k}{m}}$$
 (2.27)

Donde k es la constante elástica del microcantilever y m su masa. Si se ejerce una fuerza periódica $F_0 e^{iw_r t}$, de valor máximo F_0 y de frecuencia angular w_r , y considerando que el microcantilever se encuentra en un medio que ofrece una fuerza de amortiguamiento dependiente de la velocidad (fuerza de rozamiento), con una constante de amortiguamiento igual a b, la ecuación diferencial del movimiento del microcantilever es:

$$\frac{d^2 u_z}{dt^2} + 2\gamma \frac{du_z}{dt} + w_0 u_z = F_0 e^{iw_r t}$$
(2.28)

Donde u_z es la posición con respecto al punto de equilibrio y el factor de amortiguamiento queda definido como $\gamma = b/2m$.

La ecuación 2.28 es una ecuación diferencial lineal no homogénea cuya solución esta formada por la respuesta de la ecuación homogénea más la ecuación no homogénea. La solución no homogénea debe ser similar a la homogénea, pero con una frecuencia de respuesta similar a la de la fuerza, por lo tanto, se propone una solución tal que:

$$u_z(t) = u_0(w)e^{i(wt-\phi)}$$
(2.29)

Donde u_0 es la amplitud máxima de la oscilación y ϕ es la fase de dicha oscilación. Derivando esta solución y aplicándola en la ecuación diferencial se obtiene:

$$u_{0}(w) = \frac{F_{0}/m}{\sqrt{\left(w_{0}^{2} - w^{2}\right)^{2} + (2\gamma w)^{2}}}$$

$$\phi = \arctan\left(\frac{2\gamma w}{w_{0}^{2} - w^{2}}\right)$$
(2.30)

La amplitud máxima de la oscilación se obtiene cuando se cumple:

$$w^2 = w_0^2 - 2\gamma^2 \tag{2.31}$$

Se puede observar que la frecuencia de resonancia no coincide con la frecuencia natural del oscilador simple debido a la existencia de un coeficiente de amortiguamiento. De esta forma la amplitud máxima de oscilación A_{max} es:

$$A_{max} = \frac{F_0/m}{2\gamma\sqrt{w_0^2 - \gamma^2}}$$
(2.32)

En el caso ideal en el que no se considere el rozamiento, la amplitud se hace infinita cuando w es igual a la frecuencia de resonancia, pero bajo condiciones no ideales esta amplitud se hace máxima para valores cercanos a la frecuencia natural del oscilador(figura 2.6).

2.1.2.2. Frecuencia de resonancia

En la sección 2.1.1.3 se obtuvo la ecuación de deflexión del microcantilever para una distribución de fuerzas (ecuación 2.15) a partir de la teoría de



Figura 2.6: Respuesta de un resonador armónico amortiguado forzado.

Euler-Bernoulli. Para el estudio dinámico del microcantilever la distribución de fuerzas se debe a la vibración y por lo tanto depende del tiempo:

$$f(x) = -\rho \frac{\partial^2 u_z(x,t)}{dt^2}$$
(2.33)

Donde ρ es la densidad de masa por unidad de longitud. Sustituyendo en la ecuación 2.15 la ecuación de movimiento del cantilever se transforma en una ecuación diferencial parcial de cuarto orden:

$$EI\frac{d^4u_z(x,t)}{dx^4} + A\rho\frac{\partial^2u_z(x,t)}{dt^2} = 0$$
(2.34)

En este caso particular no se incluyen efectos disipativos, normalmente relacionados con el medio donde el microcantilever oscila. Para describir la ecuación del microcantilever en un medio viscoso se tienen en cuenta las fuerzas de resistencia del medio al movimiento, por lo que la ecuación 2.34 se transforma en [75]:

$$EI\frac{\partial^4 u_z(x,t)}{\partial x^4} + f_1\frac{\partial u_z(x,t)}{\partial t} + (f_2 + A\rho)\frac{\partial^2 u_z(x,t)}{\partial t^2} = 0$$
(2.35)

Donde f_1 es el factor de amortiguamiento debido la resistencia del fluido, y f_2 la masa adicional del microcantilever. La ecuación 2.35 se puede resolver mediante el método de separación de variables con solución no trivial, con la forma $u_z(x,t) = u_0(x)e^{iwt}$ y estableciendo las condiciones de contorno para un microcantilever anclado en uno de sus extremos se obtienen los autovalores para las frecuencias angulares de resonancia [76]:

$$w_n = \sqrt{\frac{EI\alpha_n^4}{(\rho A + f_2)L^4} + \frac{1}{4} \left(\frac{f_1}{\rho A + f_2}\right)^2}$$
(2.36)

Donde n representa el modo de vibración del microcantilever y el coeficiente α_n depende de las condiciones de contorno y del modo de vibración (1.875, 4.694, 7.855, ...) [77]. Para el caso particular de un microcantilever en un entorno gaseoso, f_1 es muy pequeña y dado que la masa de la micropalanca es también muy superior a la masa del gas añadido, $f_2 \ll \rho A$, f_2 también puede despreciarse. Por lo tanto, sustituyendo el momento de inercia del microcantilever, $I = bh^3/12$, y aplicando las aproximaciones anteriores la frecuencia de vibración del microcantilever queda simplificada a la expresión:

$$w_n \cong \alpha_n^2 \frac{h}{L^2} \sqrt{\frac{E}{12\rho}} \tag{2.37}$$

2.1.2.3. Factor de calidad

El factor de calidad Q se define como la relación entre la frecuencia y el ancho de banda a 3dB y expresa la calidad de la oscilación de un sistema, ya sea mecánico o electrónico. Cuanto mayor sea el factor de calidad mayor resolución en frecuencia posee el sistema, de ahí su importancia en el análisis de dispositivos mecánicos. El factor de calidad está relacionado con el amortiguamiento de un sistema mediante:

$$\zeta = \frac{1}{2Q} \tag{2.38}$$

El factor de calidad mide las pérdidas de energía relacionadas con los mecanismos de disipación tanto internos como externos:

$$\frac{1}{Q} = \sum i \frac{1}{Q_i} = \frac{1}{Q_{int}} + \frac{1}{Q_{ext}}$$
(2.39)

Los factores internos que afectan al factor de calidad del microcantilever están relacionados con su fabricación y estructura, como el material o su anclaje. Los externos son principalmente los ocasionados por la viscosidad del medio en el que se encuentra el microcantilever. Este tipo de factores disminuyen el factor de calidad de un microcantilever cuando trabaja en medios líquidos, reduciendo su sensibilidad al disminuir su frecuencia central y aumentar el ancho de banda de su respuesta, tal y como se muestra en la figura 2.7. Este efecto hace que la detección de interacciones biológicas en medios líquidos en modo dinámico exija un mayor esfuerzo, siendo necesario utilizar métodos externos de excitación del microcantilever que permitan reducir el ancho de banda.



Figura 2.7: Comparativa de la respuesta de un microcantilever en líquido y en gas.

Para microcantilevers bajo presión atmosférica el efecto de amortiguamiento dominante se debe a la viscosidad del medio, en cambio en el vacío el efecto dominante es el anclaje, varios autores han trabajado en la formulación teórica del factor de calidad [76] [78] [29] [79]. Hosaka et al. modeló al microcantilever con un conjunto de esferas de diámetro igual al ancho del microcantilever rodeado por un medio en condición de flujo laminar³ obteniendo una expresión

³Un flujo laminar implica un número de Reynols inferior a la unidad.

para el factor de calidad debido al medio dada por:

$$Q_n = \frac{\rho_c h b^2 w_n}{3\pi\eta b + \frac{3}{4}\pi b^2 \sqrt{2\rho_m \eta w_n}}$$
(2.40)

Donde ρ_c y ρ_m es la densidad del material del microcantilever y del medio respectivamente, y η es la viscosidad del medio.

Otro definición del factor de calidad hace uso de la energía almacenada en el microcantilever, de esta forma se puede escribir:

$$Q = 2\pi \frac{U_s}{U_d} \tag{2.41}$$

Donde U_s y U_d es la energía vibracional almacenada y disipada respectivamente por ciclo de operación. El valor del factor de calidad se puede obtener experimentalmente relacionado la amplitud máxima de oscilación en la frecuencia de resonancia con el ancho de banda a 3dB, por lo tanto:

$$Q = \frac{w_0}{\Delta w} \tag{2.42}$$

2.1.2.4. Ruido térmico del cantilever

La excitación de los microcantilevers a sus frecuencias de resonancias puede ser forzada, empleando fuerzas con frecuencias controladas o haciendo uso del *movimiento Browniano* de las moléculas del medio que lo rodean y chocan contra su superficie. Este último tipo de fuerza es aleatoria y no correlacionada. Al mismo tiempo existe una disipación de energía debido al amortiguamiento, donde la energía mecánica del microcantilever es disipada en forma de calor hasta alcanzar el estado de equilibrio térmico.

El estudio del ruido térmico del microcantilever permite determinar la fuerza y el cambio mínimo de estrés superficial que puede ser detectado experimentalmente. Para su cálculo se considera un sistema en equilibrio térmico, donde se cumple el teorema de equipartición, que proporciona una medida de la cantidad de energía térmica almacenada en cada modo de oscilación.

Cada término cuadrático independiente de la energía total tiene un valor medio igual a $k_bT/2$, donde k_b es la constante de Boltzmann y T la temperatura. Por otro lado, la energía potencial de una micropalanca sometida a un pequeño desplazamiento u_z esta dado por $k \langle u_z^2 \rangle/2$, donde k es la constante elástica de la micropalanca definida anteriormente (sección 2.1.1.3). De esta forma el promedio del cuadrado de la amplitud de vibración asociada a un modo de oscilación a una temperatura T, está dada por [80]:

$$\frac{1}{2}k_bT = \frac{1}{2}k\langle u_z^2\rangle \tag{2.43}$$

Considerando un ruido térmico con una distribución de potencia casi plana (ruido blanco), producida por una fuerza con distribución gausiana con valor medio cero y densidad espectral $\Psi_n(w)$ tal que:

$$\Psi_n(w) = \frac{2k_b k_n T}{\pi Q_n w_n} \tag{2.44}$$

La fuerza mínima se puede obtener a partir de la expresión de la ley de Hooke:

$$F_{min} = \sqrt{\frac{2k_b k_n T \Delta w}{\pi Q_n w_n}} \tag{2.45}$$

Donde k_b es la constante de Boltzmann, k_n la constante elástica para el modo de vibración n y T es la temperatura. El cambio mínimo de tensión superficial se obtiene sustituyendo en la ecuación de Stoney (ecuación 2.23) [81] [82]:

$$\Delta \sigma_{min} \approx \frac{Eh^2}{3L^2(1-\nu)} \sqrt{\frac{2k_b T \Delta w}{\pi Q_n k_n w_n}}$$
(2.46)

Donde E es el módulo de Young, ν el coeficiente de Poisson y L y h la longitud y espesor del microcantilever respectivamente. Igualando la ecuación 2.46 a la ecuación 2.23 se obtiene la amplitud del ruido térmico del microcantilever para un modo de vibración determinado:

$$\Delta z_{min} = \sqrt{\frac{2k_b T \Delta w}{\pi Q_n k_n w_n}} \tag{2.47}$$

2.2. Propagación de la luz en guías de ondas

La creación de dispositivos *lab-on-a-chip* requiere de la integración de múltiples elementos de un sistema en un espacio reducido. En el caso de dispositivos ópticos, la estructura fundamental que permite transmitir la luz desde la fuente hasta el transductor es la guía de onda. En los siguientes apartados se presentan los conceptos fundamentales de la luz como onda electromagnética, centrándonos en su propagación en las guías de onda, ya que es el elemento clave en el desarrollo de este trabajo.

2.2.1. La luz como onda electromagnética

La teoría ondulatoria considera a la luz como una radiación electromagnética compuesta por un campo vectorial eléctrico $\vec{\mathbf{E}}(\vec{r},t)$ y un campo vectorial magnético $\vec{\mathbf{H}}(\vec{r},t)$, siendo \vec{r} el vector de posición en un sistema de coordenada arbitrario y t el tiempo (figura 2.8).



Figura 2.8: La luz como onda electromagnética.

Las ecuaciones que relacionan los campos magnéticos y eléctricos de una onda electromagnética cuando se propaga en un medio están descritas por las *ecuaciones de Maxwell*:

Ley de Faraday
$$\nabla \times \vec{\mathbf{E}} = -\frac{\partial \vec{\mathbf{B}}}{\partial t}$$
 (2.48)

Ley de Ampere generalizada
$$\nabla \times \vec{\mathbf{H}} = \vec{\mathbf{J}} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}$$
 (2.49)

Ley de Gaus: Campo eléctrico
$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho$$
 (2.50)

Ley de Gaus: Campo magnético
$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$$
 (2.51)

Donde $\vec{\mathbf{D}}$ y $\vec{\mathbf{B}}$ representan la densidad del flujo eléctrico (o desplazamiento eléctrico) y magnético (o inducción magnética) respectivamente, $\vec{\mathbf{J}}$ es la densidad de corriente eléctrica y ρ la densidad de carga eléctrica.

2.2.1.1. Relaciones constitutivas

Para resolver las ecuaciones de Maxwell (2.48)-(2.51) es necesario relacionar $\vec{\mathbf{D}} \ \mathbf{y} \ \vec{\mathbf{E}}, \ \vec{\mathbf{J}} \ \mathbf{y} \ \vec{\mathbf{E}} \ \mathbf{y} \ \vec{\mathbf{H}} \ \mathbf{y} \ \vec{\mathbf{B}}$, en lo que se denominan las *relaciones constitutivas*. Estas relaciones introducen las propiedades eléctricas y magnéticas del medio de propagación. Para medios lineales, homogéneos e isótropos las relaciones constitutivas son:

$$\vec{\mathbf{D}} = \varepsilon_0 \varepsilon_r \vec{\mathbf{E}} = \varepsilon \vec{\mathbf{E}} \tag{2.52}$$

$$\vec{\mathbf{B}} = \mu_0 \mu_r \vec{\mathbf{H}} = \mu \vec{\mathbf{H}} \tag{2.53}$$

$$\vec{\mathbf{J}} = \sigma \vec{\mathbf{E}} \tag{2.54}$$

Donde ε es la permitividad eléctrica, μ la permeabilidad magnética y σ la conductividad eléctrica, ε_0 y μ_0 representan la permitividad y la permeabilidad en el vacío y ε_r y μ_r la permitividad y permeabilidad relativa que expresan como se ve afectado el material en presencia de un campo eléctrico o magnético.

En el caso de que los medios no sean lineales se incluyen términos que modifiquen el campo magnético y eléctrico. Por otro lado, si se consideran medios homogéneos, las propiedades ópticas del medio ε , μ y σ no dependen del vector de posición \vec{r} . Finalmente al considerar los medios isótropos, los valores de las propiedades ópticas del material son magnitudes escalares e independientes de la dirección de los vectores \vec{E} y \vec{H} , esto implica que los vectores \vec{D} y \vec{J} son paralelos al campo eléctrico \vec{E} , y el vector \vec{B} es paralelo al campo magnético \vec{H} . En caso de materiales anisótropos, estas constantes ópticas se transforman en magnitudes tensoriales.

2.2.1.2. Ecuación de onda en medio dieléctricos

Considerando medios lineales, homogéneos e isótropos sin cargas eléctricas $(\rho = 0)$ y combinando las ecuaciones de Maxwell (2.48)-(2.51) se obtienen dos ecuaciones diferenciales, una para el campo eléctrico y otra para el campo magnético, denominadas ecuaciones de ondas:

$$\nabla^2 \vec{\mathbf{E}} = \mu \sigma \frac{\partial \vec{\mathbf{E}}}{\partial t} + \mu \varepsilon \frac{\partial^2 \vec{\mathbf{E}}}{\partial t^2}$$
(2.55)

$$\nabla^2 \vec{\mathbf{H}} = \mu \sigma \frac{\partial \vec{\mathbf{H}}}{\partial t} + \mu \varepsilon \frac{\partial^2 \vec{\mathbf{H}}}{\partial t^2}$$
(2.56)

En el caso de un medio dieléctrico la conductividad eléctrica es igual a cero $(\sigma = 0)$, por lo que las ecuaciones de ondas (2.55) y (2.56) se escriben como:

$$\nabla^2 \vec{\mathbf{E}} = \mu \varepsilon \frac{\partial^2 \vec{\mathbf{E}}}{\partial t^2} \tag{2.57}$$

$$\nabla^2 \vec{\mathbf{H}} = \mu \varepsilon \frac{\partial^2 \vec{\mathbf{H}}}{\partial t^2} \tag{2.58}$$

Estas son las denominadas *ecuaciones vectoriales de Helmholtz*. La resolución de estas ecuaciones diferenciales aplicando las condiciones de contorno correspondientes proporciona las distribución de los campos electromagnéticos que se propagan por las guías de ondas. Asumiendo que los campos poseen una dependencia temporal armónica, y empleando la notación compleja de los campos para simplificar las operaciones en derivadas parciales se obtiene:

$$\vec{\mathbf{E}}(\vec{r},t) = Re\left(\vec{E}e^{jwt}\right) \tag{2.59}$$

$$\vec{\mathbf{H}}(\vec{r},t) = Re\left(\vec{H}e^{jwt}\right) \tag{2.60}$$

Donde w es la frecuencia angular de la onda. Sustituyendo en la ecuación de ondas:

$$\nabla^2 \vec{E} + k^2 \vec{E} = 0 \tag{2.61}$$

$$\nabla^2 \vec{H} + k^2 \vec{H} = 0 \tag{2.62}$$

Donde k se define como el *vector de onda* de una onda plana, y relaciona la velocidad de la luz en el medio de transmisión de la forma:

$$k \equiv w \sqrt{\varepsilon \mu} \tag{2.63}$$

La solución de las ecuaciones (2.61) y (2.62) representan ondas que se propagan a una velocidad v, denominada velocidad de fase:

$$\upsilon = \frac{1}{\sqrt{\varepsilon\mu}} \tag{2.64}$$

Esta velocidad de fase se puede representar como fracción de la velocidad de la luz en el vacío c:

$$v = \frac{c}{n}$$
 , $c = \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_0 \mu_0}}$, $c = \lambda v$ (2.65)

Donde λ es la longitud de onda y n es el índice de refracción del medio. De esta forma el vector de onda se puede escribir en función del índice de refracción como:

$$k = \frac{w}{v} \quad \Rightarrow \quad k = k_0 n \tag{2.66}$$

Las ecuaciones de Maxwell considerando las amplitudes complejas de los campos eléctrico y magnético que se propagan en un medio dieléctrico y no magnético ($\mu = \mu_0$), son:

Ley de Faraday
$$\nabla \times \vec{E} = -jw\mu_0 \vec{H}$$
 (2.67)

Ley de Ampere Generalizada
$$\nabla \times \vec{H} = jw\varepsilon\vec{E}$$
 (2.68)

Ley de Gaus: Campo eléctrico
$$\nabla \cdot \vec{E} = 0$$
 (2.69)

Ley de Gaus: Campo magnético
$$\nabla \cdot \vec{H} = 0$$
 (2.70)

Existen medios en los que la radiación de la luz es absorbida disipándose a medida que la onda avanza. El tratamiento matemático de este efecto implica que la permitividad eléctrica sea un valor complejo ε_c . De esta forma el índice de refracción es también un número complejo n_c compuesto por su parte real, descrita anteriormente, más un término imaginario denominado *índice de absorción* κ :

$$n_c = n + j\kappa \tag{2.71}$$

2.2.2. Reflexión en una interfaz

Considerando dos medios dieléctricos, homogéneos e isótropos, donde la luz viaja describiendo un camino recto y donde el frente de fase corresponde al frente de la onda electromagnética (según la figura 2.9). En este caso, cuando una onda de luz coherente A incide en la interfaz entre ambos medios con un ángulo θ_1 ésta será parcialmente reflejada y parcialmente refractada según las ondas B y C.





Según las leyes de la óptica geométrica la relación entre el rayo reflejado y el rayo refractado debe cumplir la ley de Snell:

$$n_1 \sin \theta_1 = n_2 \sin \theta_2 \tag{2.72}$$

Como el sen θ_2 no puede ser mayor que 1, la ecuación 2.72 cumple:

$$\frac{n_1}{n_2} \operatorname{sen} \theta_1 < 1 \tag{2.73}$$

Esta condición se puede cumplir en dos casos diferentes:

- 1. Siempre que $n_1 < n_2$
- 2. Si $n_1 > n_2$ la relación solo se cumple cuando θ_1 es mayor que un cierto ángulo, llamado ángulo crítico:

$$\sin \theta_c = \frac{n_2}{n_1}$$
 , $n_1 > n_2$ (2.74)

Cuando θ_1 toma el valor del ángulo crítico, el valor de θ_2 es $\pi/2$, y para valores de θ_1 mayores de θ_c el rayo refractado no existe y la onda de incidencia experimenta la *Reflexión Total*.

Para el análisis de la reflexión, desde el punto de vista de la óptica electromagnética, se considera que la onda se propaga en la dirección x, hasta que alcanza la interfaz entre ambos medios (figura 2.10). La relación entre la onda incidente, la reflejada y la transmitida se puede obtener definiendo las condiciones de contorno adecuadas para los campos en la interfaz.

Las ecuaciones (2.67) y (2.68) deben cumplir las condiciones de contorno en la interfaz, lo que implica la condición de conservación de las componentes tangenciales de los campos $\vec{\mathbf{E}}$ y $\vec{\mathbf{H}}$ y la conservación de las componentes normales de los campos vectoriales $\vec{\mathbf{D}}$ y $\vec{\mathbf{B}}$.

Se considera una onda con vector de onda k_i , incidente en una interfaz dieléctrica entre dos medios homogéneos con propiedades ópticas (ε_1, μ_1) y (ε_2, μ_2)(figura 2.10). En la interfaz la onda incidente se descompone en dos ondas, la transmitida y la reflejada con sus correspondientes vectores de onda k_t y h_r . Aplicando las condiciones de continuidad los vectores de onda tangencial de cada onda deben ser iguales:

$$[k_i]^T = [k_r]^T = [k_t]^T \quad \Rightarrow \quad k_i \operatorname{sen} \theta_i = k_r \operatorname{sen} \theta_r = k_t \operatorname{sen} \theta_t \tag{2.75}$$

Dado que los vectores de onda k_i y k_r son iguales al propagarse en el mismo medio, el valor de los ángulos θ_i y θ_r son de la misma forma iguales. Calculando las proyecciones de los vectores de onda en el eje de propagación x se obtiene la *ley de Snell*:

$$k_i \operatorname{sen} \theta_i = k_t \operatorname{sen} \theta_t \tag{2.76}$$

2.2.2.1. Polarización de las ondas electromagnéticas

Considerando la invarianza de la interfaz en la dirección z, es posible desacoplar las componentes de los campos en las ecuaciones de Maxwell. Esto da lugar a dos casos particulares de propagación que son independientes y que se distinguen por la orientación de cada campo, denominadas *polarización transversal eléctrica (TE)* y *polarización transversal magnética (TM)*.

La polarización transversal eléctrica (figura 2.10-a) se caracteriza por tener sólo la componente z del campo eléctrico $\vec{E_z}$, por lo que el campo eléctrico es perpendicular al plano de propagación de la radiación, plano XY. A través de las ecuaciones de Maxwell se puede obtener que dichos modos sólo poseerán las componentes $\vec{H_x}$ y $\vec{H_y}$ del campo magnético. Esto supone que tan solo es necesario el cálculo de la componente $\vec{E_z}$.

Análogamente, en la polarización transversal magnética (figura 2.10-b) el campo magnético es perpendicular al plano de propagación y solo existe la componente magnética $\vec{H_z}$ y las componentes eléctricas $\vec{E_x}$ y $\vec{E_y}$. Empleando las ecuaciones de Maxwell, a partir del cálculo de $\vec{H_z}$, se pueden obtener las componentes eléctricas.



Figura 2.10: Polarización de ondas electromagnéticas: a) transversal eléctrica (TE); b) transversal magnética (TM).

La teoría de ondas permite relacionar linealmente la onda incidente de amplitud A y la onda reflejada de amplitud B a través del *Coeficiente de Reflexión Complejo r*, dado por:

$$B = rA \tag{2.77}$$

El valor de r depende del ángulo de incidencia y de la polarización de la luz y está dado por las fórmulas de Fresnel [83]. En el caso de la reflexión total, el coeficiente de reflexión debe ser un número complejo de módulo unidad y su fase representa el cambio de fase que sufre la onda al incidir en la interfaz,
cuyo valor para ondas con polarización TE es:

$$\tan \phi_{TE} = \frac{\sqrt{n_1^2 \sin^2(\theta_1) - n_2^2}}{n_1 \cos(\theta_1)} \tag{2.78}$$

De la misma forma para una polarización transversal magnética el cambio de fase en la interfaz es:

$$\tan \phi_{TM} = \frac{n_1^2}{n_2^2} \frac{\sqrt{n_1^2 \operatorname{sen}^2(\theta_1) - n_2^2}}{n_1 \cos(\theta_1)}$$
(2.79)

2.2.3. Guías de onda

Las guías de ondas son estructuras que permiten transmitir una onda electromagnética de un punto a otro con un confinamiento espacial. Su estructura esta compuesta por un núcleo donde se propaga la onda de luz, y una cubierta y/o sustrato que protege al núcleo y permite que la luz permanezca en su interior. Esto se consigue mediante el control del índice de refracción de los materiales empleados.

Las guías de ondas más comunes son las fibras ópticas, empleadas como medio de transmisión en telecomunicaciones ya que permiten enviar señales con gran ancho de banda y bajas pérdidas. Las fibras ópticas son guías de ondas cilíndricas, fabricadas en vidrio o materiales plásticos. En cambio, las guías de ondas empleadas en óptica integrada son guías de ondas planas o acanaladas.

La guía de onda plana o *slab*, representada en la figura 2.11, es el diseño de guía de onda más simple. Su estructura se basa en capas de materiales con distinto índice de refracción, donde se distinguen tres planos: el sustrato con un índice de refracción n_s , donde se asienta la guía de onda, el núcleo de la guía con índice de refracción n_f y finalmente la cubierta con índice de refracción n_c . Con esta estructura de capas la luz se propaga libremente en el plano XZ, permaneciendo confinada tan solo en la dirección y, perpendicular a la dirección de propagación x.

Dependiendo de los índices de refracción del sustrato y la cubierta, las guías de onda *slab* pueden ser simétricas, cuando $n_c = n_s$, o asimétricas cuando $n_c \neq n_s$. En caso de que los índices de refacción permanezcan constantes en el eje de confinamiento las guías se denominan de *índice de salto* (figura 2.12-a), mientras que si el índice varía gradualmente en este eje se denominan de *índice gradual* (figura 2.12-b).

En las guías slabs la onda esta confinada tan solo en la dirección y. Para obtener un mayor control sobre la dirección de propagación de la luz se



Figura 2.11: Guía de onda slab: a) vista 3D; b) esquema guía de onda slab.



Figura 2.12: Guías de ondas según la distribución del índice de refracción: a) de salto; b) gradual.

emplean guías de ondas que poseen un confinamiento lateral en el eje z (guías acanaladas), lo que permite dirigir la luz de forma más controlada. Su clasificación depende de la forma y disposición del núcleo, estas se pueden clasificar en: guías empotradas (*strip embedded*) o guías elevadas (*strip loaded*) y dentro de estas últimas destacan las guías de núcleo sobrecargado (*rib waveguide*), donde una zona del núcleo se eleva sobre una guía *slab* para obtener el confinamiento lateral (ver figura 2.13).

En el desarrollo de los dispositivos de este trabajo se emplean guías de onda acanaladas, sin embargo, para la modelización y optimización de las dimensiones del dispositivo se consideran como guías de onda *slab*, debido a que la anchura del núcleo es muy superior a su altura.



Figura 2.13: Guías de ondas acanaladas: a) empotradas (*strip embedded*); b) elevadas (*strip loaded*); c) sobrecargadas (*rib waveguide*).

2.2.3.1. Guía de onda slab

La guía de onda *slab* es la estructura de guiado más simple, sirve como aproximación para el estudio de guías con una estructura más compleja, de ahí la importancia del análisis matemático de sus distintos modos de propagación. Para poder entender el comportamiento de la luz guiada en dos dimensiones, se hace uso del *índice efectivo*, que relaciona la velocidad de la luz en el vacío con su velocidad en la guía de onda. La resolución de las ecuaciones de Maxwell para la guía *slab* muestra que la energía electromagnética guiada se distribuye en un número concreto de configuraciones espacio-temporales que reciben el nombre de *modos de propagación*.

El análisis de la propagación de la luz en una guía de onda se puede simplificar mediante el modelo de la óptica geométrica, donde se describe la propagación de la luz empleando rayos perpendiculares al frente de la onda. En este caso es necesario que la condición de *Reflexión Total* se produzca en las interfaces núcleo-cubierta y núcleo-sustrato.

Considerando un corte transversal de una guía de onda *slab* como la de la figura 2.14, con un núcleo de espesor h e índice de refracción n_f , mayor al índice de refracción de la cubierta n_c y el sustrato n_S , tal que $n_f > n_s > n_c$, se obtienen los ángulos críticos en cada interfaz (ecuación 2.74):

$$\theta_c = \operatorname{sen}^{-1} \frac{n_c}{n_f} \quad , \quad \theta_s = \operatorname{sen}^{-1} \frac{n_s}{n_f} \tag{2.80}$$

Por lo tanto, para que se produzca la reflexión total interna, el ángulo de incidencia θ_i del haz dentro de la guía debe ser mayor que el ángulo crítico más restrictivo, es decir $\theta_i > \theta_s \ge \theta_c$. Sin embargo, no todos los haces que cumplem esta condición se propagan en la guía. Realizando el análisis de la fase de estos



Figura 2.14: Estructura de la guía de onda slab.

haces se obtiene la ecuación de autovalores de una guía de onda slab asimétrica (ecuación 2.81). La solución de esta ecuación determina un número discreto de modos de propagación de la guía de onda, definidos por el número entero m (orden del modo):

$$2k_0 n_f h \cos \theta_i - 2\theta_c - 2\theta_s = 2\pi m \tag{2.81}$$

Aunque este enfoque geométrico permite explicar de forma más sencilla y gráfica las condiciones de guiado, en comparación con la rigurosidad del modelo de óptica electromagnética, no explica el perfil de intensidad de cada modo de propagación dentro de la guía o el fenómeno de acoplamiento por proximidad entre dos guías. Por lo tanto, el objetivo del análisis electromagnético es obtener los campos electromagnéticos que pueden propagarse en la estructura de superficies planas, así como el perfil de cada modo de propagación.

Îndice efectivo. Descomponiendo el vector de onda k según la figura 2.14, se define la constante de propagación β como la proyección en el eje x del vector de onda:

$$\beta = k_o n_f \sin \theta \tag{2.82}$$

$$k_y = k_o n_f \cos \theta = \sqrt{k_0^2 n_f^2 - \beta^2}$$
 (2.83)

La constante de propagación de una onda de longitud de onda λ en una guía de índice n_f depende tan solo del ángulo θ . De la misma forma que para el número de ángulos que cumplen la condición de guiado (figura 2.15), el número de constantes de propagación también son limitados y se encuentran acotados por:

$$k_0 n_s < \beta < k_0 n_f \tag{2.84}$$



Figura 2.15: Constate de propagación de los modos guiados.

Dividiendo la constante de propagación por k_0 se define el índice efectivo de un modo de propagación. Este índice efectivo relaciona la velocidad de la luz en el vacío con la velocidad a la que se propaga dicho modo en la guía:

$$N = \frac{\beta}{k_0} = n_f \sin \theta \tag{2.85}$$

Por lo tanto, el valor del índice efectivo del modo de propagación debe tomar un valor entre los índices de refracción del núcleo y el sustrato:

$$n_f > N > n_s \quad , \quad n_s > n_c \tag{2.86}$$

Es conveniente normalizar el índice efectivo de un modo de propagación con respecto a los índices del núcleo y cubierta de la guía. De la misma forma es posible normalizar el espesor de la guía en función de la longitud de onda empleada:

$$b = \frac{N^2 - n_s^2}{n_f^2 - n_s^2} \quad \text{Índice efectivo normalizado}$$
(2.87)

$$V = k_0 h \sqrt{n_f^2 - n_s^2} \quad \text{Espesor normalizado} \tag{2.88}$$

Modos de propagación de la guía de onda slab Analizando el guiado de la luz desde el enfoque de los campos electromagnéticos, y considerando la guía de onda *slab* anteriormente descrita, invariante en el plano XZ, es posible realizar un tratamiento bidimensional del problema. Bajo estas condiciones las soluciones de las ecuaciones de ondas deben tener la forma:

$$\vec{E}(x,y) = \vec{E}(y)e^{j\beta x} \tag{2.89}$$

$$\vec{H}(x,y) = \vec{H}(y)e^{j\beta x}$$
(2.90)

Sustituyendo en las ecuaciones de ondas (2.57) y (2.58):

$$\frac{\partial^2 \vec{E}(y)}{\partial y^2} + (k_0^2 n_f^2 - \beta^2) \vec{E}(y) = 0$$
(2.91)

$$\frac{\partial^2 \vec{H}(y)}{\partial y^2} + (k_0^2 n_f^2 - \beta^2) \vec{H}(y) = 0$$
(2.92)

Estableciendo la condición de contorno por la cual los campos electromagnéticos tienden a cero cuando la componente y tiende a $\pm \infty$, la solución de las ecuaciones de ondas estarán formadas por un conjunto discreto y finito de soluciones, de la misma forma que para la óptica geométrica, denominados *modos guiados*, junto con un conjunto de soluciones que representan los modos de radiación.

Polarización transversal eléctrica (TE) Se considera una onda con polarización transversal eléctrica (TE), donde el campo eléctrico tan solo posee componente $\vec{E_z}(y)$, y a partir del cual se puede obtener las componentes $\vec{H_x}(y)$ y $\vec{H}_y(y)$ del campo magnético. Sustituyendo en la ecuación de onda para el campo eléctrico:

$$\frac{\partial^2 \vec{E}_z(y)}{\partial y^2} + (k_0^2 n^2 - \beta^2) \vec{E}_z(y) = 0$$
(2.93)

La solución de esta ecuación diferencial depende del signo de $(k_0^2 n_f^2 - \beta^2)$:

$$(k_0^2 n^2 - \beta^2) > 0 \quad \Rightarrow \quad \vec{E}_z(y) = A \cos k_y y + B \sin k_y y \tag{2.94}$$

$$(k_0^2 n^2 - \beta^2) < 0 \quad \Rightarrow \quad \vec{E_z}(y) = C e^{-\gamma y} + D e^{\gamma y} \tag{2.95}$$

La solución depende de la longitud de onda, de los índices de refracción n_f, n_s, n_s de la guía y de la constante de propagación β , para los que se dan los siguientes casos:

- 1. $n_s k_0 < \beta$, en este caso la solución es sinusoidal en todas las regiones de la guía denominándose *modos de radiación* (figura 2.16-a).
- 2. $n_c k_0 < \beta < n_s k_0$, en este caso la solución será sinusoidal en el núcleo y en el sustrato, y descenderá exponencialmente en la cubierta. A este modo se le denomina modo de radiación del sustrato (figura 2.16-b).
- 3. $n_s k_0 < \beta < n_f k_0$, en este caso la solución toma forma sinusoidal en el núcleo y exponencial en el sustrato y la cubierta, verificándose las condiciones de contorno en las interfaces y en el infinito. La mayor parte de la energía se propagará en el núcleo de la guía y decrecerá en la cubierta y el sustrato como campo evanescente. Estos son los denominados modos guiados (figura 2.16-c).
- 4. $\beta > n_f k_0$, en este caso el campo será exponencial en las tres regiones, con sus componentes tangenciales iguales en las interfaces (figura 2.16d). Este modo es físicamente imposible ya que el campo debe crecer indefinidamente en el sustrato y en la cubierta.

Se definen la constante de propagación transversal k_y y las constantes de atenuaciones transversales γ_i como:

$$k_y^2 = k_0^2 n_f^2 - \beta^2$$
 (núcleo) (2.96)



Figura 2.16: Modos de una guía de onda slab: a) modos radiados; b) modos de radiación del sustrato; c) modos guiados; d) físicamente no realizable.

$$\gamma_s^2 = \beta^2 - k_0^2 n_s^2 \quad \text{(sustrato)} \tag{2.97}$$

$$\gamma_c^2 = \beta^2 - k_0^2 n_c^2 \quad \text{(cubierta)} \tag{2.98}$$

Sustituyendo las constantes de propagación/atenuacion transversal en la ecuación de onda correspondiente a cada región y resolviendo las ecuaciones diferenciales, se obtiene una solución del modo de propagación. Aplicando las condiciones de contorno en el infinito $(y \to \pm \infty)$ y las condiciones de contorno de la conservación de las componentes tangenciales del campo E_z en las interfaces, junto con la condición de continuidad de la derivada en el eje y se obtiene:

$$E_{z} = Ae^{-\gamma_{c}y} \qquad \text{cubierta}$$

$$E_{z} = C\cos(k_{y}y) + D\sin(k_{y}y) \qquad \text{núcleo}$$

$$E_{z} = Ee^{-\gamma_{s}y} \qquad \text{sustrato} \qquad (2.99)$$

$$\frac{\partial \vec{E_{z}}(y)}{\partial y} = -jw\mu_{0}\vec{H_{x}}(y)$$

Con estas cuatro ecuaciones es posible resolver el sistema de cuatro incógnitas A,B,C y D. Aplicando las condiciones de contorno en ambas interfaces se obtiene la ecuación de autovalores o relación de dispersión de una guía de onda slab asimétrica, con un espesor de núcleo d:

$$\tan(k_y d) = \frac{\left(\frac{\gamma_c}{k_y}\right) + \left(\frac{\gamma_s}{k_y}\right)}{1 - \left(\frac{\gamma_c}{k_y}\right) \left(\frac{\gamma_s}{k_y}\right)}$$
(2.100)

La ecuación 2.100 relaciona los parámetros de una guía de onda *slab* asimétrica con la longitud de onda y la constante de propagación del modo guiado, y dado que la función tangente es una función periódica se verifica que:

$$\tan(k_y h) = \tan(k_y h + m\pi) \quad m = 0, 1, 2, 3, \dots$$
 (2.101)

Esto resulta en un número discreto de soluciones y de constantes de propagación β_m . Definiendo la asimetría de la guía de onda (a) como:

$$a = \frac{n_s^2 - n_c^2}{n_f^2 - n_s^2} \tag{2.102}$$

La ecuación 2.100 se puede escribir en función de los parámetros normalizados V (ecuación 2.88) y b (ecuación 2.87) junto con la asimetría de la guía a como:

$$\tan(V\sqrt{1-b} - m\pi) = \frac{\sqrt{\frac{b}{1-b}} + \sqrt{\frac{b+a}{1-b}}}{1 - \frac{\sqrt{b(b+a)}}{(1-b)}}$$
(2.103)

Aplicando funciones trigonométricas la ecuación 2.103 se puede escribir

como:

$$V\sqrt{1-b} = m\pi + \tan^{-1}\left(\sqrt{\frac{b}{1-b}}\right) + \tan^{-1}\left(\sqrt{\frac{b+a}{1-b}}\right)$$
(2.104)

La figura 2.17 muestra la representación gráfica de la solución numérica de la ecuación 2.104. Esta figura relaciona el espesor normalizado de la guía V y el índice efectivo normalizado b de un modo dado para un valor de la asimetría a de la guía en estudio. De estas gráfica se puede obtener el número de modos que se propagan en la guía.



Figura 2.17: Solución gráfica de la ecuación de dispersión para modos TE para una guía simétrica (a=0), y otra asimétrica (a=50).

A partir de la constante de propagación β o del índice efectivo normalizado b, es posible calcular los coeficientes transversales k_y , γ_c y γ_s y seguidamente el campo en cada región de la guía de onda:

$$E_{z}(y) = \begin{cases} A\left(\cos(k_{y}d) + \frac{\gamma_{c}}{k_{y}}\operatorname{sen}(k_{y}d)\right) e^{-\gamma_{c}(y-d)} & y \ge d\\ A\left(\cos(k_{y}y) + \frac{\gamma_{c}}{k_{y}}\operatorname{sen}(k_{y}y)\right) & d > y > 0\\ Ae^{\gamma_{s}y} & y \le 0 \end{cases}$$
(2.105)

De la ecuación 2.105 es evidente notar como el campo eléctrico, tanto en la cubierta como en el sustrato, decrece en lo que se ha definido como campo evanescente. La penetración de este campo evanescente se determina por la inversa de la constante de propagación transversal en el sustrato y la cubierta, $1/\gamma_s$ y $1/\gamma_c$ respectivamente. Se puede observar como a medida que el número del modo incrementa, el campo evanescente será mayor, ya que la constante de propagación de dichos modos decrece.

Polarización transversal magnética (TM). Para obtener la relación de dispersión de los modos transversales magnéticos, donde la única componente magnética es H_z , se parte de la ecuación de onda:

$$\frac{\partial^2 \vec{H}(y)}{\partial y^2} + (k_0^2 n_f^2 - \beta^2) \vec{H}(y) = 0$$
(2.106)

Operando de forma similar para la polarización TE, se obtiene la relación de dispersión en términos de parámetros normalizados para la polarización TM como:

$$\tan(V\sqrt{1-b}) = \frac{\frac{1}{\gamma_1}\sqrt{\frac{b}{1-b}} + \frac{1}{\gamma_2}\sqrt{\frac{b+a}{1-b}}}{1 - \frac{1}{\gamma_1\gamma_2}\frac{\sqrt{b(b+a)}}{(1-b)}}$$
(2.107)

Los parámetros γ_1 y γ_2 simplifican la relación de dispersión, cuyos valores son:

$$\gamma_1 = (n_s/n_f)^2 \quad , \quad \gamma_2 = (n_c/n_f)^2$$
 (2.108)

La solución del campo magnético transversalmente polarizado tiene la forma:

$$H_{z}(y) = \begin{cases} A\left(\cos(k_{y}d) + \frac{n_{f}^{2}\gamma_{c}}{n_{c}^{2}k_{y}}\operatorname{sen}(k_{y}d)\right) e^{-\gamma_{c}(y-d)} & y \ge d\\ A\left(\cos(k_{y}y) + \frac{n_{f}^{2}\gamma_{c}}{n_{c}^{2}k_{y}}\operatorname{sen}(k_{y}y)\right) & d > y > 0\\ Ae^{\gamma_{s}y} & y \le 0 \end{cases}$$
(2.109)

Existe una diferencia entre los modos propagados en TE y en TM, ya que existe una discontinuidad en la primera derivada del campo magnético de la componente $H_z(y)$ en las interfaces.

Espesor de corte. Un parámetro importante en el desarrollo de dispositivos que emplean guías de onda es conocer el espesor mínimo para que la guía soporte un modo de orden m para una longitud de onda determinada. Esto sucede cuando el índice efectivo del modo se encuentra cerca del índice de refracción del sustrato n_s ($n_s \ge n_c$). En ese caso el índice efectivo normalizado es cercano a cero ($b \approx 0$). Sustituyendo en la ecuación 2.103 y en la ecuación 2.107 se obtienen los espesores de corte normalizados para los modos de propagación TE y TM respectivamente:

$$V_{TE} = tan^{-1}(\sqrt{a}) + m\pi \tag{2.110}$$

$$V_{TM} = tan^{-1} \left(\frac{\sqrt{a}}{\gamma_2}\right) + m\pi \tag{2.111}$$

Es importante señalar que para una guía de onda simétrica, donde $n_c = n_s$, el espesor de corte es nulo. Esto implica que, para cualquier altura de la guía de onda, existirá el modo fundamental de propagación, aunque las pérdidas en la cubierta y sustrato serán muy elevadas debido a que la amplitud del campo en estas zonas es similar a la amplitud del campo en el núcleo.

2.2.3.2. Guía de onda acanalada

Las guías acanaladas confinan la onda electromagnética en dos direcciones y permiten la propagación en una sola dirección. Este tipo de guías son las empleadas para la implementación de dispositivos ópticos integrados y las utilizadas en este trabajo.

De la misma forma que para las guías planas la propagación de la luz puede analizarse dependiendo de la polarización TE o TM. Sin embargo, en las guías de ondas acanaladas no existe el análisis puro de polarización transversal eléctrica o magnética, sino que se representan dos tipos de modos transversales electromagnéticos (TEM). Estos modos de propagación se encuentran polarizados en los ejes y y z, con x como dirección de propagación.

Los modos que poseen la componente principal del campo eléctrico en el eje y se denominan modos E_{pq}^y o modos quasi-TM, ya que su tratamiento es

similar al de los modos TM de una guía *slab*, y donde los subíndices p y q representan el número de modos del campo eléctrico E_y en la dirección y y z respectivamente. De las misma forma, los modos E_{pq}^z se denominan modos quasi-TE.

El tratamiento riguroso de las guías de ondas acanaladas de forma similar al aplicado a las guías de ondas *slab* no es posible, por lo que para su análisis se proponen diversos métodos numéricos aproximados que proporcionan buenos resultados. Estos son el *método Marcatilli* que permite calcular los campos electromagnéticos de una guía de onda rectangular, y el *método del índice efectivo*, que es capaz de calcular los modos que se propagan en una guía de onda de geometría arbitraria, siendo este último el más empleado.

2.2.4. Acoplamiento de modos

La introducción de la onda electromagnética dentro de una guía de onda se puede realizar empleando principalmente tres técnicas como son: el acople directo (*end-fire coupling*), mediante el uso de fibras ópticas, lentes u objetivos figura 2.18-a), empleando prismas de acople o finalmente mediante redes de difracción con dimensiones micro/nanométricas(figura 2.18-b) [8]. Entre estas opciones el acople directo de la fuente de luz a la guía de onda es la más sencilla y más empleada en entorno de laboratorios, y es el método empleado en este trabajo debido a su sencillez de uso frente a la dificultad añadida de la fabricación de redes de difracción. El uso de redes de difracción se ha practicado con anterioridad por nuestro grupo en guías de ondas en cantilevers ópticos [84].



Figura 2.18: Sistema de acoplamiento de la luz en una guía de onda plana: a) acopledirecto; b) redes de difracción.

La eficiencia teórica de acoplamiento de la luz en la guía de onda se define mediante el coeficiente de acoplamiento, que relaciona la potencia de la fuente óptica del sistema a la entrada, y la potencia que se introduce a la guía de onda. Como se ha estudiado anteriormente, una guía de onda puede aceptar varios modos de propagación, por lo que este coeficiente de acoplamiento esta asociado a un modo de propagación determinado.

$$\eta_m = \frac{\text{Potencia introducida a la guía para el modo m}}{\text{Potencia de la fuente óptica}}$$
(2.112)

El valor del coeficiente de acoplamiento depende del perfil del haz incidente y del perfil del modo correspondiente. Este puede ser calculado mediante la integral del solapamiento de estos dos perfiles:

$$\eta_m = \frac{\left[\int A(y)B^*(y)dy\right]^2}{\int A(y)A^*(y)dy\int B(y)B^*(y)dy}$$
(2.113)

Donde A(x) es la amplitud de la distribución del haz de entrada y B(x) es la amplitud de la distribución del modo de orden m.

Capítulo 3

Simulación y diseño de los cantilevers ópticos

La optimización de la sensibilidad de los dispositivos opto-mecánicos pasa por el estudio de parámetros físicos, así como sus dimensiones, que intervienen en la sensibilidad de los microcantilevers, de tal forma que se maximicen tanto la sensibilidad mecánica como la óptica. Para llevar a cabo esta tarea se ha hecho uso de simulaciones numéricas por elementos finitos, empleando un paquete informático de simulación *multifísica* llamado *Comsol Multiphysics* [85]. Este abarca un amplio número de fenómenos físicos que se pueden simular, denominadas *interfaces físicas* o simplemente *físicas*, por ejemplo: mecánica de sólidos, fluidos, ondas electromagnéticas, efectos térmicos, acústica, etc.. Estas *físicas* pueden ser combinadas para estudiar la interacción entre ellas. En este trabajo se estudiará tanto la respuesta mecánica como óptica del sistema y la combinación de ambas.

El análisis de las dimensiones del dispositivo comienza con el cálculo de las propiedades mecánicas que maximicen la detección de una interacción biomolecular, como son la deflexión mínima detectable y la frecuencia de resonancia. Esto permite realizar la comparación entre la teoría mecánica anteriormente expuesta en el sección 2.1 y las simulaciones numéricas realizadas para posteriormente emplearlas en el estudio óptico. El objetivo de las simulaciones ópticas es el análisis de la sensibilidad óptica del dispositivo en función de sus dimensiones, así como su respuesta óptica al producirse la deflexión.

3.1. El cantilever óptico

El principio de funcionamiento del cantilever óptico (OWC) consiste en que este actúe como una guía de onda por la que se propaga la luz. El esquema del cantilever óptico se muestra en la figura 3.1. La luz es introducida desde un punto alejado del anclaje del OWC por medio de una guía de onda, denominada guía de entrada, fabricada en nitruro de silicio Si_3N_4 con un índice de refracción $n_{Si_3N_4} = 2$, y con un espesor h_w y anchura b_w .



Figura 3.1: Principio de funcionamiento del cantilever óptico: a) vista general; b) sección del dispositivo.

El cantilever óptico, con una anchura b y longitud L_c , se encuentra desalineado en el eje vertical (y) respecto a la guía de entrada. El motivo de este desalineamiento se debe a la dificultad de encontrar materiales dieléctricos libres de estrés que puedan actuar como guía de onda en el rango visible. En trabajos anteriores, el uso del nitruro de silicio, depositado tanto por deposición química en fase vapor a baja presión (LPCVD), como por deposición asistida por plasma (PECVD), no dieron buenos resultados [53]. La solución propuesta consistió en el uso del óxido de silicio SiO_2 crecido térmicamente. Este material posee un índice de refracción de $n_{SiO_2} = 1,46$, y actúa como sustrato de las guías. La transferencia de la luz desde la guía de entrada hacia el OWC se produce principalmente por campo evanescente, como se estudiará en la sección 3.5.2. El principal inconveniente de este desalineamiento es la pérdida de potencia óptica en la interfaz, aunque en estado de deflexión cero del OWC, este desalineamiento incrementa la sensibilidad del dispositivo, como se estudiará en la sección 3.5.6.

Entre el final de la guía de entrada y el anclaje del OWC se establece una distancia de seguridad L_s . Esta distancia permite eliminar el estrés que se produce en la interfaz nitruro-óxido, que introduciría una deflexión inicial no deseada al cantilever óptico. Una correcta selección de esta distancia permite incrementar la eficiencia de la interfaz guía-cantilever, tal y como se estudiará

en la sección 3.5.3.

Muy próximo al extremo libre del OWC, a una distancia L_g denominada gap, se sitúa otra guía de onda, denominada guía de salida, del mismo espesor que la guía de entrada h_w , que recoge la luz y la transporta hasta un fotodiodo. El movimiento del OWC se traduce en un cambio en la eficiencia de acople entre este y la guía de recogida. Esto genera una variación de la potencia óptica incidente en el fotodiodo que puede ser detectada y almacenada para su procesamiento.

3.2. Parámetros del cantilever óptico

En la optimización de la sensibilidad del dispositivo optomecánico propuesto hay que tener en cuenta tanto la sensibilidad mecánica como la sensibilidad óptica. La elección de los materiales, así como las dimensiones de los elementos del dispositivo es de crucial importancia. En la figura 3.2 se clasifican las dimensiones del dispositivo en función de la sensibilidad a la que afectan.



Figura 3.2: Clasificación de los parámetros del diseño del cantilever óptico.

Atendiendo a la sensibilidad mecánica, según la ecuación de Stoney estudiada en la sección 2.1.1.4 y la relación obtenida con la deflexión en la ecuación 2.23 (reescrita en este apartado como ecuación 3.1), la deflexión aumenta con el cuadrado de la relación entre la longitud del microcantilever L_c y su espesor h_c . Por lo tanto, para microcantilevers diseñados para operar en modo estático, la mejora de la sensibilidad pasa por la fabricación de microcantilevers más largos y más delgados.

$$\Delta \sigma \approx \frac{Eh_c^2}{3L_c^2(1-\nu)} \Delta z \tag{3.1}$$

Atendiendo a la sensibilidad óptica, el número de variables que intervienen es mayor, debido a la incorporación de las guías de entrada y salida, junto con las dimensiones del propio cantilever óptico. Las dimensiones de estos elementos influyen en la forma en la que la luz se transmite entre ellos, y además afecta a la respuesta del dispositivo frente a su deflexión.

Del análisis de las dimensiones del dispositivo se observa como el espesor del cantilever óptico (OWC) h_c tiene un papel crítico, tanto para la sensibilidad mecánica como para la óptica, por lo que es necesario tomar especial atención en su elección.

El establecimiento de las dimensiones del dispositivo se realiza en fases diferentes, tal y como muestra la figura 3.2. Durante la fase del diseño de máscaras se definen la longitud (L_c) y anchura del OWC (b), la anchura de las guías (b_w) , la separación guía de entrada - OWC (L_s) y la de OWC - guía de recogida (L_g) . En la fase de fabricación se definen los espesores de las guías (h_w) y el espesor del OWC (h_c) .

3.3. Flujo de trabajo de las simulaciones

Para llevar a cabo los estudios de simulación del dispositivo es necesario realizar diversos pasos para definir el modelo geométrico y físico. A este modelo se le aplican variaciones de diversos parámetros para obtener el resultado en las condiciones establecidas.

En primer lugar es necesario definir el modelo geométrico de la estructura. Dependiendo del estudio a realizar puede estar descrita en 2 o 3 dimensiones. Es conveniente parametrizarla para poder estudiar la respuesta según sus dimensiones, como por ejemplo el espesor del cantilever óptico h_c . Este modelo geométrico puede crearse directamente en el editor de geometría de *Comsol* o emplear un programa CAD externo, como por ejemplo *Autodesk Inventor* [86] o *SolidWorks* [87].

Tras la creación de la geometría, es necesario definir los materiales que componen cada uno de los dominios del modelo geométrico, e introducir las propiedades físicas necesarias para realizar el estudio.

3.4. SIMULACIONES MECÁNICAS

El siguiente paso es la configuración de la *física* que se aplicará al modelo. En este paso se definen las condiciones de contorno que permiten obtener la solución a las ecuaciones planteadas por la *física* de la simulación.

Tras definir la geometría, materiales y la *física* el siguiente paso implica discretizar el modelo para poder llevar a cabo el cálculo de las soluciones. Para ello se crea un mallado de la geometría, cuya resolución depende de la *física* aplicada. Este es uno de los procesos más crítico del análisis de fenómenos con elementos finitos, ya que la precisión de la solución depende de la calidad y del número de nodos del mallado. Por otra parte, aumentar el número de nodos del mallado implica un coste computacional, por lo que se debe alcanzar un compromiso entre la precisión de la solución y el tiempo en el que se logra alcanzarla.

Finalmente se configura el estudio que se le aplicará al modelo y puede ser una solución estática, transitoria, búsqueda de autovalores, etc...

La ejecución de las simulaciones se ha realizado en un ordenador con un procesador Intel Xeon E5520 con 4 núcleos, que trabajan a una frecuencia de 2.27GHz, con 24GB de memoria RAM y con un sistema operativo Windows 2008 Server.

3.4. Simulaciones mecánicas

3.4.1. Cálculos iniciales

Tal y como se estudió en la sección 2.1.1.5 se puede definir la deflexión Δz de un microcantilever de longitud L_c y espesor h_c , para una diferencia de estrés superficial $\Delta \sigma$ como:

$$\Delta z \approx \frac{4L_c^2(1-\nu)}{Eh_c^2} \Delta \sigma \tag{3.2}$$

Los microcantilevers se fabricarán en óxido de silicio (SiO_2) , con un módulo de Young de $E = 70 \cdot 10^9 Pa$ y coeficiente de Poisson $\nu = 0, 17$. Considerando una diferencia de estrés superficial máxima de $\Delta \sigma = 0, 05 N/m$ [88], es posible obtener la figura 3.3 que relaciona la deflexión experimentada por el microcantilever en función de sus dimensiones, donde es directo apreciar como la deflexión sufrida por un microcantilever incrementa cuanto mayor es la relación entre su longitud y su espesor.

Para calcular la amplitud de oscilación de un microcantilever debido al ruido

CAPÍTULO 3. SIMULACIÓN Y DISEÑO DE LOS CANTILEVERS ÓPTICOS



Figura 3.3: Deflexión del microcantilever en función de su espesor y longitud

térmico es necesario calcular su frecuencia de resonancia, su factor de calidad y su constante elástica.

La frecuencia angular de resonancia del microcantilever, estudiada en la sección 2.1.2.2, se puede obtener de la ecuación 2.37:

$$w_n \cong \alpha_n^2 \frac{h}{L^2} \sqrt{\frac{E}{12\rho_c}} \tag{3.3}$$

La frecuencia del modo fundamental de resonancia ($\alpha_n = 1,875$), para microcantilevers de óxido de silicio, con una densidad $\rho_c = 2200 \ kg/m^3$, y diferentes dimensiones se muestra en la figura 3.4-a. Se puede observar como la frecuencia del modo fundamental aumenta cuando la longitud del microcantilever disminuye y aumenta su espesor.

El factor de calidad viene dado por la ecuación 3.4 (ver sección 2.1.2.3). El cálculo del factor de calidad para microcantilevers de distintas dimensiones, fabricados en óxido de silicio, de espesor h_c y anchura $b = 30 \ \mu m$, rodeado de aire a una temperatura de 25°, con una viscosidad $\eta = 1,85 \cdot 10^{-5} \ kg/ms$ y densidad $\rho_m = 1,1839 \ kg/m^3$, se muestra en la figura 3.4-b. En ella se puede observar como el factor de calidad aumenta cuando se reduce la longitud del



Figura 3.4: Frecuencia de resonancia y factor de calidad Q del microcantilever en función de sus dimensiones.

microcantilever y se aumenta el espesor.

$$Q_n = \frac{\rho_c h_c b^2 w_n}{3\pi\eta b + \frac{3}{4}\pi b^2 \sqrt{2\rho_m \eta w_n}}$$
(3.4)

Una vez obtenido los valores para la frecuencia de resonancia y el factor de calidad, se puede obtener el desplazamiento debido al ruido térmico, estudiado en la sección 2.1.2.4, dado por la ecuación 2.47:

$$\Delta z_{min} = \sqrt{\frac{2k_b T \Delta w}{\pi Q_n k_n w_n}} \tag{3.5}$$

En la figura 3.5 se muestra el ruido térmico del microcantilever según sus dimensiones. De la misma forma que para la deflexión, la amplitud de este ruido térmico está sujeta a las dimensiones del microcantilever, aumentando para microcantilevers más largos y más delgados, y cobra especial importancia en el modo de operación dinámico. Por el contrario, en medidas de deflexión, debido a la lenta respuesta de las interacciones biomoleculares, este ruido puede ser filtrado, careciendo de importancia al encontrarse en otra zona del espectro.



Figura 3.5: Amplitud del ruido térmico en función de las dimensiones del microcantilever.

3.4.2. Descripción del modelo de simulación

La simulación por métodos numéricos del comportamiento mecánico, tanto estático como dinámico del microcantilever, permite verificar los cálculos realizados y validar el modelo simulado. Posteriormente estos resultados pueden aplicarse a las simulaciones del comportamiento opto-mecánico del dispositivo. Para el análisis mecánico se ha empleado la interfaz de *Comsol* para *Mecánica de sólidos*.

La simulación del modelo comienza con la definición de los parámetros que definen las dimensiones del microcantilever, donde se define L_c como su longitud, h_c su espesor y b su anchura. A partir de estos parámetros se describe el modelo geométrico de la figura 3.6, donde se define un ortoedro con las dimensiones del microcantilever, unido a otro ortoedro mayor que hace de anclaje.



Figura 3.6: Geometría del modelo de simulación mecánico.

En el siguiente paso se incorporan las propiedades del óxido de silicio, con módulo de Young $E = 70 \cdot 10^9 Pa$, coeficiente de Poisson $\nu = 0, 17$, y densidad del material $\rho_c = 2200 \ kg/m^3$.

Para la configuración de la interfaz física de la mecánica de sólido se establece un material isótropo, y se definen las condiciones de contorno para un desplazamiento nulo de la base y cara trasera del ortoedro de anclaje, quedando el resto de la estructura sujeta a las fuerzas aplicadas (ver figura 3.6). Para introducir la diferencia de estrés superficial se define una distribución de fuerzas F a lo ancho de la arista superior del extremo libre del microcantilever, con una fuerza igual al estrés superficial dividido por la anchura del microcantilever b.

CAPÍTULO 3. SIMULACIÓN Y DISEÑO DE LOS CANTILEVERS ÓPTICOS

El mallado escogido para las simulaciones mecánicas es de tipo tetraédrico para la zona de anclaje, y cúbico para el microcantilever. Para el mallado cúbico se define una distribución homogénea de nodos en las aristas de la sección transversal, al que se le aplica un mallado rectangular, finalmente este mallado del plano frontal se propaga a lo largo del microcantilever. Esta estrategia reduce el tiempo invertido en el proceso de mallado a la hora de realizar cálculos paramétricos.



Figura 3.7: Mallado del modelo de simulación.

3.4.3. Simulaciones mecánicas

3.4.3.1. Deflexión del cantilever

Para validar el modelo se ha realizado un estudio estático del microcantilever al someterlo a una diferencia de estrés superficial de $\Delta \sigma = 0.05 N/m$ [88].

Para obtener el valor de la deflexión se toman los datos del desplazamiento en un punto del extremo libre (ver figura 3.8). Comparando los datos obtenidos de la simulación con los obtenidos de la aplicación de la ecuación 3.2, estos muestran un error cercano al 10%. Este error es debido a la relación L/bconsiderada [28]. Es posible corregir este error empleando la ecuación 2.26 [74] con K=1.195 reduciendo el error entre la simulación y el cálculo analítico por debajo del 1%.

Por lo tanto, el modelo simulado se ajusta a los cálculos realizados, obteniendo valores similares a los obtenidos por otros autores que han empleado otros paquetes de simulación como ANSYS para estudiar la estructura de los microcantilever [74].

72



Figura 3.8: Simulación de la deflexión de un microcantilever.

3.4.3.2. Frecuencia de resonancia

El cálculo numérico de la frecuencia de resonancia del microcantilever emplea un estudio para el cálculo de los autovalores de frecuencia (*eigenfrecuency*), donde se considera una estructura sin cargas. Mediante este estudio es posible obtener varios modos de vibración que se muestran en la figura 3.9. El error de las simulaciones con respecto a los cálculos analíticos se encuentra por debajo del 1 %, validando las simulaciones realizadas.



Figura 3.9: Modos de oscilación del microcantilever: a) modo fundamental; b) modo de primer orden; c) modo de segundo orden.

3.5. Simulaciones ópticas

Para obtener los datos de propagación se hace uso de la interfaz de *ondas electromagnéticas* de *Comsol*, donde se considerará que la onda se propaga con una polarización transversal eléctrica (TE).

El diseño del mallado de las estructuras empleadas en las simulaciones de propagación de ondas electromagnéticas es mucho más restrictivo que para los estudios de mecánica. Para este tipo de simulaciones, el tamaño mínimo del elemento del mallado debe ser al menos de un tercio de la longitud de onda, y este valor generalmente debe reducirse para alcanzar la convergencia. Este hecho transforma la tarea de mallado en un aspecto fundamental en la resolución del problema.

Para evaluar la sensibilidad del dispositivo, se define su eficiencia como el porcentaje de la potencia óptica introducida que alcanza la salida del mismo. Para su cálculo se hace uso de los parámetros de dispersión del sistema (Parámetros S), definiendo el parámetro S_{11} como la relación de potencia reflejada en la entrada del dispositivo y el parámetro S_{21} como la relación de la potencia óptica presente en la salida. Empleando este último parámetro se define la eficiencia del dispositivo como:

$$\eta = 100 \cdot 10^{S_{21}(dB)/10} \tag{3.6}$$

El análisis de la propagación de la luz en el dispositivo comienza con el estudio de los modos de propagación, tanto en las guías de entrada y salida como en el OWC. De esta forma se obtiene un intervalo de espesores que permiten la propagación del modo fundamental. Como se estudiará en las siguientes secciones, esta característica monomodal mejora la sensibilidad del dispositivo.

En una segunda fase se estudiará la interfaz entre la guía de entrada y el OWC. El objetivo es encontrar un intervalo de espesores donde la transferencia de potencia desde la guía al cantilever óptico se maximice, incluyendo una distancia de seguridad entre la guía de entrada y el cantilever óptico.

Tras obtener el intervalo de espesores donde se produce la máxima transferencia de potencia desde la guía de onda al OWC, se estudiará la interfaz entre el OWC y la guía de onda de recogida. En este punto se trabaja con el dispositivo al completo. El objetivo es encontrar aquellas dimensiones, tanto del OWC como de la guía, que maximicen la potencia de salida y como se ve afectada por el medio que rodea al OWC.

Finalmente se estudiará la variación de potencia en función de la deflexión del OWC. En este punto se combina la física de *mecánica de sólidos*, analizada en las sección 3.4.3, con la física de *ondas electromagnéticas*. Con estos resultados se puede obtener una figura de mérito que permite seleccionar las dimensiones óptimas del OWC.

74

3.5.1. Modos de propagación

En primer lugar se analizarán los modos de propagación tanto en la guía de onda de entrada como en el OWC. Para ello se propone un modelo geométrico en dos dimensiones que permite el cálculo de los modos de propagación para un confinamiento vertical.

Dado que la anchura de los componentes ópticos es mucho mayor que su espesor, se ha considerado el estudio de una guía de onda *slab*, analizando únicamente el confinamiento vertical de los modos de propagación.

3.5.1.1. Descripción del modelo óptico

El modelo físico a resolver (Modelo I) consta de la sección de una guía de onda *slab*, con entrada en x = 0, donde se calcula el perfil del campo eléctrico $E_z(y)$ para una polarización TE. La geometría del modelo consta de tres rectángulos que hacen de sustrato (h_s) , núcleo (h_f) y cubierta (h_c) , tal y como se muestra en la figura 3.10.



Figura 3.10: Modelo I: Estructura geométrica de la estructura slab.

El material escogido para el núcleo de la guía es el nitruro de silicio Si_3N_4 , con un índice de refracción $n_{Si_3N_4} = 2$. Para el sustrato y cubierta se ha seleccionado el óxido de silicio, cuyo índice de refracción es $n_{SiO_2} = 1,46$. Para ambos materiales, a la longitud de onda de trabajo ($\lambda = 660 nm$), la parte imaginaria del índice de refracción es nula ($k_i = 0$).

La física del modelo resuelve la ecuación de onda del campo eléctrico E_z (ecuación 2.93). Para introducir el campo electromagnético en el modelo, se define un puerto de alimentación P1 a la entrada de la guía (x = 0). A la salida de la guía se define un puerto de salida P2 $(x = L_g)$. El uso de los puertos permite obtener los parámetros de dispersión del sistema. El resto del contorno del modelo se define como un conductor eléctrico perfecto.

Para el mallado de la guía slab se emplea una distribución rectangular en el núcleo y triangular en la cubierta y sustrato (Ver figura 3.11).



Figura 3.11: Mallado del Modelo I: a) mallado de la estructura; b) detalle del mallado en la zona de entrada.

Configurando dos estudios modales en los puertos P1 y P2 y realizando un estudio en frecuencia, que resuelva la ecuación de ondas para la longitud de onda de trabajo ($\lambda = 660 \ nm$), es posible conocer el perfil del campo en los puertos de entrada y salida, así como la propagación de la onda en la estructura.

3.5.1.2. Resultados: modos de las guías de onda

Modificando el espesor de la guía de onda y realizando el estudio de la propagación se obtiene el índice efectivo del modo propagado, así como el perfil del campo para cada espesor. Esto permite representar la relación entre el índice efectivo y el espesor de la guía, mostrada en la figura 3.12. Dado que la guía simulada es simétrica, esta acepta siempre el modo fundamental de propagación, por lo que se puede escoger un intervalo de espesores de la guía donde esta posee un comportamiento monomodal, seleccionando un espesor máximo de 200 nm.

En la figura 3.13-a se muestra la propagación de la onda en la guía *slab* para un espesor $h_w = 180 \ nm$. El perfil del campo para el primer modo de propagación se representa en la figura 3.13-b para distintos espesores de la



Figura 3.12: Índice efectivo de la guía de onda en función de su espesor.

guía. Se puede observar como para espesores muy pequeños, la mayor parte del campo eléctrico se propaga por la cubierta de la guía.

Calculando la eficiencia de la guía de onda se obtiene un valor muy próximo al 100 %, esto es lo esperado ya que no existe ningún elemento que introduzca suficientes pérdidas en el dispositivo.



Figura 3.13: Propagación de un modo en una guía de onda *slab*: a) propagación de un modo; b) perfil del campo E_z para tres espesores de núcleo.

3.5.1.3. Resultados: modos del cantilever

Realizando un estudio similar intercambiando los materiales se obtienen los modos de propagación del cantilever óptico, representados en la figura 3.14. Dado que el cantilever óptico posee como cubierta el medio externo se analizan estos modos cuando este se encuentre rodeado de agua, con $n_{agua} = 1,333$ (figura 3.14-a), o aire, con $n_{aire} = 1$ (figura 3.14-b).



Figura 3.14: Índice efectivo del microcantilever en función de su espesor: a) medio externo aire; b) medio externo agua.

De la misma forma que para el estudio de las guías, es posible escoger un intervalo de espesores donde el dispositivo posee un comportamiento monomodal, seleccionando un espesor máximo para el cantilever óptico de 500 nm.

3.5.1.4. Conclusión del estudio de modos de propagacion

Del estudio de los modos de propagación se establece el espesor máximo teórico de 200 nm para que las guías de entrada y de salida tengan un comportamiento monomodal. En cambio en el cantilever óptico este valor depende del medio que lo rodea. Para el agua el espesor máximo es de 500 nm, en cambio para el aire este espesor se reduce a los 250 nm.

3.5.2. Interfaz guía-cantilever

Una de las partes críticas del dispositivo es la interfaz entre la guía de entrada y el cantilever óptico. El objetivo del estudio de esta interfaz es encontrar una combinación de espesores donde la transferencia de señal óptica en la interfaz sea máxima.

3.5.2.1. Descripción del modelo

Para estudiar como se transfiere la luz desde la guía de entrada al microcantilever se propone el modelo geométrico de la figura 3.15-a (Modelo II). En este caso el modelo está compuesto de dos guías de onda *slab* ligeramente desalineadas. La guía de la zona izquierda, con un espesor h_g , es idéntica a la analizada en la sección 3.5.1, en cambio la nueva guía de onda, que representa al cantilever óptico, posee un núcleo de espesor h_c de óxido de silicio (n=1.46), y está rodeado por el medio externo. Para poder realizar este estudio es necesario introducir en las fronteras del modelo cuatro regiones que absorben el campo eléctrico, denominadas PMLs¹.



Figura 3.15: Modelo II: a) interfaz entre la guía de entrada y el microcantilever; b) detalle del mallado del modelo II.

El mallado de la estructura es similar a la empleada en la sección 3.5.1, solo que las nuevas regiones PML se incorporadan al mallado (ver figura 3.15-b).

De forma similar al estudio de los modos, se configuran los puertos de entrada y salida, P1 y P2, respectivamente, y se realiza un estudio modal en los puertos P1 y P2 junto con un estudio en frecuencia.

Se realiza un estudio paramétrico en función del espesor de la guía de onda h_w y del espesor del microcantilever h_c

3.5.2.2. Resultados: interfaz guía-cantilever

Una vez calculada la propagación del campo en el Modelo II, es posible obtener la eficiencia de la interfaz guía - cantilever para cada modo de propagación aplicando la ecuación 3.6. Representando esta eficiencia para los dos medios de estudio (aire n=1 y agua n=1.33), en función del espesor del

¹Siglas de "Perfect Matched Layers"

microcantilever, y para distintos espesores de la guía, se obtiene los resultados representados en la figura 3.16.



Figura 3.16: Eficiencia de la interfaz guía entrada - cantilever según el medio y las dimensiones de la estructura: a) agua; b) aire.

La figura 3.16 muestra como independientemente del medio un menor espesor de la guía de entrada implica una mejor transferencia de señal hacia el microcantilever, debido a que una mayor cantidad de energía se propaga por el sustrato de la guía. La máxima eficiencia para el aire como medio externo, empleando una guía de onda de 80 nm, requiere de un microcantilever extremadamente delgado, inferior a los 100 nm, alcanzando una eficiencia de 84.5% para un microcantilever de 100 nm. En cambio para el agua como medio externo, la máxima eficiencia se produce para un microcantilever de 200 nm de espesor con una eficiencia del 66.7%. Aumentando el espesor de la guía de onda hasta los 130 nm, la eficiencia decae hasta el 55\% en agua para un microcantilever de 200 nm y 66.9% en aire para un microcantilever de 100 nm.

Otro aspecto importante es la aparición del modo de primer orden del microcantilever tras superar el espesor de corte obtenido en la sección 3.5.1.3.

En la figura 3.17 se muestra el perfil del campo eléctrico a la entrada de la guía y a la salida para un microcantilever de espesor $h_c = 250 \ nm$ y un espesor de la guía de entrada de $h_q = 130 \ nm$.



Figura 3.17: Perfil del campo eléctrico a la entrada de la guía y a la salida del microcantilever.

En la figura 3.18 se muestra el resultado de la simulación de la propagación. Se puede observar como para un microcantilever de $h_c = 350 \ nm$, rodeado de aire, el modo de orden 1 se excita más que para el mismo microcantilever rodeado de agua.

3.5.2.3. Conclusiones del estudio de la interfaz guía-cantilever

De este estudio se obtienen la eficiencia de la interfaz entre la guía de entrada y el microcantilever, observando como para el agua, la eficiencia de la interfaz disminuye para un microcantilever inferior a los 200 nm. En cambio



Figura 3.18: Campo eléctrico normalizado resultado de la propagación en la interfaz guía de entrada - cantilever a) $h_c = 250 \ nm$ - agua b) $h_c = 250 \ nm$ - agua control de la propagación en la interfaz guía de entrada - cantilever a) $h_c = 250 \ nm$ - agua b) $h_c = 250 \ nm$ - agua d) $h_c = 350 \ nm$ - agua d) $h_c = 350 \ nm$ - aire.

para el aire no se observa este límite. Por lo tanto, el espesor mínimo del microcantilever a fabricar es de 200 nm. Para asegurar una correcta fabricación, se han seleccionados dos espesores para las guías de ondas de 130 nm y 180 nm. Estos espesores son cercanos a los espesores de corte para el modo de orden 1 obtenido de la sección 3.5.1.3.

3.5.3. Distancia guía-cantilever

Una vez obtenido los intervalos de espesores ideales para una máxima transferencia de potencia en la interfaz guía - cantilever, es necesario introducir una distancia de seguridad L_s entre el final de la guía de onda y el inicio del microcantilever. Este margen de seguridad previene del estrés que se genera en la interfaz nitruro-óxido. En el caso de que la capa de nitruro invada al microcantilever, se genera una fuerte deflexión inicial, que deja al dispositivo inservible.

3.5.3.1. Descripción del modelo

Para simular el efecto de la distancia L_s se propone el Modelo III de la figura 3.19, este es similar al del estudio de la sección 3.5.2, donde se separa el final de la guía de entrada del inicio del microcantilever.



Figura 3.19: Modelo III con margen de protección.

3.5.3.2. Resultados: distancia guía-cantilever

La influencia de esta zona de protección en la eficiencia de la interfaz se muestra en la figura 3.20 donde se puede apreciar como afecta el medio que rodea al microcantilever. Analizando la respuesta en agua (figura 3.20-a), a partir de un espesor superior a los 200 nm, introducir un margen de seguridad de 500 nm beneficia el acople. Analizando la respuesta en aire (figura 3.20-b), la distancia L_s es crítica en función del espesor del microcantilever cuando este es monomodo (100 nm - 250 nm), observándose una gran variación de eficiencia para la zona multimodal para espesores de microcantilevers superiores a 250 nm. Esta mejora se debe a que el mecanismo de trasferencia de potencia óptica, dominada por el campo evanescente para una $L_s = 0$, pasa a ser una combinación de trasferencia por campo evanescente junto un acoplamiento por dispersión del perfil del campo eléctrico, al no estar el haz confinado verticalmente en la zona que separa el final de la guía de la entrada del microcantilever. Una consecuencia directa de este efecto es que al aumentar la distancia L_s la dependencia de la eficiencia de la interfaz con el espesor del microcantilever se reduce.

En la figura 3.21 se muestra la comparación del campo eléctrico normalizado para distintas longitudes L_s , donde se emplea un microcantilever rodeado de agua de espesor 250 nm y un espesor de guía de entrada de 130 nm. En ella se puede apreciar el efecto de la expansión de la energía del haz en la zona de seguridad cuando la distancia aumenta (figura 3.21-d).

3.5.3.3. Conclusión del estudio del margen de seguridad

Del estudio se puede concluir que retraer el final de la guía de entrada 500 nm, beneficia ligeramente el acople de la luz al microcantilever cuando este



Figura 3.20: Influencia de la distancia de seguridad L_s en la interfaz guía de entrada - cantilever en función del espesor del microcantilever. Se considera una guía de onda de espesor 130 nm: a) agua; b) aire.

se encuentra rodeado de agua y su espesor supera los 200 nm. Con estas condiciones, para un microcantilever de 200 nm de espesor, se alcanza una eficiencia del 50 % para un espesor de guía de 130 nm y una eficiencia del 43 % para un espesor de guía de 180 nm.

3.5.4. Interfaz cantilever-guía de salida

3.5.4.1. Descripción del modelo

Tras escoger el intervalo de espesores para la guía de entrada y el microcantilever se crea el modelo que permite analizar el dispositivo al completo, (Modelo IV, ver figura 3.22-a). Este incluye el espacio entre el microcantilever y la guía final de recogida denominada gap (L_g) . En este modelo se incluye la longitud del microcantilever $(L_c = 100 \ \mu m)$, de esta forma, en los siguientes estudios es posible analizar los efectos mecánicos y los efectos producidos por el cambio del medio que rodea al microcantilever.

El mallado es muy similar al empleado en los modelos anteriores. En este


Figura 3.21: Campo eléctrico normalizado en la interfaz guía de entrada $(h_w = 130 \ nm)$ - cantilever $(h_c = 250 \ nm)$ según la distancia de seguridad: a) 0,5 μm b) 1 μm c) 2 μm d) 3 μm .



Figura 3.22: Modelo IV: a) dispositivo al completo; b) detalle del mallado del Modelo IV en la zona del gap.

caso hay que introducir un mayor número de puntos en la zona del *gap*, de esta forma se produce una correcta propagación del campo en esa zona de interés (ver figura 3.22-b).

El objetivo de este estudio es analizar la influencia del espesor del microcantilever en la potencia de salida del dispositivo.

3.5.4.2. Resultados: interfaz cantilever-guía de salida

El resultado de la simulación se representa en la figura 3.23, donde se observa la influencia del espesor del microcantilever en la eficiencia del dispositivo para dos espesores de guías de ondas. En la figura 3.23-a se muestra la respuesta para una distancia de gap $L_g = 1 \ \mu m$ rodeado de agua. Se puede observar como en la zona monomodal (100 nm - 500 nm) existe una zona con un máximo de transferencia, que corresponde al máximo de transferencia de la interfaz guía de entrada - cantilever. En la figura 3.23-b se muestra la eficiencia del dispositivo para una distancia de gap $L_q = 2 \ \mu m$.



Figura 3.23: Eficiencia total del dispositivo respecto al espesor del microcantilever rodeado de agua: a) $L_g = 1 \ \mu m$; b) $L_g = 2 \ \mu m$.

La propagación se muestra en la figura 3.24, donde se observa la diferencia entre el comportamiento monomodal y multimodal.

Uno de los principales inconvenientes de trabajar en la zona multimodal es la propagación simultánea de modos de distinto orden, creándose interferencias



Figura 3.24: Detalle de la propagación en el gap: a) $h_c = 250nm L_g = 1 \ \mu m$; b) $h_c = 250nm L_g = 2 \ \mu m$; c) $h_c = 700nm L_g = 1 \ \mu m$; d) $h_c = 700nm L_g = 2 \ \mu m$.

constructivas y destructivas entre ellos, por lo que es necesario estudiar la influencia de este efecto.

3.5.4.3. Conclusión del estudio de la distancia de gap

El estudio de la interfaz entre el microcantilever y la guía de salida la distancia de *gap* tiene un impacto directo en la eficiencia del dispositivo, debido a la expansión de perfil del campo a lo largo del *gap*. Por el contrario incrementar la distancia L_c influye en el intervalo de trabajo del microcantilever tal y como se estudiará en la sección 3.5.6.

3.5.5. Estudio del índice de refracción

La realización de medidas biosensoras implica procesos donde el índice de refracción del medio externo puede variar en el tiempo. Los biosensores de campo evanescente emplean este cambio de índice para cuantificar la interacción biológica. El microcantilever óptico debe ser inmune a este cambio de índice de refracción, por este motivo, y dado que el microcantilever óptico actúa como una guía de onda simétrica, donde el medio que lo rodea hace de cubierta, es importante estudiar el efecto que produce un cambio del índice de refracción en el dispositivo.

3.5.5.1. Descripción del estudio

Para este estudio se emplea el Modelo IV, donde se realiza un estudio paramétrico variando el índice de refracción del medio para distintos espesores de microcantilever.

3.5.5.2. Resultados: influencia del índice de refracción

El resultado de la simulación se muestra en la figura 3.25, donde se observa la respuesta de los microcantilevers al variar el índice de refracción del entorno. En esta figura se puede diferenciar dos tipos de respuestas, aquellas que permanecen relativamente constante con el cambio de índice y otra que poseen una fuerte oscilación, llegando a valores inferiores al 1 % de eficiencia.



Figura 3.25: Influencia del índice de refracción en la respuesta del microcantilever según su espesor.

Estas oscilaciones ocurren cuando el espesor del microcantilever supera el espesor de corte para el modo de propagación de primer orden, y se deben a la superposición del modo fundamental de propagación y el de primer orden. Cada uno de estos modos poseen índices efectivos diferentes, por lo tanto, la fase de cada modo se propaga a distintas velocidades por la guía. Esto genera regiones donde los modos interfieren constructivamente y otras donde lo hacen destructivamente, dando lugar a una respuesta oscilatoria de la potencia de salida. Esta respuesta ondulatoria influye negativamente en la respuesta final del dispositivo, ya que puede desvirtuar la respuesta mecánica del microcantilever.

Por lo tanto, otro inconveniente añadido a la hora de trabajar con cantilevers ópticos de espesor mayor a 500 nm es su dependencia con el índice de refracción del medio que los rodea, causado por la interferencia entre sus modos de propagación.

3.5.6. Estudio de la deflexión del OWC

El estudio de deflexión permite conocer la sensibilidad óptica del dispositivo, definida como la variación de señal óptica a la salida en función del desplazamiento del extremo libre del microcantilever [89].

$$S = \frac{\partial \eta}{\partial y} \tag{3.7}$$

3.5.6.1. Descripción del estudio

En este caso, empleando el modelo IV, se realiza la combinación de la física de *mecánica de sólido* y la de *ondas electromagnéticas*. Para ello se realiza un estudio estático en el dominio de la física del sólido, donde se calcula el desplazamiento cuando se aplica una fuerza en el extremo libre del microcantilever. Este estudio es posible realizarlo con una malla menos densa. Una vez obtenido los datos de desplazamientos, se aplica una deformación al mallado empleado en la propagación, mediante el método *Lagrangiano Euleriano Arbitrario* (ALE), definido como una *interfaz física* en *Comsol*.

Uno de los inconvenientes a la hora de aplicar grandes deformaciones en el mallado es que pueden aparecer nodos superpuestos (figura 3.26-a), esto altera y reduce la precisión del resultado. Para solventar este problema el uso de un suavizado tipo *Yeoh* en método *ALE* ha proporcionado mejores resultados (figura 3.26-b).

3.5.6.2. Resultados: deflexión del OWC

La figura 3.27 muestra la respuesta del cantilevers ópticos de distintos espesores, según la deflexión del extremo libre y para las distancias $L_g = 1 \ \mu m$ y $L_g = 2 \ \mu m$. En esta figura el eje de abscisa corresponde al desplazamiento que ha sufrido el extremo libre del OWC con respecto a su posición de reposo. Para un desplazamiento nulo la eficiencia no es máxima, esto se debe al desalineamiento existente entre el OWC y la guía de onda de salida.



Figura 3.26: Problema de superposición de los nodos del mallado: a) mallado superpuesto; b) corrección del mallado.



Figura 3.27: Respuesta del cantilever óptico en función del desplazamiento: a) $h_w = 130 \ nm, \ L_q = 1 \ \mu m$; b) $h_w = 130 \ nm, \ L_c = 2 \ \mu m$

La sensibilidad del dispositivo S, definida en la sección 3.5.6, se muestra en la figura 3.28, en ella se observa la mejora de sensibilidad debida al desalineamiento del eje del OWC con respecto al eje de la guía de onda, trasladando la respuesta gausiana del dispositivo hacia una zona más sensible. En la misma figura se puede comparar como para una mayor distancia de *gap* la sensibilidad disminuye debido a la expansión de la distribución de potencia en la zona del *gap*, en cambio el rango de operación del dispositivo aumenta.

En la figura 3.29 se muestran varios ejemplos de la propagación de la luz en los OWC bajo distintos valores de deflexión, donde se refleja la interferencia modal de los cantilevers ópticos de espesor elevador.

Otro aspecto importante es el análisis de la respuesta de los microcantilevers



Figura 3.28: Sensibilidad optica del cantilever óptico: a) $h_w = 130 \ nm$, $L_g = 1 \ \mu m$; b) $h_w = 130 \ nm$, $L_c = 2 \ \mu m$.



Figura 3.29: Propagación del cantilever óptico bajo deflexión con una distancia de gap de $L_g = 2 \ \mu m$ a) deflexión sentido positiva; b) deflexión sentido negativo; c) detalle de la propagación en la zona del gap con desplazamiento positivo; d) detalle de la propagación en la zona del gap con desplazamiento negativo

cuyo espesor acepta más de un modo de propagación. Por una parte es posible obtener una alta sensibilidad S modificando el índice de refracción del medio, pero por otro lado, la variación de la potencia de salida respecto a pequeños cambios del índice de refracción puede incurrir en lecturas erróneas de la deflexión. En la figura 3.30 se muestra la respuesta de un OWC de espesor $h_c = 700 \ nm$ frente a la deflexión para distintos índice de refracción del medio. Se puede observar como esta variación del índice de refracción da lugar a la variación del perfil de la respuesta con respecto al desplazamiento del extremo libre del microcantilever. Esto dificulta la interpretación de la respuesta del dispositivo, ya que la respuesta mecánica puede verse atenuada o amplificada por la variación del perfil de potencia a la salida del cantilever óptico, producido por un cambio del índice de refracción del medio de medida. Por lo tanto, una vez más se descarta el uso de cantilevers ópticos de espesores superiores al de corte para la propagación del modo de orden 1.



Figura 3.30: Respuesta del microcantilever multimodal $(h_c = 700 \ nm)$ para distintos índices de refracción.

3.5.7. Conclusiones simulaciones ópticas

Con los datos obtenidos del análisis de los parámetros que intervienen en el diseño de los cantilever ópticos es posible definir una *figura de mérito* (ecuación 3.8) que relaciona la cantidad máxima de potencia recibida con la máxima variación de potencia debida al desplazamiento.

$$FOM = \eta * \frac{\partial \eta}{\partial y} \tag{3.8}$$

La representación gráfica de la FOM en función del espesor del OWC para las distancias de gap seleccionadas se muestra en la figura 3.31. Se puede observar como existe un intervalo de espesores, entre los 200 nm y los 350 nm, donde los cantilevers ópticos mantienen una buena relación entre sensibilidad y eficiencia, y además poseen tan solo un modo de propagación en agua. Por estos motivos se seleccionan los espesores de 250 nm y 350 nm para la fabricación de los dispositivos.



Figura 3.31: Figura de mérito en función del espesor del cantilever para las distancia de gap seleccionadas.

La elección de la distancia de *gap* puede ser escogida según el objetivo de la medida, para grandes deflexiones, una distancia de *gap* grande ofrece un mayor rango de respuesta. Por el contrario, para pequeñas deformaciones es conveniente emplear distancias de *gap* más cortas.

3.6. Conclusiones generales de simulación

Con los cálculos realizados en los apartados anteriores es posible determinar las dimensiones óptimas del cantilever óptico para obtener la mejor sensibilidad, tanto mecánica como óptica.

En una primera fase se han calculado los valores de deflexión, frecuencia de resonancia y amplitud de ruido térmico. De las propias ecuaciones del comportamiento del movimiento del microcantilever se deduce que su sensibilidad mecánica mejora a mayor longitud y menor espesor.

De los estudios de óptica, se ha determinado el intervalo de espesores de las guías de ondas, estableciendo un límite superior de 200 nm, espesor de corte para el modo de propagación de primer orden. El límite inferior esta sujeto al compromiso entre el acople de luz a la entrada de la guía y a las pérdidas por propagación, estableciendo un límite inferior de 80 nm. Por este motivo se han seleccionado dos espesores cercanos a los límites frontera de $h_w = 130 \ nm \ y \ h_w = 180 \ nm$. Además en esta interfaz se ha tenido en cuenta una distancia de seguridad para evitar tensiones adicionales en el anclaje del OWC, estableciendo esta distancia en $L_s = 500 \ nm$. Esta distancia mejora la eficiencia del dispositivo cuando el medio de trabajo es agua, medio habitual para las interacciones biomoleculares.

En el estudio del gap, se ha analizado la respuesta del cantilever óptico en función de su espesor y su respuesta a la deflexión. La elección de la distancia L_g está limitada inferiormente por las restricciones del proceso de fabricación, y superiormente por la deflexión máxima estimada.

El análisis de la deflexión del cantilever óptico ha permitido determinar que la sensibilidad óptica S mejora para cantilevers ópticos delgados. Nuevamente el intervalo idóneo de espesores para los cantilevers ópticos se encuentra por debajo de los 500 nm en agua, donde el OWC acepta el modo de propagación fundamental, y posee una mayor sensibilidad S. Esto se encuentra en consonancia con la sensibilidad mecánica. Aplicando la figura de mérito de la ecuación 3.8 se seleccionan dos espesores para la fabricación: $h_c = 250 \ nm$ y $h_c = 350 \ nm$.