Universidade Estadual de Campinas
Instituto de Física Gleb Wataghin

João Vítor Chiaramonte Rocha

Estudos de dispositivos de ondas acústicas de superfície e fotoluminescência de nanofios semicondutores

Studies of surface acoustic waves devices and photoluminescence of semiconductor nanowires

CAMPINAS
2024

Universidade Estadual de Campinas

Instituto de Física Gleb Wataghin

João Vítor Chiaramonte Rocha

Estudos de dispositivos de ondas acústicas de superfície e fotoluminescência de nanofios semicondutores

Dissertação apresentada ao Instituto de Física Gleb Wataghin da Universidade Estadual de Campinas como parte dos requisitos exigidos para a obtenção do título de Mestre em física na área de física.

Orientador: Prof. Dr. Francisco Paulo Marques Rouxinol

Coorientador: Prof. Dr. Odilon Divino Damasceno Couto Júnior

Este exemplar corresponde à versão final da tese defendida pelo aluno João Vítor Chiaramonte Rocha, e orientada pelo Prof. Dr. Prof. Dr. Francisco Paulo Marques Rouxinol.

Campinas

2024

Ficha catalográfica
Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP)
Biblioteca do Instituto de Física Gleb Wataghin
Maria Graciele Trevisan - CRB 8/7450

R582e

Rocha, João Vitor Chiaramonte, 1995-
Estudos de dispositivos de ondas acústicas de superfície e fotoluminescência de nanofios semicondutores / João Vitor Chiaramonte Rocha. – Campinas, SP : [s.n.], 2024.

Orientador: Francisco Paulo Marques Rouxinol.
Coorientador: Odilon Divino Damasceno Couto Júnior.
Dissertação (mestrado) – Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP), Instituto de Física Gleb Wataghin.

1. Ondas acústicas superficiais. 2. Dispositivos quânticos. 3. Nanofios semicondutores. I. Rouxinol, Francisco Paulo Marques, 1977-. II. Couto Júnior, Odilon Divino Damasceno, 1979-. III. Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP). Instituto de Física Gleb Wataghin. IV. Título.

Informações Complementares

Título em outro idioma: Studies of surface acoustic waves devices and photoluminescence of semiconductor nanowires
Palavras-chave em inglês:
Acoustic surface waves
Quantum devices
Semiconductors nanowires
Área de concentração: Física
Titulação: Mestre em Física
Banca examinadora:
Francisco Paulo Marques Rouxinol [Orientador]
Ricardo Rodrigues Urbano
Rogério Valentim Gelamo
Data de defesa: 27-05-2024
Programa de Pós-Graduação: Física

Identificação e informações acadêmicas do(a) aluno(a)
- ORCID do autor: https://orcid.org/0009-0008-3974-3529
- Currículo Lattes do autor: http://lattes.cnpq.br/2408228007821233

INSTITUTO DE FÍSICA
GLEB WATAGHIN

MEMBROS DA COMISSÃO EXAMINADORA DA DISSERTAÇÃO DE MESTRADO DO ALUNO JOÃO VITOR CHIARAMONTE ROCHA - RA 146652, APRESENTADA E APROVADA AO INSTITUTO DE FÍSICA GLEB WATAGHIN, DA UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS, EM 27/05/2024.

COMISSÃO JULGADORA:

- Prof. Dr. Francisco Paulo Marques Rouxinol - Presidente e Orientador (IFGW/ UNICAMP)

- Prof. Dr. Ricardo Rodrigues Urbano (IFGW/ UNICAMP)

- Prof. Dr. Rogério Valentim Gelamo (Universidade Federal do Triângulo Mineiro)

OBS.: Ata da defesa com as respectivas assinaturas dos membros encontra-se no SIGA/Sistema de Fluxo de Dissertação/Tese e na Secretaria do Programa da Unidade.

CAMPINAS

2024

Para Michel Dezotti, por me dar a força que me faltava.

Agradecimentos

Este trabalho foi possível graças à colaboração de diversas pessoas, às quais devo minha sincera gratidão. Em primeiro lugar, quero expressar a minha gratidão aos meus pais, Orivaldo e Cibele, pelo seu apoio constante e sacrifícios altruístas ao longo dessa jornada. Aos meus irmãos, Giovana e Matheus, por serem minha inspiração, por compartilharem a felicidade que vem com pequenos triunfos.

Agradeço aos meus amigos Vinícius, Aline, Simonice, Lucas, Juliana, Bianca, Gabriel, Victor, Giovana e muitos outros que passaram e marcaram minha vida. Foram verdadeiros pilares para mim ao longo da pesquisa com seus comentários de apoio e tempo de descontração, que me ajudaram a permanecer motivado e determinado, mesmo com a distância física. Especialmente, agradeço à Ananda Miranda (*in memorian*), grande amiga que nos deixou em um acidente trágico. Ficará marcada pelo amor à vida e todas as circunstâncias - o exemplo vivo do *Amor Fati*. Que sua alegria seja fonte de inspiração eterna.

Não teria conseguido concluir esse projeto sem o apoio emocional de uma pessoa que, logo à primeira vista, transparece sua singularidade e elegância. Que mostrou que há algo único em mim, e vem me ajudando a desenvolver no dia-a-dia, com coragem de ser quem eu sou. Esteve comigo mesmo nos momentos mais difíceis, e por isso, devo minha profunda gratidão à Michel Dezotti.

Agradeço ao Prof. Dr. Francisco Rouxinol pela orientação, confiança, paciência e por transmitir seu conhecimento. Sem dúvidas, o ambiente fica mais leve com sua presença e incentivo. Estendo o agradecimento ao Prof. Dr. Odilon Couto pelo auxílio na linha de pesquisa e pelos diversos comentários, que enriqueceram essa dissertação e ampliaram o saber científico com sua experiência.

Por último, gostaria de enfatizar que a realização deste trabalho não teria sido possível sem o indispensável apoio financeiro das agências de fomento. Expresso minha gratidão à FAPESP, pelos processos n^o 2017/08602-0, 2017/22035-1 e 2017/22037-4. O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001, pelo processo n^o 88887.371992/2019-00. O financiamento providenciado por estas entidades foi fundamental, não apenas para a conclusão desta pesquisa, mas também para

o avanço acadêmico e profissional, tanto no âmbito pessoal quanto coletivo. Também gostaria de agradecer ao Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas (CBPF), Centro de Componentes Semicondutores e Nanotecnologias (CCS-Unicamp), Laboratório Nacional de Nanotecnologia (LNNano) do Centro Nacional de Pesquisa em Energia e Materiais (CNPEM), e ao Dr. Ricardo Cotrin Teixeira do Centro de Tecnologia da Informação Renato Archer (CTI) por suas valiosas contribuições nos processos de fabricação de amostras.

Resumo

A maior parte do trabalho foi focada no transdutor interdigital, cuja operação converte sinais elétricos em deformações mecânicas, mediados pelo efeito piezoelétrico, na forma de ondas acústicas de superfície propagantes em seu substrato. Inicialmente, foi feita uma tentativa de fabricação do mesmo em um substrato piezoelétrico, o qual foi preparado com a deposição de um filme fino de ZnO sobre um *waffer* de Si através da *Atomic Layer Deposition*. A espessura, medida por elipsometria, foi em torno de 200 nm. Medidas de difratometria de raio-x indicaram que cerca de 53,4% dos cristais de ZnO estavam orientados na direção c, valor necessário para viabilizar o efeito piezoelétrico. Por fim, foram feitos testes de perfilometria, que indicaram seu perfil de rugosidade. Os eletrodos (chamados de transdutores interdigitais), receptores dos sinais elétricos, foram fabricados em cima do substrato em seguida, com o uso de fotolitografia, deposição de alumínio por evaporação e, *lift-off*.

O trabalho prosseguiu com o estudo do design do dispositivo através de simulações numéricas, com sua caracterização dada em termos de transmissão e reflexão de sinal. O material piezoelétrico simulado em foco foi o $LiNbO_3$-128Y, e as dimensões projetadas resultaram em uma ressonância de cerca de 487 MHz. Esse resultado está em concordância com os resultados experimentais de um dispositivo físico com características similares à simulação.

Esses dispositivos são um meio de emaranhar estados quânticos de dispositivos supercondutores, cujo regime de operação é em temperaturas ultrabaixas (cerca de 10 mK). Para seguir nessa linha de pesquisa, também foram feitas medidas no dispositivo físico nessa faixa de temperatura no refrigerador de diluição de $^3He/^4He$. Outro ponto importante para cumprir esse objetivo é aumentar o sinal transmitido, o que pode ser feito com a alocação de espelhos de Bragg nas adjacências do dispositivo. Então, mais simulações foram feitas para testar o efeito desses elementos. Os resultados foram compatíveis com o relatado experimentalmente na literatura.

Finalmente, nanofios semicondutores de GaAs/GaAsP foram caracterizados em termos do sinal de fotoluminescência. Os resultados indicaram uma emissão em um comprimento de onda de cerca de 800 nm (infravermelho).

Palavras-chave: Dispositivo de ondas acústicas de superfície, dispositivos quânticos, nanofio semicondutor.

Abstract

The focus of most of the work relies on the interdigital transducer. Its operation consists on converting electrical signals into mechanical deformations, mediated by the piezoelectric effect. Initially, a manufacturing attempt was made on a piezoelectric substrate, which was prepared by depositing a thin ZnO film on a Si waffer using Atomic Layer Deposition. The thickness was measured by ellipsometry, was around 200 nm. X-ray diffraction measurements indicated that around 53,4% of the ZnO crystals were oriented in the c direction, being enough to enable the piezoelectric effect. Finally, perfilometry tests were carried out, indicating its roughness profile. The electrodes (called interdigital transducers) receives the electrical signals. They were then manufactured on top of the substrate using photolithography, aluminum deposition by evaporation and lift-off.

The work continued with the study of the device design through numerical simulations. Its characterization were given in terms of sigal trasmission and reflection. The simulated piezoelectric material in focus was $LiNbO_3$-128Y, and the designed dimensions resulted in a resonance around 487 MHz. This result is in agreement with the experimental results of a physical device with characteristics similar to simulation.

These devices are a mean of entangling quantum states of superconducting devices, at a ultra-low temperature (about 10 mK) operating regime. To continue this line of research, measurements were also made on the physical device in this temperature range in the $^3He/^4He$ dilution refrigerator. Another important point to achieve this objective is to increase the transmitted signal. This can be done by placing Bragg mirrors in the vicinity of the device. Then, more simulations were carried out to test the effect of these elements. The results were compatible with those reported experimentally in the literature.

Finally, GaAs/GaAsP semiconductor nanowires were characterized in terms of photoluminescence signal. The results indicated emission at a wavelength of around 800 nm (infrared).

Keywords: Surface acoutic waves device, quantum devices, semiconductor nanowire.

Lista de Figuras

1.1 Esquema do dispositivo de ondas acústicas de superfície, em que o IDT de entrada atua como eletrodo para receber o sinal elétrico, o substrato piezoelétrico é o meio de propagação das ondas mecânicas e o IDT de saída é responsável por captar o sinal. 21

2.1 As semirretas cinzas representam uma corda extensível fixada no lado esquerdo, com o desenho superior representando a corda relaxada com comprimento L e pontos M e N nas posições x e $x + \Delta x$, respectivamente. Enquanto isso, o desenho inferior demonstra a deformação da mesma corda durante a aplicação de uma força apontada para a direita, alterando seu comprimento para $L + \Delta L$. Os pontos M e N se deslocaram para M' e N' nas posições x' e $x + \Delta x$', respectivamente. Adaptado de [55]. 26

2.2 Efeito da tração em um volume infinitesimal dentro de um sólido quando o volume total V (em cinza) do sólido é submetido a uma força externa com densidade $\vec{p_i}$ (verde). Para atingir o equilíbrio mecânico, as forças internas se contrabalançam na forma de forças de volume interno com densidade $\vec{f_i}$ (cinza). A figura mostra, ainda, um corte transversal representando uma superfície S em azul e o versor $\hat{l}$ em vermelho, normal ao elemento da superfície dS em laranja. 30

2.3 Componentes de (a) tração (T_{33}, setas azuis), (b) compressão (T_{22}, setas verdes) e (c) cisalhamento (T_{23}, setas vermelhas) do tensor de tensão. Na figura 2.3c, as setas correspondem ao componente tangencial T_{23} do tensor de *strain*. 31

2.4 Nas figuras (a) e (b), uma força F atua sobre um sólido verticalmente, causando uma deformação. Para um sólido piezoelétrico, o efeito piezoelétrico direto postula que o voltímetro V medirá uma tensão diferente de zero. A polarização de tensão devido à força de tração em (a) difere da polarização de tensão devido à força de compressão em (b). O agente do efeito inverso nas figuras (c) e (d) é o campo elétrico externo $\vec{E_k}$, que produz a deformação do sólido. 34

2.5 Exemplos da ocorrência de piezoeletricidade dependendo da distribuição de carga nos materiais. O círculo verde com o sinal de mais indica cargas positivas e o círculo vermelho com o sinal de menos, negativas. Em (a), a distribuição centrossimétrica leva a uma polarização líquida zero no centro C, e, conforme mostrado em (b), uma força aplicada F deforma o material, aproxima-se das cargas, mas não há formação de um campo elétrico. Caso contrário, a distribuição não centrossimétrica em (c) forma uma polarização líquida no centro C de forma que a aproximação das cargas devido à deformação causada pela força F forma um campo elétrico no centro. . . . 35

2.6 Ilustração de ondas elásticas se propagando da esquerda para a direita dentro de um sólido com o intervalo de velocidade v_p. As imagens estão fora de escala para evidenciar o movimento melhor; as velocidades de onda típicas para cada tipo de onda são mostradas abaixo de cada imagem. (a) Sólido ilimitado com uma onda *bulk* longitudinal (de compressão), conhecida como onda P. (b) Onda *bulk* transversal (de cisalhamento), conhecida como onda S. (c) Ondas acústicas de superfície, ou ondas Rayleigh, em um sólido semi-infinito. O movimento da onda se extingue em uma profundidade de aproximadamente um comprimento de onda abaixo da superfície. Esse é o tipo de onda que será estudado nessa dissertação. (d) Ondas em placas sólidas finas. Retirado de [55]. 37

2.7 Representação do movimento de partículas se propagando ao longo do plano x_1Ox_3. Observe que a amplitude decresce à medida que a profundidade do sólido aumenta. Mais próximo à superfície, há regiões em que a densidade de partículas é maior, onde há compressão, ou menor, gerando tensão. Retirado de [55]. 38

2.8 (a) Estrutura hexagonal de wurtzita do zinco, com as esferas vermelhas representando o zinco (Zn) e as esferas amarelas o oxigênio (O). Adaptado de [64]. (b) Estrutura trigonal do $LiNbO_3$, com as esferas vermelhas representando o oxigênio, cinza-escuro o lítio (Li) e cinza-claro o nióbio (Nb). Adaptado de [65]. 41

2.9 As figuras mostram os IDTs mais comuns com suas dimensões características, com a representando a largura de um dedo (assim como o espaçamento entre os dedos), p o passo (ou seja, a largura de um dedo e um espaço), λ_{SAW} o comprimento de onda gerado e W a abertura, que determina a largura do feixe de onda. (a) IDT de dedos simples, produzindo um comprimento de onda $\lambda_{SAW} = 4a$. (b) IDT de dedos duplos, produzindo um comprimento de onda $\lambda_{SAW} = 8a$. 42

2.10 Na presença de um potencial de radiofrequência, V_{RF}, nos IDTs, há a ocorrência de deformações no substrato pelo efeito inverso da piezoeletricidade, causando as ondas acústicas com seu comprimento de onda representado na figura. Para $V_{RF} = V_{RF}(f = f_{SAW})$, os eletrodos oscilam entre cristas e vales, formando as ondas acústicas de superfície que se propagam na direção x_1. Imagem retirada de [55]. . . 43
2.11 (a) Cilindro sem discretização em elementos finitos. (b) Cilindro em que sua geometria foi reformulada através da divisão em elementos finitos na forma de tetraedros. 44
2.12 Representação da medição dos parâmetros S, em que DUT é o dispositivo sob teste (*Device Under Test*), a_1 e a_2 representam o sinal entrando pela porta 1 e 2 respectivamente, assim como b_1 e b_2 o sinal saindo por essas mesmas portas. Dessa forma S_{11} é o parâmetro que descreve a reflexão do sinal que entrou pela porta 1 e saiu pelo mesmo local e S_{12} é a transmissão de sinal que entrou pela porta 1 e foi medido na porta 2. O mesmo raciocínio vale para os parâmetros S_{22} e S_{21}. 47
2.13 Analisador de rede, que envia o sinal pelas portas 1 e 2 e mede simultaneamente o sinal recebido nessas mesmas portas, obtendo os parâmetros S. 49
2.14 (a) Deposição de filme fino de ZnO, em que havia um pedaço de fita *kapton* na parte em que não há material depositado, para medir a espessura com um perfilômetro (b) Deposição de filme fino de ZnO em um substrato de silício de maior dimensão, utilizando a mesma receita. 51
2.15 Imagens obtidas por perfilometria da amostra da figura 2.14a, em que foi possível estimar a espessura do filme fino em cerca de (190 ± 10) nm. 52
2.16 Gráfico da difração de raios-x, em que estão destacados os picos relacionado às orientações cristalinas [001], [002] do ZnO e o pico relacionado ao silício. (a) Resultados originais e (b) resultados sem o pico referente ao silício e com a curva Gaussiana vermelha ajustada para o pico [001] e verde para o pico [002] do ZnO ajustadas. . . 54
2.17 (a) Foto do substrato de ZnO após a revelação litográfica. (b) Foto tirada no microscópio óptico com foco em um molde de IDT SF. 56
2.18 Falhas comuns encontradas no processo de metalização. Em (a) encontram-se quebras de linha; em (b) linhas mal definidas e curto circuitos. 56

3.1 A região contornada de amarelo é a célula unitária bidimensional, que é a região que se repete indefinidamente. O contorno verde representa o sinal RF no transdutor de entrada e o vermelho é o transdutor do par que está aterrado. As dimensões destacadas na figura são a abertura W e a altura do substrato t. As coordenadas espaciais são representadas por x_1, x_2 e x_3. Adaptado de [55]. 60

3.2 Geometria e condições de contorno para a simulação de uma célula unitária, com o material piezoelétrico representado em azul e o alumínio dos eletrodos em cinza. Para as condições de contorno, o potencial elétrico no IDT esquerdo e o aterramento no IDT direito e na parte inferior do modelo estão em vermelho. Na parte inferior, ainda há a alternância do vermelho com o laranja para também representar a superfície sem deslocamento. Nas partes laterais, em magenta, os deslocamentos e potenciais elétricos são periódicos e, finalmente, a superfície superior é livre de condições. Também são mostradas as dimensões de altura e largura do IDT, bem como altura do substrato. 62
3.3 Distribuição espacial de (a) deformação no eixo x (b) deformação no eixo y (c) campo elétrico no eixo x (d) campo elétrico no eixo y para uma célula unitária de $LiNbO_3 - 128Y$. 64
3.4 Distribuição espacial de (a) deformação no eixo x, (b) deformação no eixo y, (c) campo elétrico no eixo x e (d) campo elétrico no eixo y para uma célula unitária de ZnO. 65
3.5 O parâmetro S_{11} com a frequência de ressonância em torno de $f_{SAW} = 487MHz$, corroborando com o resultado da distribuição espacial da figura 3.3. 66
3.6 Algumas maneiras de configurar a distribuição dos elementos finitos. (a) Mapeado, em que a área é subdividida em polígonos regulares quadrangulares. (b) Mapeado com elementos discretos menores. Em comparação com o tamanho dos elementos da figura (a), a simulação leva a resultados mais precisos, embora com um esforço computacional maior, devido à maior quantidade de elementos para calcular a equação de onda. (c) Enquadramento livre, com divisão em polígonos quadráticos, não necessariamente regulares. (d) Mistura de diferentes estruturas, com enquadramento livre na PML e triangular nos IDTs e na parte superior do substrato, onde não há PML. 67
3.7 As curvas para S_{11} para diferentes tamanhos máximo (λ_{SAW}/p) e mínimo ($\lambda_{SAW}/(3p)$) do finito elementos. Em (a), p varia de 1 a 16, com um passo de 5 e em (b) p varia de 8 a 11, com um passo de 1. 68
3.8 (a) A altura da célula unitária como um múltiplo inteiro do comprimento de onda. (b) curva S_{11} variando t_0 e mantendo t_{PML} constante e (c) curva S_{11} variando t_{PML} e mantendo t_0 constante. 69
3.9 (a) Curvas de S_{11} variando a largura do IDT. Os picos do gráfico estão na posição de ressonâncias para cada comprimento de onda simulado. (b) Velocidade das SAW em função do comprimento de onda. 70

3.10 (a) Curva de S_{11} variando a altura do eletrodo. (b) Velocidade SAW para cada altura de eletrodo. O peso do eletrodo sobre o substrato não permite que a velocidade de propagação permaneça constante. 70
3.11 Visão do modelo bidimensional da linha de atraso que foi simulada, com IDTs de dedos simples, mantendo $\lambda_{SAW} = 8\ \mu m$. Está mostrado as partes laterais e inferior a PML, além do IDT de entrada (*Input IDT*) e de saída (*Output IDT*) e a distância entre os mesmos. 71
3.12 Gráfico dos parâmetros S em que a transmissão medida está em azul, enquanto que as simulações estão em laranja para a transmissão e verde para a reflexão.(a) Curva de reflexão (S_{11}) e transmissão (S_{21}) para a *delay line* com 20 pares de dedos e abertura de 400 μm com os coeficientes cuja frequência de ressonância se adéqua às velocidades reportadas.(b) Curvas de reflexão (S_{11}) e transmissão (S_{21}) para a *delay line* com 80 pares de dedos e abertura de 400 μm com os coeficientes que se adéquam às curvas experimentais. 73
3.13 (a) Gráficos do parâmetro S_{11} para diferentes números de pares de dedos. (b) Gráficos do parâmetro S_{21} para diferentes números de pares de dedos. (c) Gráficos do parâmetro S_{11} para diferentes números de pares de dedos após retirar o IDT de saída. Observe que as ondulações em torno da frequência de ressonância não apareceram, indicando que o IDT de saída provoca interferências no resultado dos parâmetros S. 75
3.14 Sinal emitido pelo IDT de entrada em azul e sinal transmitido para o IDT de saída em verde em escala absoluta, ou seja, diferentemente dos casos anteriores, não é logarítmica. Observe que o sinal não é transmitido em sua totalidade, embora o valor fique próximo ao máximo ao redor da frequência de ressonância. 77
3.15 Geometria da seção transversal simulada no Comsol com os espelhos de Bragg (refletores) e IDTs inclusos. O valor da abertura foi mantido em $W = 400\mu m$ 78
3.16 Variação do sinal $|S_{21}|$ para diferentes números de tiras de metal que compõem o espelho de Bragg. 79
3.17 Geometria da seção transversal simulada no *Comsol* com os espelhos de Bragg (refletores) e IDTs inclusos para o ressonador de uma porta. O valor da abertura foi mantido em W = 400 μm 80
3.18 Sinal $|S_{11}|$ medido para o ressonador de uma porta com 700 tiras de metal para os espelhos de Bragg. 81

3.19 Imagens obtidas do software *k-layout* com o desenho da máscara, feito por João Victor Fernandes. (a) os 12 blocos contendo 48 pares de IDTs. (b) Um bloco, denotado por B1, como mostra a parte superior, com dois pares de IDTs SF. (c) Detalhamento de um IDT SF, com o PAD para a conexão por *wirebond* na parte superior e os dedos na parte inferior. (d) Detalhamento de um IDT DF, com o PAD para a conexão por *wirebond* na parte superior e os dedos na parte inferior. 82
3.20 (a) Porta amostra com os dispositivos SAW dentro. Os conectores SMA estão soldados em trilhas de cobre, que por sua vez são conectadas aos dispositivos através da técnica *wire-bonder*. (b) Esquema de como foi feita a conexão utilizando a *wire-bonder*. O próprio porta-amostra foi usado como aterramento. 83
3.21 Curvas dos parâmetros S encontradas experimentalmente com o auxílio de um analisador de rede. Essas curvas representam (a) S_{11} (b) S_{12} (c) S_{21} (d) S_{22}. 84
3.22 (a) Diluidor de refrigeração utilizado para fazer as medias em ultra-baixas temperaturas.(b) Diagrama de fases da mistura de ^3He e ^4He. Adaptado de [94]. (c) Esquema dos principais componentes do refrigerador de diluição. Retirado de [94]. . 85
3.23 Gráfico da curva de S_{21} em temperaturas em torno de 10 mK. As distorções em comparação com a figura 3.21c se deve à inserção dos atenuadores e amplificadores. 87

A.1 Projeção estereográfica. Os pontos p e q são originários da intersecção do plano equatorial E com os segmentos de reta $\overline{SP}$ e $\overline{NQ}$ respectivamente. Esses pontos são representados por uma cruz se o segmento de reta partir do polo sul (ponto S) ou com um ponto no meio de um círculo se o segmento de reta partir do polo norte (ponto N). Retirado de [53]. 102
A.2 Os sete sistemas cristalinos com as quatorze redes de Bravais. Retirado de [53]. . . . 104
A.3 As classes de simetria de pontos dos cristais. Retirado de [53]. 106
B.1 Nessa figura é representado os elementos necessários para entender o motivo de T_{ij} ser simétrico. Nela, temos δV representando o elemento de volume dentro de um objeto de área δs. Por fim, θ_k representa a rotação em torno do eixo Ox_k causada por um torque na forma de uma tração. Retirado de [55]. 110

C.1 Esquematização do processo de fotolitografia. A luz ultravioleta passa pelo vidro e é barrada nas partes que contém cromo, de maneira que ela atinge o fotorresiste mantendo o padrão da parte em que não há cromo, ou seja, o desenho da máscara a ser impresso. O fotorresiste dessa parte é sensibilizado e, se for negativo, é insolúvel em substância reveladora e ele permanece na superfície do material. Do contrário, se for positivo, como é o caso do AZ5247, o fotorresiste é retirado da parte que foi sensibilizada. 113
D.1 Gap de energia proibido separando estados livres e ocupados de bandas de condução e valência. 114
D.2 Alinhamento de bandas de (a) um nanofio de GaAs em que, ao longo de seu comprimento, há a formação de estruturas cristalinas de blenda de zinco e wurtzita, com desalinhamento de banda entre elétrons e buracos, o que produz uma "barreira"que impede o transporte de carga pelas SAW. Em (b), um nanofio de *core-shell* de GaAs/GaAsP em que a estrutura é puramente de blenda de zinco ao longo do raio, o que possibilita o transporte de carga por toda a extensão do nanofio. Retirado de [106]. 116
D.3 Setup experimental no qual o laser envia o sinal luminoso, o qual atinge o *beam splitter* e é refletido em direção à lente objetiva, a qual focaliza o feixe de luz para um *spot* de alguns micrômetros. Esse feixe atinge o nanofio no criostato, e o sinal de fotoluminescência segue o caminho inverso do feixe de luz, passando pela lente objetiva, atravessando o *beam splitter* e chegando ao espectrômetro e à câmera CCD, registrando os resultados encontrados do espectro de luz emitido. Por fim, o gerador de RF excita o dispositivo SAW com os nanofios depositados, para que seja possível diferenciar a distribuição espacial da PL nas situações em que o dispositivo está ativado ou não e observar o que houve com o transporte de cargas. 118
D.4 (a) Substrato de GaAs onde os nanofios de GaAs/GaAsP foram crescidos. As regiões alaranjadas possuem uma maior concentração de nanofios. (b) Sinal de fotoluminescência captado de um nanofio individual. 119

Sumário

1 Introdução **20**

1.1 Piezoeletricidade 22

1.2 Transdutores Interdigitais 22

1.2.1 Tecnologias quânticas e cQED 22

1.3 Nanofios Semicondutores 23

1.3.1 Transporte de Portadores de Carga por SAW 24

2 Fundamentação Teórica **25**

2.1 Efeitos Elásticos 26

2.1.1 *Strain* 26

2.1.2 Stress 29

2.1.3 Lei de Hook Generalizada 32

2.2 Piezoeletricidade 33

2.2.1 O Efeito do Centro de Simetria dos Cristais nas Propriedades Físicas 33

2.3 Propagação de Ondas em Materiais Piezoelétricos 36

2.4 Equação de Onda 38

2.4.1 Sólidos não piezoelétricos 38

2.4.2 Sólidos Piezoelétricos 40

2.5 Materiais Piezoelétricos 40

2.5.1 Estrutura Cristalina 40

2.6 Geração de Ondas Acústicas de Superfície 41

2.6.1 Transdutor Interdigital (IDT) 41

2.7 Método dos Elementos Finitos 42

2.7.1 Constantes Elásticas e Piezoelétricas 44

2.8 Parâmetros S 46

2.8.1 Analisador de Rede 49

2.9 Dispositivo de Ondas Acústicas de Superfície de ZnO/Si 50

2.9.1 Deposição de ZnO . . . 50
2.9.2 Transdutor Interdigital . . . 55
2.10 Conclusão . . . 57

3 Resultados do dispositivo SAW **59**
3.1 A Célula Unitária . . . 60
3.1.1 Autofrequências . . . 62
3.1.2 Parâmetro de Reflexão (S_{11}) . . . 63
3.1.3 COMSOL e as Propriedades do Dispositivo SAW . . . 64
3.1.4 Mesh . . . 65
3.1.5 Altura do Substrato e da PML . . . 68
3.1.6 Largura dos IDTs . . . 68
3.1.7 Altura dos IDTs . . . 69
3.2 A Linha de Atraso . . . 69
3.2.1 Parâmetros de simulação: PML e condições de contorno . . . 71
3.2.2 Simulação do Comsol . . . 72
3.2.3 O efeito de aumentar o número de pares de dedos N . . . 74
3.2.4 Emissão e Transmissão do Sinal . . . 75
3.2.5 Ressonador SAW (SAWR) . . . 76
3.3 Resultados experimentais . . . 79
3.3.1 Fabricação . . . 79
3.3.2 Medições . . . 80
3.4 Medições em temperaturas ultrabaixas . . . 83
3.4.1 Setup Experimental . . . 83
3.4.2 Resultados . . . 86
3.5 Conclusão . . . 87

4 Conclusão **89**

Referências **91**

Apêndices **100**

Apêndice A Grupo de Pontos de Cristais **100**
A.1 Transformações de Pontos de Simetria . . . 100
A.2 Sistemas Cristalinos . . . 101

A.3 Classes de simetria de pontos de cristais . . . 105
A.4 A relação linear de causa e efeito em cristais . . . 107
A.5 Simetria de Cristais . . . 108
A.5.1 Matrizes de Transformação de Simetria de Pontos . . . 108
A.6 Ausência de centro de simetria . . . 109

Apêndice B Simetria do Tensor de Stress 110

Apêndice C Fotolitografia e Lift-off 112

Apêndice D Fotoluminescência de nanofios semicondutores 113
D.1 Confinamento quântico . . . 114
D.2 Nanofios de *core-shell* GaAs/GaAsP . . . 115
D.3 Fabricação . . . 117
D.4 Fotoluminescência . . . 117
D.4.1 Setup Experimental . . . 117
D.4.2 Medições . . . 118
D.5 Conclusão . . . 119

Capítulo 1

Introdução

O presente trabalho tem como foco estabelecer uma base de estudo de dispositivos eletromecânicos para o desenvolvimento futuro de dispositivos híbridos, contendo ressonadores mecânicos baseados em sistemas piezoelétricos acoplados a outros sistemas. Esta investigação se baseia no estudo de ondas acústicas de superfície (SAWs), tanto por meio de simulações computacionais, e na medida de alguns dispositivos, focando nos parâmetros S, e em sua aplicabilidade em tecnologias que operam em ultra-baixas temperaturas, como circuitos supercondutores e em temperatura ambiente em fenômenos de transporte em nanofios semicondutores.

Dispositivos SAW desempenham um papel fundamental nas tecnologias modernas, sendo aplicados em diversas áreas, como sensores, atenuadores, ressonadores e filtros [1]. A capacidade desses dispositivos de converter sinais elétricos em mecânicos é essencial para seu funcionamento.

O funcionamento desses dispositivos baseia-se na geração de ondas ao longo da superfície de um substrato piezoelétrico, um material cujas propriedades mecânicas são alteradas mediante a aplicação de um potencial elétrico. Essa transformação é induzida por pares de eletrodos metálicos, denominados transdutores de onda acústica de superfície ou IDTs (*Interdigital Transducers*), que são depositados sobre o substrato, como representado na Figura 1.1. Cada IDT é composto por dois conjuntos de eletrodos com formato de pente, cujos "dentes"se intercalam. Tipicamente, um dispositivo SAW inclui dois IDTs: um para a entrada, que recebe um sinal elétrico, e o outro para a saída, que detecta o sinal elétrico propagado junto às ondas mecânicas. O sinal de entrada ativa o substrato piezoelétrico, que responde deformando-se na mesma frequência do sinal aplicado. Esta deformação cria ondas que se propagam pela superfície do substrato, carregando um campo elétrico associado. A uma certa frequência de ressonância, definida pelas dimensões físicas e pelo material do substrato, emerge uma onda acústica de superfície. O IDT de saída então captura este sinal, transformando as oscilações mecânicas de volta em um sinal elétrico.

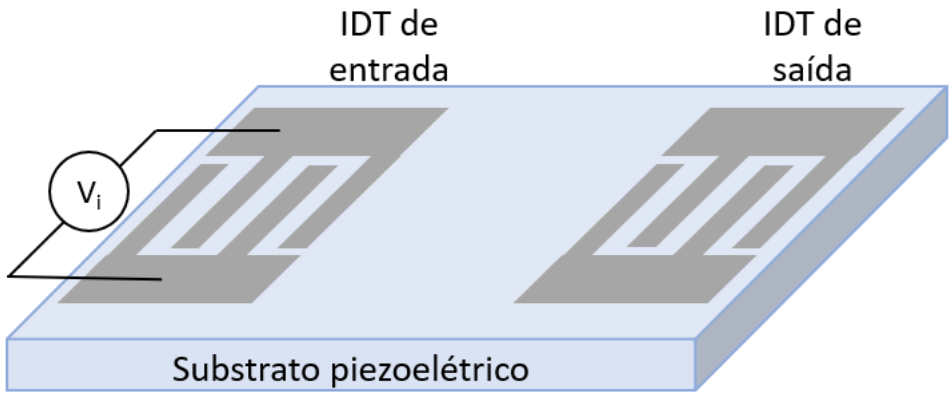


Figura 1.1: Esquema do dispositivo de ondas acústicas de superfície, em que o IDT de entrada atua como eletrodo para receber o sinal elétrico, o substrato piezoelétrico é o meio de propagação das ondas mecânicas e o IDT de saída é responsável por captar o sinal.

Para uma compreensão mais aprofundada desses fenômenos, o capítulo 2 desta dissertação concentra-se no desenvolvimento da teoria da elasticidade e da piezoeletricidade. Essa base teórica é essencial para o entendimento da equação de onda em materiais piezoelétricos e explicar o funcionamento de um dispositivo de ondas acústicas de superfície.

Ou seja, nesta tese investigamos dispositivos de ondas acústicas de superfície visando compreender seu funcionamento e potencial para futuras aplicações em experimentos que envolvem a interação entre campos elétricos e matéria no regime quântico. Para tal, realizamos um estudo detalhado sobre o design e o comportamento destes dispositivos, empregando simulações assistidas pelo método de elementos finitos. Os dados obtidos foram então confrontados com resultados existentes na literatura. Adicionalmente, realizamos medidas de transmissão e reflexão de sinais em um dispositivo real, tanto em condições de temperatura ambiente quanto em regime de temperaturas criogênicas (aproximadamente 10 mK). Essa etapa foi importante para compreender as características do comportamento dos dispositivos SAW sob condições ultra-baixas de temperatura, um pré-requisito para sua futura integração em circuitos supercondutores. Os resultados e análises obtidos desta parte da pesquisa são detalhados no capítulo 3.

Adicionalmente, neste trabalho, detalharemos a análise da fotoluminescência realizada para caracterizar as propriedades ópticas de nanofios semicondutores através de uma fotoexcitação. Ela ocorre quando um feixe de laser focalizado atinge um nanofio semicondutor, induzindo os elétrons a absorverem fótons e ascenderem à banda de condução. Durante o processo de relaxamento, o elétron retorna ao seu estado original na banda de valência, recombina-se com um buraco, e emite luz. Esta emissão de luz, ou fotoluminescência, reflete a energia dos fótons absorvidos. O material dos nanofios utilizados é o GaAs com uma passivação de GaAsP, o qual apresenta um sinal de

fotoluminescência mais intenso do que o nanofio de GaAs sem passivação. Os detalhes teóricos e os resultados desta análise são apresentados no apêndice D.

1.1 Piezoeletricidade

O fenômeno da piezoeletricidade foi descoberto em 1880 por Pierre e Jacques Curie, que observaram que vários cristais, incluindo quartzo, topázio, açúcar de cana, sal de Rochelle e turmalina, geravam uma diferença de potencial elétrico quando submetidos a compressão [2]. Esse fenômeno foi denominado de "efeito direto da piezoeletricidade". No ano seguinte, o matemático Lippman teorizou que a aplicação de um campo elétrico poderia deformar esses materiais [3], uma observação posteriormente confirmada experimentalmente pelos irmãos Curie, dando origem ao "efeito inverso da piezoeletricidade"[4].

1.2 Transdutores Interdigitais

Os transdutores interdigitais, por sua vez, têm suas raízes na descoberta de que ondas acústicas de superfície podem ser eletricamente excitadas por meio do efeito inverso da piezoeletricidade. Essa descoberta foi realizada pelos engenheiros Voltmer e Richard M. White, que demonstraram que SAWs podem ser detectadas por eletrodos interdigitais impressos por litografia em um substrato de cristal piezoelétrico plano [5]. O desenvolvimento desses dispositivos ganhou impulso nas décadas de 1960 e 1970, com a subsequente diversificação de suas aplicações [6].

À medida que avançavam as pesquisas ao final do século XX, houve um redirecionamento desses dispositivos para a integração eletromecânica, resultando em sua aplicação em uma variedade de funções, como osciladores, filtros, sensores e transformadores [7]. A combinação de características como tamanho compacto, baixo peso, durabilidade e facilidade de produção torna esses dispositivos uma escolha preferencial em muitas aplicações tecnológicas.

1.2.1 Tecnologias quânticas e cQED

Os dispositivos de ondas acústicas de superfície desempenham um papel crucial como ressonadores eletromecânicos para mediar a transdução entre radiação eletromagnética na faixa de rádio frequência (RF) ou micro-ondas e estados de spin ou fótons. Essa funcionalidade tem sido impulsionada nos últimos anos pela crescente necessidade de melhorias em sistemas de comunicação, abrangendo amplificação, modulação e conversão de sinais [8, 9], além de aplicações em sensoria-

mento quântico [10, 11, 12, 13, 14] e processamento de informação quântica [14, 15, 16, 17, 18, 19, 20].

No cenário de processamento quântico da informação, os circuitos supercondutores surgem como um dos candidatos mais promissores [21]. Nesse contexto, os dispositivos de ondas acústicas de superfície, com suas perdas internas excepcionalmente baixas, emergem como candidatos ideais para a integração com circuitos supercondutores [22, 23, 24]. A baixa perda interna proporciona um ambiente altamente propício para aplicações como elementos de processamento quântico e memórias quânticas [25, 26, 23].

A investigação dos modos de vibração gerados por esses dispositivos revelou que esses modos podem ser adequadamente descritos como osciladores harmônicos simples, seguindo comportamentos de materiais elásticos clássicos [27]. Considerando a perspectiva de integração desses dispositivos com circuitos supercondutores, tornou-se fundamental conduzir pesquisas voltadas para a compreensão do comportamento quântico desses modos [28, 29, 10]. Essas investigações abrangem uma variedade de aplicações, incluindo a exploração da transição clássico-quântico [30, 31, 32, 33]. Uma vez que os graus de liberdade individuais dessas estruturas refletem o movimento de todas as partículas constituintes do material, esses dispositivos apresentam características de estruturas macroscópicas.

É importante destacar que, os estados de superposição quântica são afetados pela decoerência do ambiente, e a medida dos estados quânticos distintos dessas estruturas é um importante tópico de pesquisa nesta área [31, 32]. Desta forma, nesta dissertação, nosso foco foi o estudo de designs de dispositivos SAW destinados à futura integração destes sistemas em circuitos supercondutores, possibilitando a fabricação desses dispositivos para testar experimentalmente as previsões mais recentes da mecânica quântica [34].

1.3 Nanofios Semicondutores

Os nanofios são estruturas que, idealmente, possuem geometria cilíndrica, com diâmetros da ordem de nanômetros e comprimentos da ordem de micrômetros. Quando fabricados com materiais semicondutores, exibem propriedades de absorção e emissão de luz, caracterizadas pela fotoluminescência.

Nos últimos anos, os nanofios semicondutores têm sido objeto de intensa pesquisa devido ao seu potencial em diversas aplicações tecnológicas. Uma das perspectivas mais promissoras é a integração óptica em sistemas eletrônicos. Devido à sua natureza quase unidimensional, é possível modificar suas dimensões geométricas, composição e estrutura cristalina [35]. Essa flexibilidade

permite o controle das propriedades optoeletrônicas dos nanofios semicondutores. Além disso, essas estruturas têm sido empregadas em experimentos relacionados à computação quântica [36].

1.3.1 Transporte de Portadores de Carga por SAW

Os nanofios semicondutores desempenham um papel fundamental na investigação de fenômenos quânticos nos quais as SAWs interagem com portadores de carga [37, 38, 39]. Esse campo surge devido às tensões elásticas propagantes no material, resultantes do efeito inverso da piezoeletricidade. Operando na frequência em que a SAW é excitada, esse campo modula as propriedades ópticas de sistemas semicondutores nanoestruturados, afetando a dinâmica de elétrons e buracos e modificando o potencial de confinamento desses portadores de carga. Pesquisas têm demonstrado que as SAWs podem ser usadas para controlar excitações elementares, como elétrons [40, 41], excitons [42], spins [43, 44], fótons [45, 46, 47] e estados eletrônicos [48] em semicondutores nanoestruturados, como nanofios. Recentemente, o estudo da interação entre SAWs e excitações elementares em sistemas semicondutores tem despertado grande interesse devido às possíveis aplicações em informação quântica, optomecânica e fotônica [49, 50, 51].

Até o momento, as pesquisas sobre o transporte de portadores mediado por SAW em nanofios semicondutores são limitadas [52]. Em muitos desses estudos, os nanofios apresentavam politipismo, o que significa que diferentes arranjos geométricos estavam presentes na mesma estrutura, causando flutuações de potencial que atuam como barreiras para o transporte eficiente de portadores e afetando o sinal de fotoluminescência. No caso dos nanofios de GaAs, o politipismo envolve a presença das estruturas blenda de zinco e wurzita no mesmo material, ao longo da direção de crescimento dos nanofios.

O objetivo desta parte do estudo era realizar medições do sinal de fotoluminescência na presença de um campo piezoelétrico gerado pelas SAWs em dispositivos, a fim de interagir com portadores fotoexcitados. Os portadores seriam provenientes de nanofios tipo *core/shell* de GaAs/GaAsP, doados pelo Prof. Dr. Alexander Tartakovskii da Universidade de Sheffield e que são livres de politipismo. Esperava-se que as medições indicassem que a estrutura homogênea de blenda de zinco permitisse o transporte eficiente dos portadores.

No entanto, a pandemia afetou adversamente o progresso dessa pesquisa, impossibilitando sua conclusão. Contudo, medidas de fotoluminescência em alguns dos dispositivos foram feitas e seus resultados são apresentados no apêndice D. No mais, houve uma mudança de foco na pesquisa dos dispositivos de ondas acústicas, em que seu comportamento foi simulado computacionalmente e comparado com resultados experimentais, nos quais a frequência de ressonância medida e simulada apresentou uma diferença menor que 1%.

Capítulo 2

Fundamentação Teórica

Nesse capítulo, vamos descrever alguns dos conceitos básicos necessários para discutir e entender piezoeletricidade e dispositivos SAW. Partiremos da teoria de deformação (de onde surge o conceito de *strain*) de materiais através da aplicação de uma força, a qual tomará forma de uma densidade por unidade de volume (*stress*). A relação entre *strain* e *stress* será modelada como uma relação linear entre si através da Lei de Hook, cujo regime de validade se limita para pequenas deformações. Isso dá luz aos chamados efeitos elásticos, isto é, a tendência de um material a retornar ao estado relaxado e permanecer idêntico à sua forma original quando o mesmo deixa de estar submetido a uma força externa.

Em seguida, serão fornecidas as ferramentas necessárias para entender o efeito da piezoeletricidade, que descreve a deformação de um sólido por uma interação eletromecânica, levando em conta os conceitos de deformação e tensão para o estado mecânico do sólido, e o campo elétrico e deslocamento para os efeitos eletromagnéticos que ocorrem em sólidos piezoelétricos. Dessa maneira, a origem cristalina desse efeito será descrita como a ausência do centro de simetria das células unitárias de um cristal, como será mostrado nesse capítulo e no apêndice A.3, e a piezoeletricidade será relacionada com os efeitos elásticos do material, para que se possa descrever o efeito piezoelétrico com a deformação sofrida pelos mesmos. Também serão descritos os materiais piezoelétricos que foram estudados nesse projeto e, por fim, será feito um breve comentário sobre ondas que se propagam em sólidos piezoelétricos, no qual será discutido mais especificamente as ondas acústicas de superfície, sendo essa a forma principal de propagação ao longo dessa dissertação. Nossa descrição é baseada nos trabalhos de Royer [53, 54].

2.1 Efeitos Elásticos

As propriedades de materiais elásticos dizem respeito de deformações do material, excluindo-se as translações ou rotações do mesmo, pois esses movimentos não produzem forças internas. Um sólido pode ser deformado pela interação de diferentes tipos de mecanismos: mecânico, térmico, magnético e elétrico e a elasticidade se refere aos sólidos que retornam ao seu tamanho e forma originais após a interação.

Quando forças externas atuam em um sólido, suas partículas se deslocam de posição, e o sólido se deforma, há a formação de *stress* e *strain*. Nesta seção, vamos descrever de forma resumida estas características, que descrevem os efeitos elásticos em sólidos.

2.1.1 *Strain*

Strain, é uma medida relacionada à deformação, ou seja, da alteração dimensional de um material submetido a uma força ou tensão. Consiste na resposta do material através de mudanças no comprimento, volume ou forma expressados como uma razão adimensional entre a mudança na dimensão e a dimensão original do material.

A Figura 2.1 apresenta um modelo unidimensional de um fio de comprimento L fixado no lado esquerdo na parte superior e na parte de baixo, o mesmo fio deformado por estar submetido a uma força externa atuando em direção ao lado direito, deformando-se até um comprimento $L + \Delta L$.

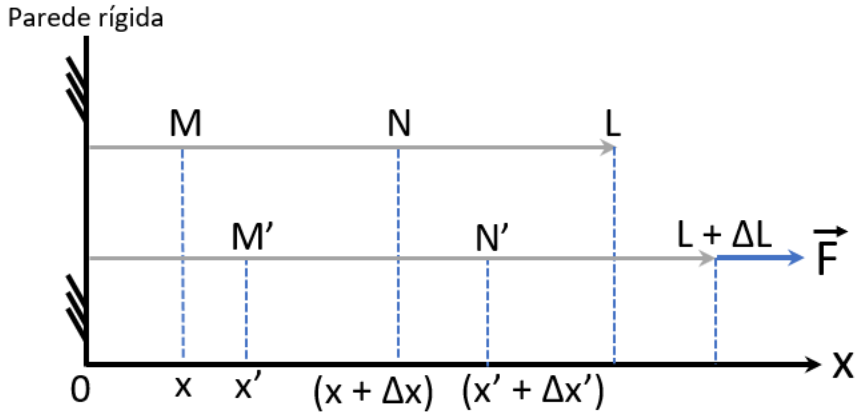


Figura 2.1: As semirretas cinzas representam uma corda extensível fixada no lado esquerdo, com o desenho superior representando a corda relaxada com comprimento L e pontos M e N nas posições x e $x + \Delta x$, respectivamente. Enquanto isso, o desenho inferior demonstra a deformação da mesma corda durante a aplicação de uma força apontada para a direita, alterando seu comprimento para $L + \Delta L$. Os pontos M e N se deslocaram para M' e N' nas posições x' e $x + \Delta x$', respectivamente. Adaptado de [55].

Os pontos de corda relaxados, M e N, estão inicialmente localizados em x e $x + \Delta x$ e, pela aplicação da força, deslocam-se para M' e N', localizados em x' e x'$+\Delta x$'. Assim, os deslocamentos dos pontos M e N são [55]:

$$M: \ u(x) = x' - x \tag{2.1.1a}$$

$$N: \ u(x + \Delta x) = (x' + \Delta x') - (x + \Delta x). \tag{2.1.1b}$$

A equação 2.1.1b pode ser reescrita como:

$$\begin{aligned} u(x + \Delta x) &= (x' - x) + (\Delta x' - \Delta x) \\ &= u(x) + \Delta u(x) \end{aligned} \tag{2.1.2a}$$

A equação acima implica que o segmento $\overline{MN}$ é deformado somente se $\Delta u(x) \neq 0$ e transladado caso contrário. Para cada deformação, definimos a deformação relativa como:

$$\frac{\Delta L}{L} = \frac{u(x + \Delta x) - u(x)}{\Delta x} \tag{2.1.3}$$

Em um cristal, a deformação pode ser muito pequena, pois estamos lidando com distâncias interatômicas. Desta forma, a deformação relativa é definida como o limite:

$$S = \lim_{\Delta x \to 0} \left[\frac{u(x + \Delta x) - u(x)}{\Delta x} \right] = \frac{du}{dx} \tag{2.1.4}$$

Para o sólido tridimensional, deve-se notar que quando submetido à forças externas, ele pode não apenas ser deformado em apenas uma direção, mas também uma força aplicada em uma direção pode causar outros tipos de movimento, como uma rotação do segmento $\overline{MN}$ [53].

Tendo isso em conta, a descrição do deslocamento do ponto N com as coordenadas iniciais $x_i + dx_i$ pode ser expressa como:

$$u_i(x_j + dx_j) = u_i(x_j) + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} dx_j = u_i(x_j) + du_i, \tag{2.1.5}$$

onde o subíndice j é usado para a convenção de soma. O requisito para o deslocamento do ponto M em relação a N é $\frac{\partial u_i}{\partial x_j} \neq 0$.

O tensor introduzido na equação 2.1.5 não é apropriado para representar a deformação como um deslocamento dos pontos em relação uns aos outros porque uma simples rotação global implica em um gradiente de deslocamento diferente de zero. Isso pode ser visto supondo que um sólido é girado por um pequeno ângulo $\alpha \approx 0$ em torno do eixo Ox_3. As novas coordenadas são transformadas

como:

$$x'_i = R_{ij}x_j \tag{2.1.6}$$

Aqui, R_{ij} é a matriz de rotação em torno do eixo Ox_3, definida como:

$$R_{ij} = \begin{bmatrix} cos\,\alpha & sin\,\alpha & 0 \\ -sin\,\alpha & cos\,\alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \approx \begin{bmatrix} 1 & \alpha & 0 \\ -\alpha & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \tag{2.1.7}$$

Para atribuir o efeito do deslocamento de cada átomo, devemos ter:

$$u_i = x'_i - x_i = R_{ij}x_j - x_i \tag{2.1.8}$$

o que significa que:

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_j} = (R_{ij} - \delta_{ij}) \tag{2.1.9}$$

onde δ_{ij} é o delta de Kronecker. A matriz para a equação 2.1.9 é:

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_j} = \begin{bmatrix} 0 & \alpha & 0 \\ -\alpha & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \neq 0 \tag{2.1.10}$$

O gradiente de deslocamentos para rotação em pequenos ângulos é antissimétrico, e qualquer parte antissimétrica do gradiente, que pode ser escrito como:

$$\Omega_{ij} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{\partial u_j}{\partial x_i}\right),$$

deve ser excluído. Com esta consideração, a parte simétrica restante não leva em conta nenhuma translação e rotação, estabelecendo esses efeitos na matriz de *strain* para zero, sendo definido como:

$$S_{ij} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i}\right) \tag{2.1.11}$$

O *strain* é uma quantidade física adimensional que relaciona a deformação em um sólido relativamente à sua forma inicial como um tensor de segunda ordem.

2.1.2 Stress

Outro aspecto fundamental na caracterização dos efeitos elásticos em materiais sólidos é o conceito de *stress* ou tensão mecânica.

O *stress* (σ) expressa qual é a força aplicada a uma certa área da seção transversal de um objeto, isto é, $\vec{\sigma} = \vec{F}/A$. Ela representa a força aplicada ou sistema de forças que tende a deformar um corpo.

Da perspectiva do que está acontecendo dentro do material, a tensão é a distribuição interna de forças dentro do corpo que se equilibram e reagem às cargas aplicadas a ele. É importante notar que tensões na maioria dos sólidos, 2-D ou 3-D, são mais complexas e precisam ser definidas de forma mais detalhada. Nestes casos, a força atuando sobre uma pequena área de um sólido tem que ser decomposta em três componentes: uma normal e duas paralelas ao plano. Ainda, cada uma das componentes da força pode causar uma deformação em todas as direções. No caso mais complexo, cada uma das três componentes da força ocasiona uma deformação nas três componentes do volume do material, originado o tensor de tensão que possui nove componentes, descrevendo completamente o estado de elasticidade de cada ponto. A componente de força normal dividida pela área dá a tensão normal, e as componentes de força paralela divididas pela área dão a tensão de cisalhamento.

As forças externas são transmitidas pelo sólido através das forças interatômicas ao longo do meio, cujo raio de ação atua a poucas distâncias atômicas, tornando-se desprezíveis em escala macroscópica. Então, como é considerado grande em relação à escala interatômica e pequeno em escala macroscópica, pode ser considerado como atuando em superfícies dentro do sólido.

Estes fatos encorajam a definir um vetor de tração mecânica $\vec{T}$ como uma força por unidade de área exercida pelo material em um plano dentro do mesmo. Para fazer isso, vamos definir um vetor unitário $\hat{l} = (l_1, l_2, l_3)$ normal a um elemento de superfície dS (figura 2.2). A quantidade $\vec{T}$ não é necessariamente paralela a $\hat{l}$, sendo escrita como [55]:

$$\vec{T}(\hat{l}) = \lim_{\Delta S \to 0} \frac{\Delta \vec{F}}{\Delta S} = \frac{d\vec{F}}{dS} \tag{2.1.12}$$

A Figura 2.2 também apresenta a densidade das forças externas por unidade de área $\vec{p_i}$ e a densidade das forças internas por unidade de volume $\vec{f_i}$. Com isso, pode-se definir a tensão através da condição de equilíbrio em um volume V por considerações de equilíbrio mecânico:

$$F_i = \int_S T_i(\vec{l}) dS + \int_V f_i dV = 0 \tag{2.1.13}$$

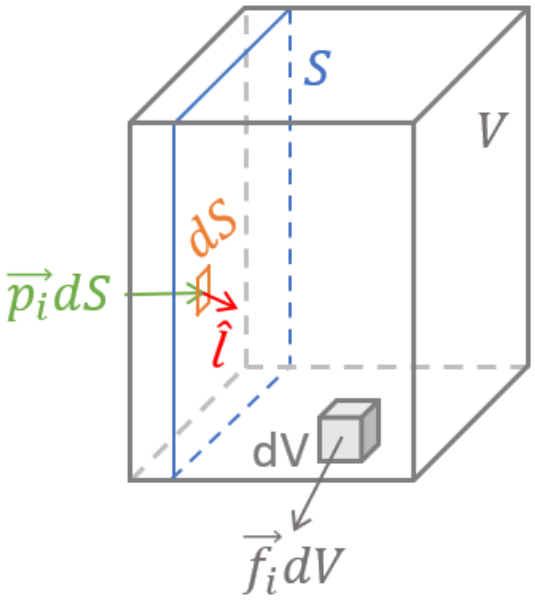


Figura 2.2: Efeito da tração em um volume infinitesimal dentro de um sólido quando o volume total V (em cinza) do sólido é submetido a uma força externa com densidade $\vec{p_i}$ (verde). Para atingir o equilíbrio mecânico, as forças internas se contrabalançam na forma de forças de volume interno com densidade $\vec{f_i}$ (cinza). A figura mostra, ainda, um corte transversal representando uma superfície S em azul e o versor $\hat{l}$ em vermelho, normal ao elemento da superfície dS em laranja.

Utilizando o teorema do divergente na notação tensorial, temos:

$$\int_S A_i dS_j = \int_S A_i l_j dS = \int_V (\nabla_j \cdot A_i) dV \tag{2.1.14}$$

onde A_i representa um tensor de nível um arbitrário e l_j são os componentes do vetor $\vec{l}$, e comparando as equações 2.1.13 e 2.1.14 , obtemos:

$$f_i = -\sum_{j=1}^{3} \frac{\partial T_{ij}}{\partial x_j} \tag{2.1.15a}$$

$$T_i(\hat{l}_j) = T_{ij} l_j \tag{2.1.15b}$$

com i e j variando de 1 a 3. Na equação 2.1.15b, a tração mecânica aparece em uma superfície com orientação $\hat{l}$ como $\vec{T}(\hat{l})$ referente a T_{ij}, que é a chamada tensão [53], representando o i-ésimo componente aplicado na superfície perpendicular ao eixo Ox_j:

$$T_{ij} = \lim_{\Delta S_j \to 0} \frac{\Delta F_i}{\Delta S_j} = \frac{d\vec{F}_i}{dS_j} \tag{2.1.16}$$

O tensor de segunda ordem apresentado acima tem nove elementos que são reduzidos a seis elementos independentes devido à simetria tensorial, conforme demonstrado no Apêndice B.

Para uma melhor compreensão do significado dos componentes de T_{ij}, a figura 2.3 mostra alguns esquemas de como os componentes se comportam em sistemas físicos produzindo forças de compressão, tração e cisalhamento. Existe uma limitação da simetria do tensor, sendo quebrada quando um campo elétrico interage com um cristal polar, por exemplo. No entanto, continua sendo uma boa aproximação, pois o torque externo causado por mecanismos que levam à assimetria tensorial é frequentemente fraco [53].

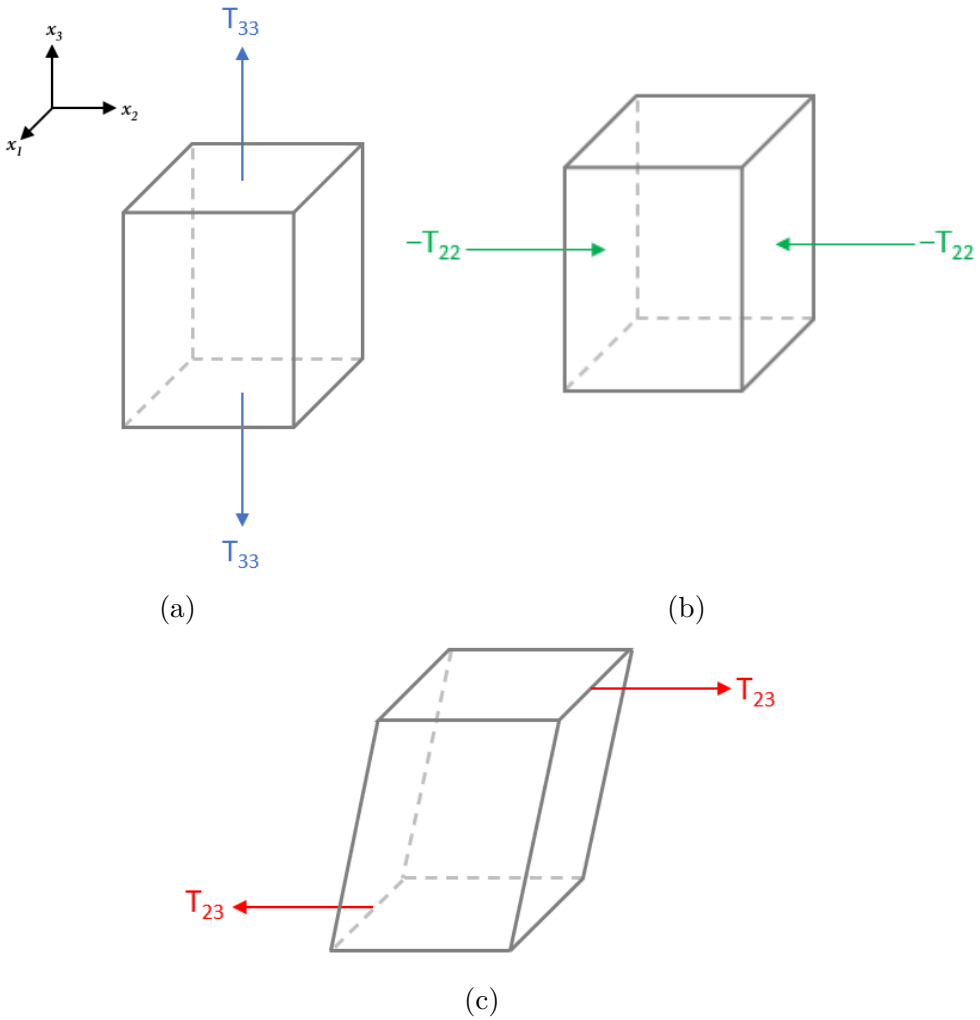


Figura 2.3: Componentes de (a) tração (T_{33}, setas azuis), (b) compressão (T_{22}, setas verdes) e (c) cisalhamento (T_{23}, setas vermelhas) do tensor de tensão. Na figura 2.3c, as setas correspondem ao componente tangencial T_{23} do tensor de *strain*.

A nomenclatura dos componentes são:

(i) T_{11}, T_{22} e T_{33}: trações ou compressões para as tensões normais às superfícies;

(ii) T_{12}, T_{13} e T_{23}: forças de cisalhamento para as tensões tangenciais.

2.1.3 Lei de Hook Generalizada

Como foi dito anteriormente, um sólido elástico retorna ao seu estado original quando as forças externas são removidas devido ao trabalho das tensões internas.

Há evidências experimentais de que, para a maioria das substâncias, a relação entre tensão e deformação de sólidos submetidos a pequenas deformações é bem descrita tomando o termo de primeira ordem de uma expansão de Taylor [53]:

$$T_{ij}(S_{kl}) = T_{ij}(0) + \left(\frac{\partial T_{ij}}{\partial S_{kl}}\right)_{S_{kl}=0} S_{kl} + \frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2 T_{ij}}{\partial S_{kl} S_{mn}}\right)_{S_{kl}=S_{mn}=0} S_{kl}S_{mn} + ... \tag{2.1.17}$$

Como não há estresse inicial (ou seja, $T_{ij}(0) = 0$), temos

$$T_{ij} = c_{ijkl} S_{kl} \tag{2.1.18}$$

onde

$$c_{ijkl} = \left(\frac{\partial T_{ij}}{\partial S_{kl}}\right)_{S_{kl}=0} \tag{2.1.19}$$

é definido, chamado de tensor de rigidez. Este é um tensor de grau quatro, expressando a característica de um material deformado quando submetido a uma tensão externa. A equação 2.1.18 é chamada de Lei de Hook, generalizada para todas as relações possíveis entre o tensor de tensão e deformação.

Qualquer tensor de quatro postos tem componentes 3^4, mas devido às considerações de simetria para T_{ij} e S_{kl}, o tensor de rigidez não é afetado por uma permutação de i e j ou k e l, isso é:

$$c_{ijkl} = c_{jikl} \; e \; c_{ijkl} = c_{ijlk} \tag{2.1.20}$$

A equação 2.1.18 pode ser escrita, em termos dos tensores de deslocamento, como:

$$T_{ij} = \frac{1}{2} c_{ijkl} \frac{\partial u_k}{\partial x_l} + \frac{1}{2} c_{ijkl} \frac{\partial u_l}{\partial x_k} \tag{2.1.21}$$

Mas, como $c_{ijkl} = c_{ijlk}$, os termos da soma do lado direito da equação acima são iguais, então:

Par (ij)	Índice Reduzido
11	1
22	2
33	3
23 / 32	4
13 / 31	5
12 / 21	6

Tabela 2.1: Notação reduzida para os índices.

$$T_{ij} = c_{ijkl}\frac{\partial u_k}{\partial x_l} \tag{2.1.22}$$

Considerando as relações de simetria acima, das 81 componentes das constantes elásticas, apenas 36 são independentes. Isso sugere que um par não ordenado (i,j) pode ser substituído por seis valores independentes como mostra a tabela 2.1:

Então, relacionando α ao par (i,j) e β a (k,l), a equação 2.1.18 é simplificada para:

$$T_\alpha = c_{\alpha\beta}S_\beta \tag{2.1.23}$$

2.2 Piezoeletricidade

O efeito direto da piezoeletricidade resulta na formação de uma diferença de potencial em um sólido sob a ação de uma deformação mecânica (figuras 2.4a e 2.4b). Por outro lado, o efeito inverso atua deformando mecanicamente um sólido quando submetido à uma diferença de potencial (figuras 2.4c e 2.4d) [53].

2.2.1 O Efeito do Centro de Simetria dos Cristais nas Propriedades Físicas

Para agir como um piezoelétrico, os cristais não devem ter um centro de simetria [56]. Utilizando a figura 2.5 podemos ter uma ideia mais clara deste mecanismo. Nesta figura, temos um cristal centrossimétrico, ou seja, seu centro de massa de cargas positivas e negativas coincidem em seu centro de simetria. Mesmo com uma deformação mecânica em qualquer direção (como na figura 2.5b, por exemplo) não há uma mudança na simetria do sistema. Por causa disso, a polarização líquida é zero.

No caso de um material sem centro de simetria (polarização zero) (figura 2.5c), dependendo

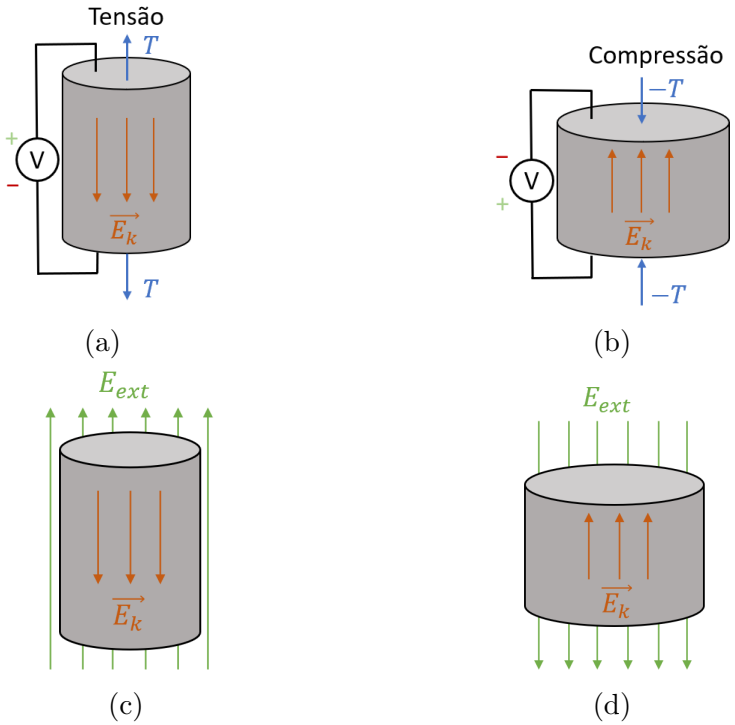


Figura 2.4: Nas figuras (a) e (b), uma força F atua sobre um sólido verticalmente, causando uma deformação. Para um sólido piezoelétrico, o efeito piezoelétrico direto postula que o voltímetro V medirá uma tensão diferente de zero. A polarização de tensão devido à força de tração em (a) difere da polarização de tensão devido à força de compressão em (b). O agente do efeito inverso nas figuras (c) e (d) é o campo elétrico externo $\vec{E}_k$, que produz a deformação do sólido.

da direção em que uma força é aplicada, pode resultar em uma deformação que altera o centro de massa do negativo e íons positivos (figura 2.5d), resultando em uma polarização líquida e em uma diferença de tensão entre os planos onde a força é aplicada. Mas em outra direção isso pode não acontecer (2.5e). Isso sugere que a piezoeletricidade também depende da direção em que a carga mecânica está agindo.

Através desse modelo, podemos definir uma polarização em termos da pressão aplicada no material dada por:

$$P = dT = d\frac{F}{A} \tag{2.2.1}$$

onde d é a constante piezoelétrica, T é a pressão mecânica a que o material está submetido, F é a força aplicada em uma área A, gerando a pressão.

A polarização é definida como a formação de uma carga por unidade de área, ou seja:

$$P = \frac{Q}{A} \tag{2.2.2}$$

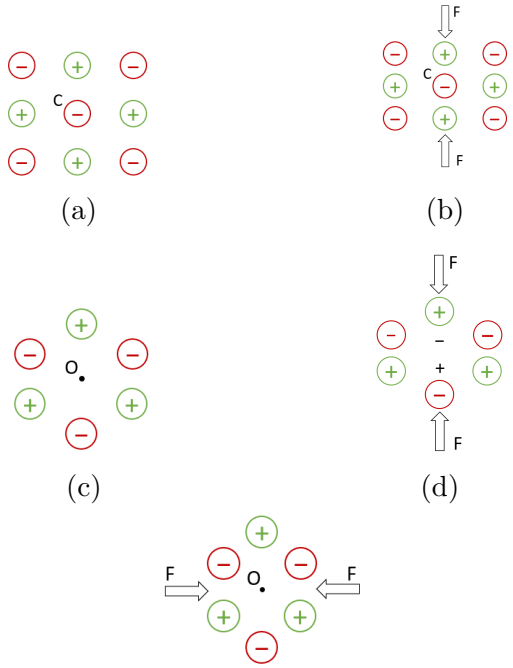


Figura 2.5: Exemplos da ocorrência de piezoeletricidade dependendo da distribuição de carga nos materiais. O círculo verde com o sinal de mais indica cargas positivas e o círculo vermelho com o sinal de menos, negativas. Em (a), a distribuição centrossimétrica leva a uma polarização líquida zero no centro C, e, conforme mostrado em (b), uma força aplicada F deforma o material, aproxima-se das cargas, mas não há formação de um campo elétrico. Caso contrário, a distribuição não centrossimétrica em (c) forma uma polarização líquida no centro C de forma que a aproximação das cargas devido à deformação causada pela força F forma um campo elétrico no centro.

em que Q é a carga elétrica formada na área A.

Para um modelo capacitivo, a tensão entre dois pólos do capacitor é dado por $V = Q/C$, em que C é a capacitância. Dessa forma, juntando essa definição com as equações 2.2.1 e 2.2.2 temos:

$$V = \frac{Q}{C} = \frac{AP}{\frac{\epsilon_0 \epsilon_r A}{L}} = \frac{dLF}{\epsilon_0 \epsilon_r A} \tag{2.2.3}$$

onde ϵ_0 e ϵ_r são as permissividades do vácuo e relativa do material, respectivamente, e L é a distância entre as placas do capacitor. Com essa equação, mostramos como a diferença de potencial no material se relaciona com a força aplicada no mesmo.

Agora, vamos evocar as equações para o caso tridimensional. Seja $\vec{D}$ o campo de deslocamento elétrico de um material. Então, em um sólido dielétrico não piezoelétrico, as equações constitutivas

são:

$$T_{ij} = c^E_{ijkl} S_{kl} \tag{2.2.4a}$$

$$D_k = \varepsilon^T_{kl} E_l \tag{2.2.4b}$$

onde D_k é o campo elétrico de deslocamento na direção k, ε_{kl} é a permissividade relativa e os índices superiores representam um campo elétrico externo (E) ou tensões (T) nulos.

Considerando o efeito piezoelétrico, as equações 2.2.4 se transformam em [53, 6]:

$$T_{ij} = c^E_{ijkl} S_{kl} - d_{kij} E_k \tag{2.2.5a}$$

$$D_k = \varepsilon^T_{kl} E_l + d_{kij} S_{ij} \tag{2.2.5b}$$

onde $d_{ijk}[C/m^2]$ é o tensor piezoelétrico ou matriz de acoplamento. Essas são chamadas de relações constitutivas piezoelétricas, e serão importantes para o próximo capítulo, no qual será enunciada a equação de onda para sólidos piezoelétricos.

A demonstração de como a ausência de um centro de simetria para um cristal tridimensional é condição necessária para o mesmo ser um piezoelétrico está contida no apêndice A.6.

O tensor piezoelétrico tem 3^3 elementos, mas, como $d_{ijk} = d_{ikj}$ por causa das simetrias do tensor de tensão e deformação, o número de elementos independentes diminui para 18. Assim, a notação reduzida pode ser usado, assim como a equação 2.1.23:

$$d_{kij} = d_{k\alpha} \tag{2.2.6}$$

onde α é o mesmo que na tabela 2.1. Para os cristais triclínicos da classe 1, a matriz possui 18 elementos independentes [57]. Quanto maior a simetria do cristal, menos elementos independentes a matriz terá.

É importante comentar que, para medir um efeito piezoelétrico considerável, a falta de um centro de simetria é uma característica necessária, mas não suficiente do material [58].

2.3 Propagação de Ondas em Materiais Piezoelétricos

Na seção anterior, discutimos os principais tipos de efeitos em materiais elásticos, bem como algumas propriedades dos materiais piezoelétricos. Aqui, aplicaremos a teoria física para desenvolver a equação de onda em sólidos piezoelétricos e estabelecer os conceitos fundamentais para analisar o comportamento de um dispositivo SAW, que tem a função de transduzir um sinal elé-

trico em ondas acústicas [59], especificamente em forma de ondas de cisalhamento conhecidas como ondas Rayleigh. Esse processo de transdução é mediado por um dispositivo interdigitado chamado Transdutor Interdigital (ou IDT, do inglês *interdigital transducer*), cujo conceito foi proposto pelos engenheiros Richard M. White e Voltmer em 1966 [60].

A fim de oferecer uma perspectiva qualitativa das propriedades mecânicas e elétricas em estruturas planares, é importante entender as formas de propagação das ondas para prever o comportamento mecânico em um determinado dispositivo. Para isso, apresentamos na figura 2.6 alguns dos tipos de ondas que podem ocorrer nestes sistemas, as quais dependem das características do sólido e de suas interfaces [6].

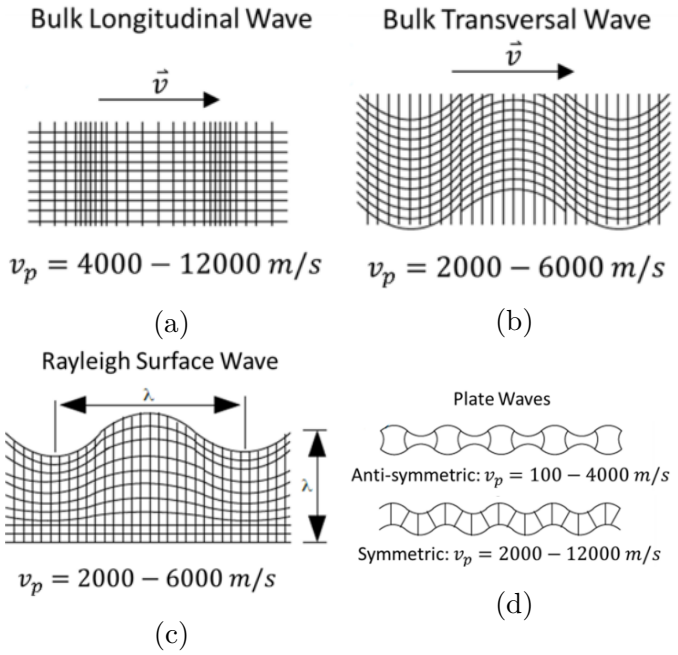


Figura 2.6: Ilustração de ondas elásticas se propagando da esquerda para a direita dentro de um sólido com o intervalo de velocidade v_p. As imagens estão fora de escala para evidenciar o movimento melhor; as velocidades de onda típicas para cada tipo de onda são mostradas abaixo de cada imagem. (a) Sólido ilimitado com uma onda *bulk* longitudinal (de compressão), conhecida como onda P. (b) Onda *bulk* transversal (de cisalhamento), conhecida como onda S. (c) Ondas acústicas de superfície, ou ondas Rayleigh, em um sólido semi-infinito. O movimento da onda se extingue em uma profundidade de aproximadamente um comprimento de onda abaixo da superfície. Esse é o tipo de onda que será estudado nessa dissertação. (d) Ondas em placas sólidas finas. Retirado de [55].

A noção de ondas acústicas de superfície (SAWs) se propagando através de meios sólidos será introduzida neste capítulo, em que faremos uso das teorias da elasticidade juntamente com a da piezoeletricidade, ambas previamente discutidas. Ao logo desse capítulo vamos discutir os

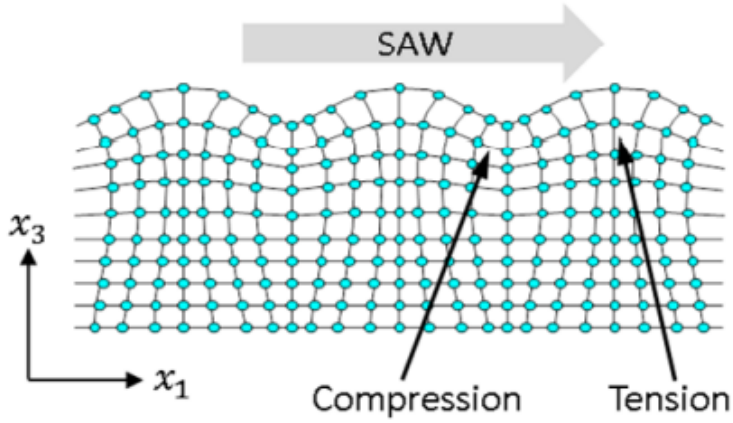


Figura 2.7: Representação do movimento de partículas se propagando ao longo do plano x_1Ox_3. Observe que a amplitude decresce à medida que a profundidade do sólido aumenta. Mais próximo à superfície, há regiões em que a densidade de partículas é maior, onde há compressão, ou menor, gerando tensão. Retirado de [55].

principais detalhes deste modelo, e será apresentada a solução específica SAW Rayleigh na qual nosso estudo está focado e discutimos a geração de SAW. Finalmente, o próximo capítulo é dedicado ao modelo de simulação de propagação de SAWs Rayleigh em sólidos piezoelétricos.

A onda Rayleigh, descrita por Lord Rayleigh em 1885 [61], representa um caso particular das ondas acústicas de superfície (SAW). Caracteriza-se pelo movimento elíptico das partículas na superfície de um sólido, observável em um plano perpendicular à direção de propagação. Este movimento resulta do acoplamento entre modos longitudinais e transversais de vibração. A Figura 2.7 ilustra este comportamento distintivo, evidenciando as regiões de compressão e tensão na superfície do material. Notavelmente, a propagação das ondas Rayleigh é confinada ao plano x_1Ox_3, sem componentes na direção x_2, delineando um padrão restrito de movimento que sublinha a complexidade e a especificidade dessas ondas em contextos de materiais e dispositivos.

2.4 Equação de Onda

2.4.1 Sólidos não piezoelétricos

As condições de equilíbrio dinâmicas em um volume V podem ser expressas em termos do tensor de tensão e deformação. Então, suponha que f_i seja uma força atuando sobre V. Da

equação 2.1.13, a soma das forças resulta em:

$$F_i = \int_s T_i(\vec{l})\, ds + \int_V f_i\, dV = \int_V \left(\frac{\partial T_{ij}}{\partial x_j} + f_i \right) dV \tag{2.4.1}$$

As distâncias interatômicas são tão pequenas que o volume pode ser considerado como $V \to 0$. Portanto, $\partial T_{ij}/\partial x_j$ é virtualmente constante nesta região. Com essa consideração, iguala-se a força por unidade de volume com a multiplicação da densidade de massa ρ pela aceleração com componentes $\partial^2 u_i/\partial t^2$, de forma que:

$$\frac{\partial T_{ij}}{\partial x_j} + f_i = \rho \frac{d^2 u_i}{dt^2} \tag{2.4.2}$$

Combinando as equações 2.4.2 e 2.1.18, a segunda lei de Newton pode ser escrita em termos de tensor de deformação (considerando nenhuma força externa, ou seja, $f_i = 0$):

$$\rho \frac{d^2 u_i}{dt^2} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(c_{ijkl} S_{kl} \right) \tag{2.4.3}$$

Substituindo 2.1.11 em 2.4.3:

$$\rho \frac{d^2 u_i}{dt^2} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\frac{c_{ijkl}}{2} \left(\frac{\partial u_k}{\partial x_l} + \frac{\partial u_l}{\partial x_k} \right) \right] \tag{2.4.4}$$

De acordo com 2.1.20, os dois primeiros e os dois últimos índices de c_{ijkl} podem ser intercalados entre si sem que o tensor de rigidez se altere. Portanto:

$$c_{ijkl} \frac{\partial u_l}{\partial x_k} = c_{ijlk} \frac{\partial u_l}{\partial x_k} = c_{ijkl} \frac{\partial u_k}{\partial x_l} \tag{2.4.5}$$

Consequentemente, reescrevemos a equação 2.4.4 como:

$$\rho \frac{d^2 u_i}{dt^2} = c_{ijkl} \frac{\partial^2 u_l}{\partial x_j \partial x_k} \tag{2.4.6}$$

Este conjunto de três equações tem a forma de uma equação de onda para cada coordenada espacial, descrevendo completamente o movimento acústico em sólidos. As condições de contorno, juntamente com as propriedades do sólido, determinam qual o modo de vibração da onda, dentre as quais se destacam as mostradas na figura 2.6.

2.4.2 Sólidos Piezoelétricos

Para adicionar o efeito piezoelétrico no modelo de propagação de ondas, deve-se substituir o tensor de tensão T_{ij} da equação 2.2.5 na equação 2.4.2 (com $f_i = 0$), resultando em:

$$\rho \frac{d^2 u_i}{dt^2} = \frac{\partial T_{ij}}{\partial x_j} = \frac{\partial \left(c^E_{ijkl} S_{kl} \right)}{\partial x_j} - \frac{\partial \left(d_{kij} E_k \right)}{\partial x_j} \tag{2.4.7}$$

Assumindo que as propriedades dos materiais são espacialmente constantes, temos:

$$\rho \frac{d^2 u_i}{dt^2} = c^E_{ijkl} \frac{\partial^2 u_l}{\partial x_j \partial x_k} - d_{kij} \frac{\partial E_k}{\partial x_j} \tag{2.4.8}$$

A definição do campo elétrico é o negativo do gradiente do potencial piezoelétrico ϕ, ou seja:

$$E_k = - \left(\frac{\partial \phi}{\partial x_k} \right) \tag{2.4.9}$$

Em vista disso, a equação 2.4.8 se torna:

$$\rho \frac{d^2 u_i}{dt^2} = c^E_{ijkl} \frac{\partial^2 u_l}{\partial x_j \partial x_k} + d_{kij} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_j^2} \tag{2.4.10}$$

A relação encontrada acima é a equação de onda para sólidos piezoelétricos, que explica o movimento acústico dentro de um sólido piezoelétrico com a presença do potencial piezoelétrico. Destacamos que, dentre o conjunto de soluções dessa equação, encontra-se a forma particular de ondas Rayleigh. Essas afirmações significam que as ondas acústicas desse modo específico podem ser geradas por eletricidade, e a maneira com que isso é feito será apresentada mais a frente.

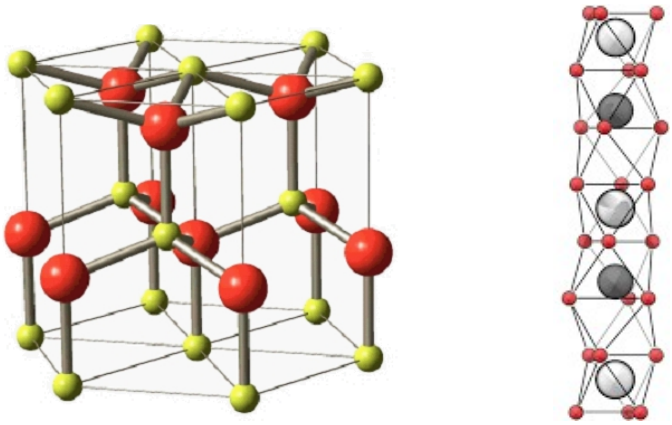
2.5 Materiais Piezoelétricos

Os materiais piezoelétricos usados ao longo desse projeto são ZnO e $LiNbO_3$-128YZ. Aqui, vamos explicitar suas características.

2.5.1 Estrutura Cristalina

O ZnO tem uma estrutura atômica hexagonal de wurtzita, como mostrado na figura 2.8a. É composto por dois parâmetros de rede, $a = 3,2498$ Å e $c = 5,2066$ Å [62]. No caso do $LiNbO_3$, a estrutura atômica é trigonal, como mostra a figura 2.8b, com parâmetros de rede $a = 5,148$ Å e

$c = 13,863$ Å [63].



(a) (b)

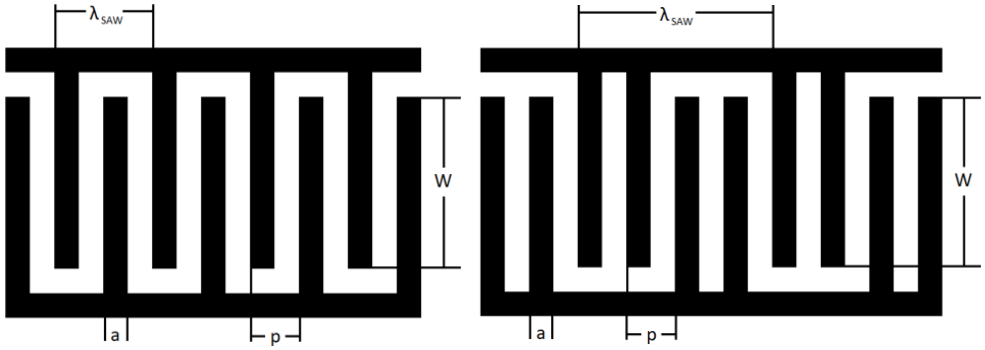
Figura 2.8: (a) Estrutura hexagonal de wurtzita do zinco, com as esferas vermelhas representando o zinco (Zn) e as esferas amarelas o oxigênio (O). Adaptado de [64]. (b) Estrutura trigonal do $LiNbO_3$, com as esferas vermelhas representando o oxigênio, cinza-escuro o lítio (Li) e cinza-claro o nióbio (Nb). Adaptado de [65].

2.6 Geração de Ondas Acústicas de Superfície

Para entender como é possível gerar as SAW, devemos relembrar o efeito inverso da piezoeletricidade, o qual atesta que um material piezoelétrico sob a presença de um campo elétrico se deforma mecanicamente. Consequentemente, obtém-se tal efeito excitando eletricamente o sólido através da inserção de um eletrodo, chamado transdutor interdigital (do inglês *Interdigital Transducer - IDT*), em um substrato piezoelétrico plano, submetendo-o a um sinal elétrico alternado. O conjunto de substrato piezoelétrico com o IDT constitui o chamado dispositivo de ondas acústicas de superfície.

2.6.1 Transdutor Interdigital (IDT)

O IDT é formado por dois eletrodos em forma de pente com sulcos intercalados, um responsável por receber um sinal de radiofrequência (RF) e outro para ser aterrado. A figura 2.9 mostra o esquema desse componente juntamente com suas dimensões características, sendo responsáveis por determinar as propriedades físicas do dispositivo SAW. Nos casos estudados neste trabalho, as partes importantes são os sulcos, que são chamados de dedos, cuja largura é denotada por a, e seu comprimento denota a abertura dos dedos W e o comprimento total do IDT, dado por L [54].



(a) (b)

Figura 2.9: As figuras mostram os IDTs mais comuns com suas dimensões características, com a representando a largura de um dedo (assim como o espaçamento entre os dedos), p o passo (ou seja, a largura de um dedo e um espaço), λ_{SAW} o comprimento de onda gerado e W a abertura, que determina a largura do feixe de onda. (a) IDT de dedos simples, produzindo um comprimento de onda $\lambda_{SAW} = 4a$. (b) IDT de dedos duplos, produzindo um comprimento de onda $\lambda_{SAW} = 8a$.

A figura 2.9a representa um IDT de dedo simples (do inglês *single-finger - SF*), cujos dedos são intercalados com periodicidade de um a um. Por outro lado, a figura 2.9b mostra um IDT de dedos duplos (do inglês *double-finger - DF*), com intercalação de periodicidade de dois a dois. O elemento de repetição especifica o comprimento de onda gerado porque, idealmente, o eletrodo submetido ao potencial elétrico de radiofrequência V_{rf} deforma o substrato abaixo dele, variando suavemente entre cristas e vales (ou vice-versa), enquanto o eletrodo aterrado também varia em cristas e vales, mas sem deformar o substrato abaixo dele. Isso é mostrado na figura 2.10 na configuração da onda no modelo SF, onde pode-se notar que o comprimento de onda é dado por $\lambda_{SAW} = 4a$. Para o DF, as cristas e vales variam com a periodicidade de 2 em 2 IDTs, o que faz o comprimento de onda ser $\lambda_{SAW} = 8a$.

Então, o substrato propaga as ondas mecânicas de deformação, cuja ressonância ocorre na frequência $f_{SAW} = \lambda_{SAW} \times v_{SAW}$, onde v_{SAW} é a velocidade da onda SAW, que é uma característica do material piezoelétrico, idealmente imutável. Pequenas variações ocorrem devido ao peso que o IDT exerce no substrato, e elas serão discutidas no próximo capítulo. Então, definimos a tensão de entrada como $V_{rf} = V_{rf}(f = f_{SAW})$.

2.7 Método dos Elementos Finitos

Equações diferencias parciais (EDP) são muito importantes para a descrição de diversos fenômenos físicos, como a equação de onda [66], transporte de calor [67], equações de Maxwell [68],

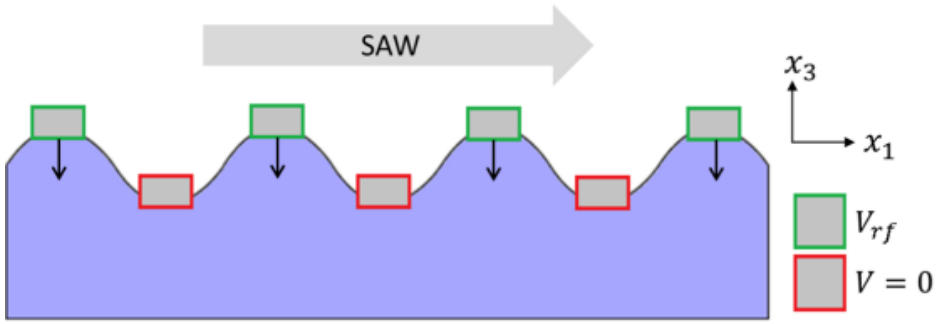


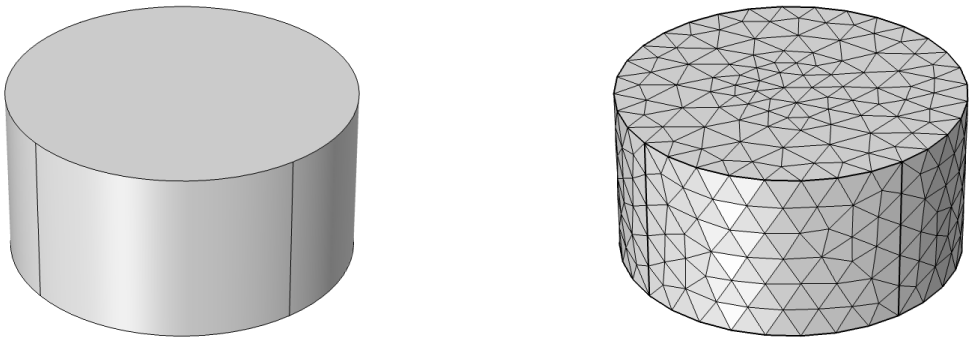
Figura 2.10: Na presença de um potencial de radiofrequência, V_{RF}, nos IDTs, há a ocorrência de deformações no substrato pelo efeito inverso da piezoeletricidade, causando as ondas acústicas com seu comprimento de onda representado na figura. Para $V_{RF} = V_{RF}(f = f_{SAW})$, os eletrodos oscilam entre cristas e vales, formando as ondas acústicas de superfície que se propagam na direção x_1. Imagem retirada de [55].

equação de Schrödinger [69], entre outras.

Em equações diferenciais de qualquer tipo, incluindo as equações diferenciais ordinárias (EDO), se houver uma solução qualquer que satisfaça a equação e as condições de contorno, então essa é a solução. Para as EDPs lineares com parâmetros de espaço e tempo, um teste de solução é tal que essa possa ser decomposta em um produto de termos que dependem de apenas um parâmetro. Esse é o chamado método de separação de variáveis. Com esse método, é possível reduzir o grau de uma EDP, inclusive ao ponto de se encontrar um sistema de EDOs, com apenas uma variável a equação de cada um dos parâmetros [70].

No trabalho de E. Su li. *Lecture Notes on Finite Element Methods for Partial Differential Equations* [71], pontuou-se que as EDPs são amplamente utilizadas para descrever fenômenos físicos, químicos e biológicos, envolvendo diversas áreas do conhecimento, variando de mecânica dos fluidos e eletromagnetismo até modelagem financeira. Essas expressões determinam o efeito que uma variação pequena em uma variável dependente produz em uma variável independente (x, y, z, t). Muitas das soluções dessas equações são difíceis, impraticáveis ou até mesmo impossíveis de serem encontradas de forma analítica, seja como uma série de potências ou até mesmo após aplicar os métodos da transformada de Laplace e Fourier.

Para contornar esse problema, lança-se mão do uso de aproximações numéricas para a solução analítica desconhecida, como o método dos elementos finitos (FEM, do inglês *Finite Element Method*), que consiste em um conjunto de abordagens numéricas que aproximam a solução de equações diferenciais parciais. Leonard Euler em 1748 descreveu os fundamentos matemáticos do (FEM) no livro *Introduction to the Analysis of the Infinite* [72]. Contudo, as ferramentas que foram produzidas eram bastante complexas de se aplicar, e foi somente com o aparecimento de



(a) (b)

Figura 2.11: (a) Cilindro sem discretização em elementos finitos. (b) Cilindro em que sua geometria foi reformulada através da divisão em elementos finitos na forma de tetraedros.

computadores na segunda metade do século XX que o método se tornou viável e passou a ganhar visibilidade. Milos Zlámal criou as primeiras sistematizações significativas desse método em 1968 [73].

Para essa dissertação, há um método em que a solução numérica que discretiza a geometria da simulação em vários pequenos elementos, chamados elementos finitos. Como exemplo, há a Figura 2.11, em que um cilindro, inicialmente sem divisão na geometria (figura 2.11a), foi dividido em vários tetraedros (figura 2.11b), cuja solução numérica da EDP que descreve um comportamento físico é feita para cada um deles. Dessa forma, a solução encontrada nos mesmos servem como condição de contorno para a solução da EDP nos prismas adjacentes. Tal cálculo é feito em todos os prismas do objeto até que seja encontrada em toda a geometria.

Para esses cálculos numéricos, o software COMSOL Multiphysics [74], uma ferramenta de simulação integrada que resolve problemas de física usando computacionalmente a técnica de elementos finitos (FEM) [75], que emprega o método de fatoração de matrizes, os quais produzem soluções numéricas para equações físicas em cada um desses elementos finitos. Quanto mais elementos, melhor a convergência de dados. Ao longo desse projeto, os resultados das simulações serão encontrados com o auxílio desse software.

2.7.1 Constantes Elásticas e Piezoelétricas

O COMSOL possui uma biblioteca que contém informações sobre diferentes materiais, incluindo os tensores piezoelétricos, de *strain* e de permissividade elétrica para o ZnO, que são dados por:

$$\mathbf{d} = \begin{bmatrix} 0,0 & 0,0 & -0,567005 \\ 0,0 & 0,0 & -0,567005 \\ -0,567005 & 1,32044 & 1,32044 \\ 0,0 & -0,480508 & 0,0 \\ -0,480508 & 0,0 & 0,0 \\ -0,480508 & 0,0 & 0,0 \end{bmatrix} (C/m^2) \tag{2.7.1}$$

$$\mathbf{S} = \begin{bmatrix} 2,09714 & 1,2114 & 1,05359 & 0,0 & 0,0 & 0,0 \\ 1,2114 & 2,09714 & 1,05359 & 0,0 & 0,0 & 0,0 \\ 1,05359 & 1,05359 & 2,11194 & 0,0 & 0.0 & 0,0 \\ 0,0 & 0,0 & 0,0 & 0,423729 & 0.0 & 0,0 \\ 0,0 & 0.0 & 0.0 & 0.0 & 0,423729 & 0,0 \\ 0,0 & 0,0 & 0,0 & 0,0 & 0,0 & 0,442478 \end{bmatrix} \times 10^{11} \tag{2.7.2}$$

$$\epsilon = \begin{bmatrix} 8,5446 & 0 & 0 \\ 0 & 8,5446 & \\ 0 & 0 & 10,204 \end{bmatrix} \tag{2.7.3}$$

No caso do $LiNbO_3$, embora a biblioteca forneça os tensores necessários, ela não contempla os valores para a rotação de 128^o. Então foi feita uma inserção manual das componentes, em que duas situações foram analisadas.

A primeira analisa o fato que o $LiNbO_3 - 128Y$ é um substrato de $LiNbO_3$ após uma rotação de 128^o ao redor do seu eixo x de maneira que os tensores são dados pela multiplicação das matrizes pela matriz de rotação com ângulos de Euler (0^o, 38^o, 0^o), transformando os elementos em [76]:

$$\mathbf{d} = \begin{bmatrix} 0,0 & -1,85 & 1,692 \\ 0,0 & 4,44 & -2,672 \\ 0,0 & -1,544 & 2,232 \\ 0,0 & 0,091 & 0,604 \\ 4,445 & 0,0 & 0,0 \\ 0,297 & 0,0 & 0,0 \end{bmatrix} (C/m^2) \tag{2.7.4}$$

$$\mathbf{S} = \begin{bmatrix} 2,03 & 0,7 & 0,58 & 0,13 & 0,0 & 0,0 \\ 0,7 & 1,94 & 0,91 & 0,09 & 0,0 & 0,0 \\ 0,58 & 0,75 & 2,45 & 0,086 & 0,0 & 0,0 \\ 10,13 & -0,09 & 0,086 & 0,758 & 0,0 & 0,0 \\ 0,0 & 0,0 & 0,0 & 0,0 & 0,569 & -0,05 \\ 0,0 & 0,0 & 0,0 & 0,0 & -0,05 & 0,781 \end{bmatrix} \times 10^{11} \tag{2.7.5}$$

$$\epsilon = \begin{bmatrix} 44 & 0 & 0 \\ 0 & 38,75 & -7,27 \\ 0 & -7,27 & 34,65 \end{bmatrix} \tag{2.7.6}$$

Por outro lado, como será visto no próximo capítulo, os valores que mais se adequaram com os resultados experimentais realizados com o dispositivo físico são dados pela referência [77]:

$$\mathbf{d} = \begin{bmatrix} 0,0 & -2,5 & 0,23 \\ 0,0 & 2,5 & 0,23 \\ 0,0 & 0 & 1,33 \\ 0,0 & 3,7 & 0,0 \\ 3,7 & 0,0 & 0,0 \\ -2,5 & 0,0 & 0,0 \end{bmatrix} (C/m^2) \tag{2.7.7}$$

$$\mathbf{S} = \begin{bmatrix} 2,03 & 0,573 & 0,752 & 0,085 & 0,0 & 0,0 \\ 0,573 & 2,03 & 0,91 & -0,085 & 0,0 & 0,0 \\ 0,752 & 0,752 & 2,424 & 0,0 & 0,0 & 0,0 \\ 0,085 & -0,085 & 0,086 & 0,758 & 0,0 & 0,0 \\ 0,0 & 0,0 & 0,0 & 0,0 & 0,595 & 0,085 \\ 0,0 & 0,0 & 0,0 & 0,0 & 0,085 & 0,7285 \end{bmatrix} \times 10^{11} \tag{2.7.8}$$

$$\epsilon = \begin{bmatrix} 85,2 & 0 & 0 \\ 0 & 28,7 & 0 \\ 0 & 0 & 28,7 \end{bmatrix} \tag{2.7.9}$$

2.8 Parâmetros S

Os parâmetros-S (*Scattering Parameters*) descrevem o efeito que estímulos de sinal elétrico produzem em redes elétricas lineares no estado estacionário, ou seja, o estado em um dado instante

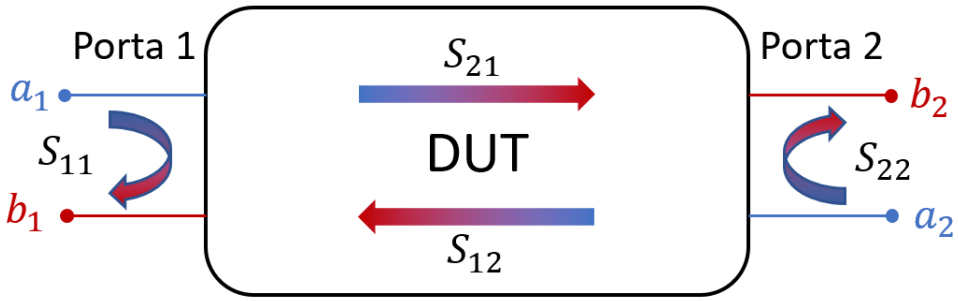


Figura 2.12: Representação da medição dos parâmetros S, em que DUT é o dispositivo sob teste (*Device Under Test*), a_1 e a_2 representam o sinal entrando pela porta 1 e 2 respectivamente, assim como b_1 e b_2 o sinal saindo por essas mesmas portas. Dessa forma S_{11} é o parâmetro que descreve a reflexão do sinal que entrou pela porta 1 e saiu pelo mesmo local e S_{12} é a transmissão de sinal que entrou pela porta 1 e foi medido na porta 2. O mesmo raciocínio vale para os parâmetros S_{22} e S_{21}.

de tempo. Em dispositivos de duas portas, esses parâmetros quantificam a transmissão e reflexão do sinal de radiofrequência. A figura 2.12, mostra uma representação da utilização dos parâmetros S, em que há a presença de dois tipos de sinais, a_i (sinais incidentes) e b_i (sinais refletidos), com o prefixo i indicando em qual medida de sinal foi feita na porta. Seus valores são calculados através da fórmula [78]:

$$a_i = \frac{V_i + I_i Z_0}{2\sqrt{|Re(Z_0)|}} \tag{2.8.1a}$$

$$b_i = \frac{V_i - I_i Z_0}{2\sqrt{|Re(Z_0)|}} \tag{2.8.1b}$$

em que V_i e I_i são, respectivamente, o potencial elétrico e a corrente elétrica que passam pela i-ésima porta, com i variando entre 1 e 2, e Z_0 é uma impedância complexa padrão. Quando o valor para Z_0 coincidir com 50 Ω, é dito que houve casamento de impedância entre a linha de atraso e os instrumentos de medição, cuja configuração entrega uma maior eficiência para o dispositivo [79]. Mas isso não ocorre em todas as situações, pois o processo de fabricação não é padronizado e pode surgir defeitos mesmo com o projeto do dispositivo feito para ter exatamente essa impedância.

A figura ainda mostra os parâmetros S_{ij}, que são justamente os parâmetros S. Aqui, é indicado a parcela de sinal da porta a_i para a porta b_j, com i e j variando entre 1 e 2. Dessa forma, os termos S_{11} e S_{22} são os termos de reflexão do sinal que entram na porta 1 e 2, respectivamente, enquanto os termos S_{12} e S_{21} são os termos de transmissão de sinal, o primeiro que entra na porta 2 e é medido na porta 1 e o segundo é o que entra pela porta 1 e é medido na porta 2.

Escrevemos os sinais de saída b_i como uma combinação linear dos sinais de entrada a_j:

$$b_1 = S_{11}a_1 + S_{12}a_2 \tag{2.8.2a}$$
$$b_2 = S_{21}a_1 + S_{22}a_2 \tag{2.8.2b}$$

De forma que define-se os parâmetros S como:

$$S_{11} = \left.\frac{b_1}{a_1}\right|_{a_2=0} \tag{2.8.3a}$$
$$S_{12} = \left.\frac{b_1}{a_2}\right|_{a_1=0} \tag{2.8.3b}$$
$$S_{21} = \left.\frac{b_2}{a_1}\right|_{a_2=0} \tag{2.8.3c}$$
$$S_{22} = \left.\frac{b_2}{a_2}\right|_{a_1=0} \tag{2.8.3d}$$
$$\tag{2.8.3e}$$

De forma matricial, os parâmetros b_i e a_j se conectam como:

$$\mathbf{b} = \mathbf{S}\mathbf{a} \tag{2.8.4}$$

em que são definidos os vetores $\mathbf{b} = (b_1, b_2)$ e $\mathbf{a} = (a_1, a_2)$, com a matriz $\mathbf{S}$ escrita como [80]:

$$\mathbf{S} = \begin{bmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{bmatrix} \tag{2.8.5}$$

Um exemplo é o termo de reflexão S_{11} da equação que, em termos da impedância Z_0, se expressa como:

$$S_{11} = \left.\frac{b_1}{a_1}\right|_{a_2=0} = \frac{V_1 - I_1 Z_0|_{a_2=0}}{V_1 + I_1 Z_0|_{a_2=0}} \tag{2.8.6}$$

Para que a_2 seja zero, a condição é, de acordo com a equação 2.8.1b:

$$Z_0|_{a_2=0} = -\frac{V_2}{I_2} \tag{2.8.7}$$

As medidas dos parâmetros S são feitas com um analisador de rede, e sua operação será

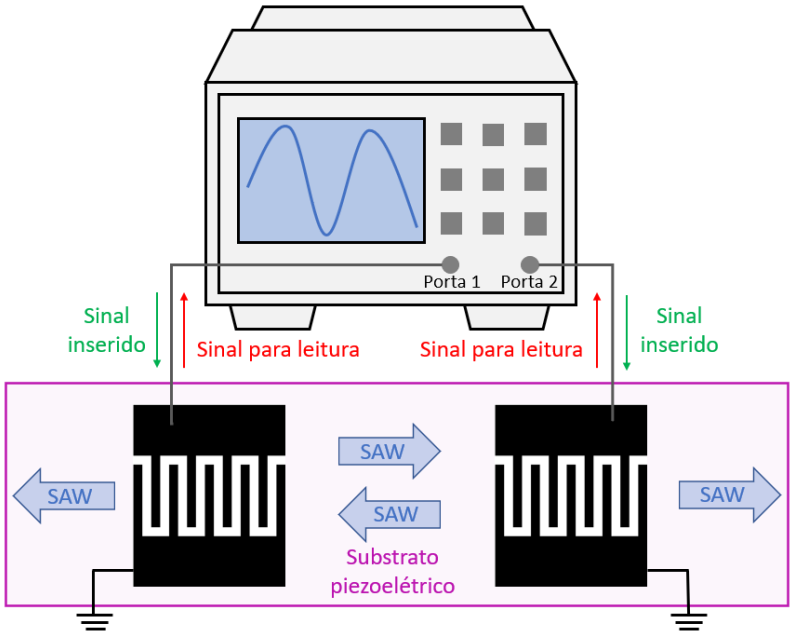


Figura 2.13: Analisador de rede, que envia o sinal pelas portas 1 e 2 e mede simultaneamente o sinal recebido nessas mesmas portas, obtendo os parâmetros S.

explicada na próxima seção.

2.8.1 Analisador de Rede

Os parâmetros S são medidos com o analisador de rede retorna, o qual aplica um sinal eletromagnético e efetua a leitura de maneira simultânea através de uma mesma porta. A figura 2.13 representa o *setup* experimental. De acordo com o exposto, a porta 1 produz um sinal a_1 que atinge o IDT localizado à esquerda, gerando SAW em duas direções: uma parcela que se perde para a borda do dispositivo, por isso há uma perda intrínseca de 50% do sinal, e a outra que se propaga para o IDT da direita. Como a deformação do substrato piezoelétrico produz sinal elétrico, o IDT da direita é excitado eletricamente ao passo que as SAW o atingem e, nesse momento, a porta 2 lê o sinal b_2 recebido pelo IDT da direita. Ademais, essa excitação produz novamente SAW que se propaga em ambas as direções do IDT da direita, de maneira que uma parcela atinge o IDT da esquerda, excitando-o eletricamente, e esse sinal b_1 é medido pela porta 1. Com essas informações, o instrumento calcula os parâmetros S conforme mostrado anteriormente.

2.9 Dispositivo de Ondas Acústicas de Superfície de ZnO/Si

O ZnO é um ótimo meio de propagação de ondas mecânicas, pois apresenta uma alta piezoeletricidade na direção cristalina [002] [81]). Ao depositar esse material em um substrato plano não piezoelétrico (silício com direção preferencial c [001]), obtém-se intensificação da propagação das ondas. Embora não fosse possível fabricar o dispositivo, apresentaremos a seguir os resultados obtidos nas tentativas, destacando a caracterização em cada etapa.

2.9.1 Deposição de ZnO

O crescimento do filme fino de ZnO no *wafer* de silício foi realizado com o auxílio do equipamento *Beneq TFS 200* do Laboratório de Pesquisa Fotovoltaica da Unicamp. O processo operado pelo aparelho é chamado de *Atomic Layer Deposition* (ALD), o qual é ditado por uma reação química de precursores dentro de um reator que resulta na deposição de um dos produtos da reação. Os precursores do ZnO são $Zn(CH_3)_2$ (Dietil Zinco - DEZn) e água, conforme mostrado no processo químico abaixo:

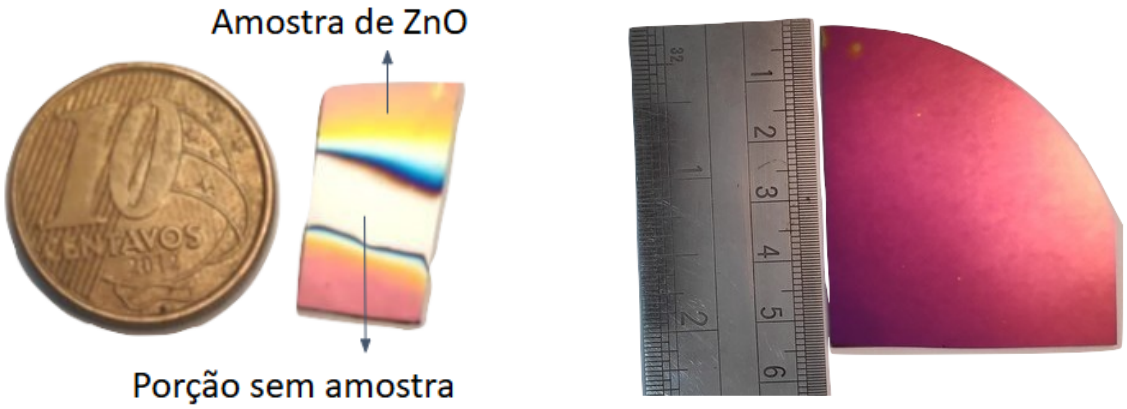
$$Zn(CH_3)_2 + H_2O \rightarrow ZnO + CH_{4(g)} \tag{2.9.1}$$

O Grupo de Propriedades Ópticas (GPO) da Unicamp já havia testado o aparelho anteriormente [82]. Foram testadas a influência da alteração de parâmetros específicos nas características do filme fino em termos da taxa de cristais de ZnO com orientação cristalográfica preferencial na direção [002], sendo essa a orientação que confere o efeito reverso da piezoeletricidade. Também fazem parte dessas características a taxa de deposição por ciclo e espessura do filme. Os parâmetros críticos, que são calibrados pela máquina, são:

- tempo de pulso: cada precursor é injetado constantemente no reator por uma quantidade específica de tempo, sendo que quanto maior o tempo, mais conteúdo é fornecido. Para ambos os precursores, foi determinado um tempo de 500ms.

- tempo de purga: a purga é uma etapa intermediária entre os pulsos do precursor que se refere ao momento em que N_2 ou Ar é injetado no reator para eliminar o excesso de precursores, além do momento em que cada precursor reage com o substrato, formando uma monocamada, antes de interagir uns com os outros. O DEZn foi colhido em 2s e a água em 3s.

- temperatura: controla a velocidade da reação e o equilíbrio químico, e foi mantida a 200°C dentro do reator.



(a) (b)

Figura 2.14: (a) Deposição de filme fino de ZnO, em que havia um pedaço de fita *kapton* na parte em que não há material depositado, para medir a espessura com um perfilômetro (b) Deposição de filme fino de ZnO em um substrato de silício de maior dimensão, utilizando a mesma receita.

Esse ciclo demonstrado nos itens anteriores, que é responsável por depositar uma monocamada, foi repetido 1000 vezes. A figura 2.14 mostra fotografias do produto final desta técnica. Devido à alocação anterior de uma fita *kapton*, o *waffer* da figura 2.14a possui uma lacuna sem material depositado.

Quando a luz incide sobre essas estruturas, ocorre reflexão e interferência entre as ondas luminosas transmitidas e refletidas pela superfície e substrato do filme. Esse processo, modulado pela espessura do filme, resulta em interferogramas que produzem cores distintas. Condições de interferência construtiva ocorrem quando as ondas luminosas estão em fase, intensificando a coloração percebida. A variação da espessura do filme, portanto, permite um controle preciso sobre as condições de interferência, resultando em uma ampla gama de cores visíveis. Esse fenômeno é essencial em aplicações tecnológicas, como dispositivos ópticos e eletrônicos, e também tem implicações estéticas significativas em contextos artísticos e de design.

A caracterização foi realizada em três instalações na UNICAMP: as primeiras etapas foram feitas no Lamult (Laboratório Multiusuários da Física), no qual as medições de perfilometria foram executadas, outra foi no CCS (Centro de Componentes Semicondutores da Unicamp) com a técnica de elipsometria e também, com o auxílio do Prof. Dr. Christoph Deneke, houve mais uma caracterização por difração de raios-X rasante no LMBT com a técnica $\theta - 2\theta$. Temos como objetivo determinar a espessura, o índice de refração e a orientação preferencial dos cristalitos que compõem o filme fino de ZnO.

Iniciamos com as medições de perfilometria. A ausência de material depositado no local em que a fita *kapton* foi alocada, assim como é retratado na parte prateada na imagem 2.14a (ou seja, em

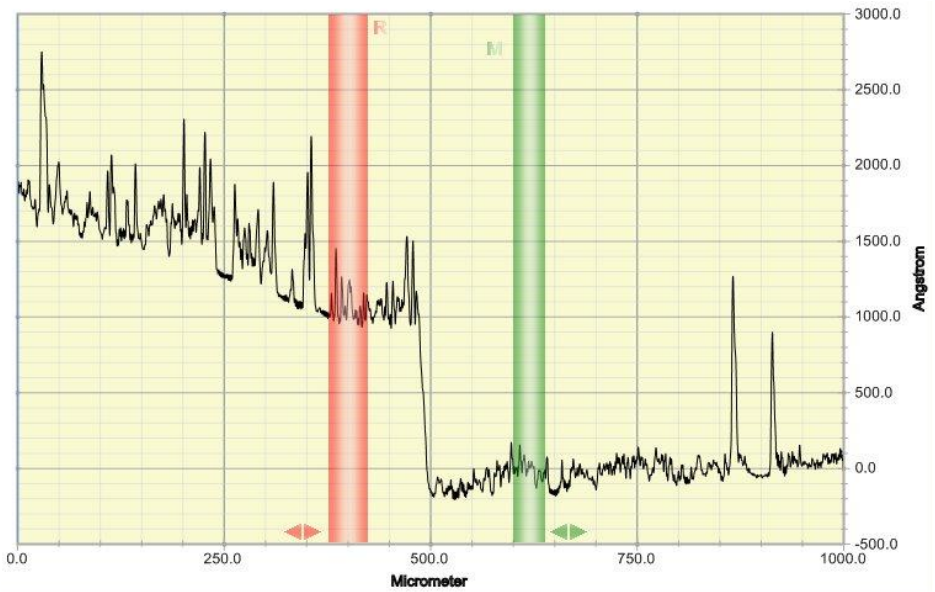


Figura 2.15: Imagens obtidas por perfilometria da amostra da figura 2.14a, em que foi possível estimar a espessura do filme fino em cerca de (190 ± 10) nm.

que o substrato de silício está a amostra), permite que a espessura seja medida por perfilometria ao se registrar a diferença de altura dos dados topológicos da região com ZnO em comparação com a região em que o silício está aparecendo. A figura 2.15 apresenta os dados coletados nesse exame, a partir do qual se estima que a espessura do filme fino está em torno de 190 nm. É importante notar que na imagem 2.14a, a presença da fita *kapton* provocou a deposição de uma quantidade menor de material em suas adjacências, assim como é indicado pela a mudança de cor. Logo, para uma medição correta da altura do filme fino, a varredura da agulha inicia-se a partir do local em que a tonalidade permanece consistente. Levando em consideração esse impacto, designamos esse ponto como $x = 0$, indicando a localização da amostra onde o perfilômetro inicia a varredura.

A caracterização por difração de raios-X rasante é bastante importante em filmes finos, pois com ela pode-se estimar a porcentagem de cristalitos orientados na direção preferencial que produz a piezoeletricidade. Além disso, com o equipamento cedido pelo Prof. Dr. Christoph Deneke, a espessura do filme fino também foi possível de ser medida. Realizamos as medidas de difração de raios-X da amostra da figura 2.14b. A varredura foi feita no intervalo $30° \leqslant 2\theta \leqslant 40°$, com um tempo de passo de 0,01s e tempo de integração de 10s.

As curvas do gráfico presente na figura 2.16, originadas com o auxílio do Python, mostram o resultado da difratometria de raios-X incidentes sobre a amostra, em que a figura 2.16a possui as medidas em toda a faixa de ângulos medidos. Já na figura 2.16b, os valores na faixa $32,795° \leqslant 2\theta \leqslant 33,5°$ foram excluídos, pois se tratava de um pico produzidos pelo substrato de

silício (ou seja, não traz informação relevante para o estudo da piezoeletricidade) de intensidade consideravelmente maior que os picos da curva de ZnO, a ponto de retirar os picos importantes da escala visível. A partir da curva, estimamos a porcentagem de cristais orientados na direção que produz piezoeletricidade (c[002]). Isso é feito aproximando os picos por curvas gaussianas e encontrando a razão entre a área sob a curva referente à orientação (002) (em $2\theta \approx 34{,}5°$) em relação à área total sob as duas curvas, sendo que a primeira curva, em torno de $2\theta \approx 31{,}8°$, se refere à orientação (001). Ainda há um pico de intensidade relacionada a direção cristalina (101), que foi ignorado nos cálculos devido à sua pequena magnitude. Os resultados encontrados para as áreas foram $A_1 \approx 31,5$ (para o pico (100)) e $A_2 \approx 36,1$ (para o pico (002)), resultando em uma razão $A_2/(A_1 + A_2) \approx 53,4\%$.

O tamanho médio do cristalito em materiais cristalinos é estimado pela equação de Scherrer a partir de dados obtidos por difração de raios-X. A expressão matemática da equação é [83]:

$$D = \frac{K\lambda}{\beta cos\theta} \tag{2.9.2}$$

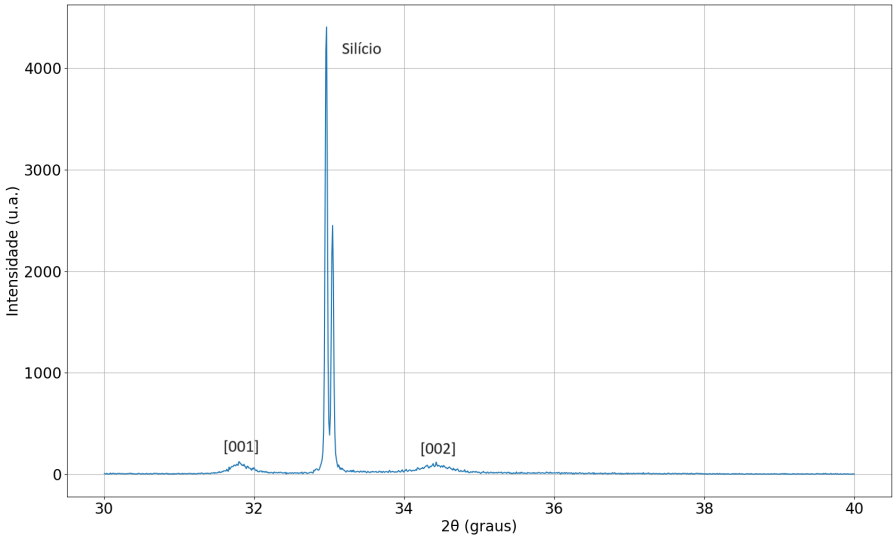
em que D é o tamanho médio dos cristalitos, $K = 0{,}9$ é uma constante de forma cujo valor adotado considera a condição de contorno que os cristalitos sejam esféricos, λ é o comprimento de onda dos raios-X incidentes, β é a largura a meia altura do pico de difração (em radianos) e θ é o ângulo de Bragg, sendo a metade do valor medido de 2θ.

Para a orientação [001], foi encontrado um tamanho médio de cerca de $24,5nm$ e para a orientação [002], $16,5nm$. Com esses tamanhos, a técnica de raios-X rasantes são recomendadas pois ela é sensível às camadas superficiais e aos filmes finos devido ao ângulo de incidência rasante, que limita a penetração dos raios-X na amostra [84, 85].

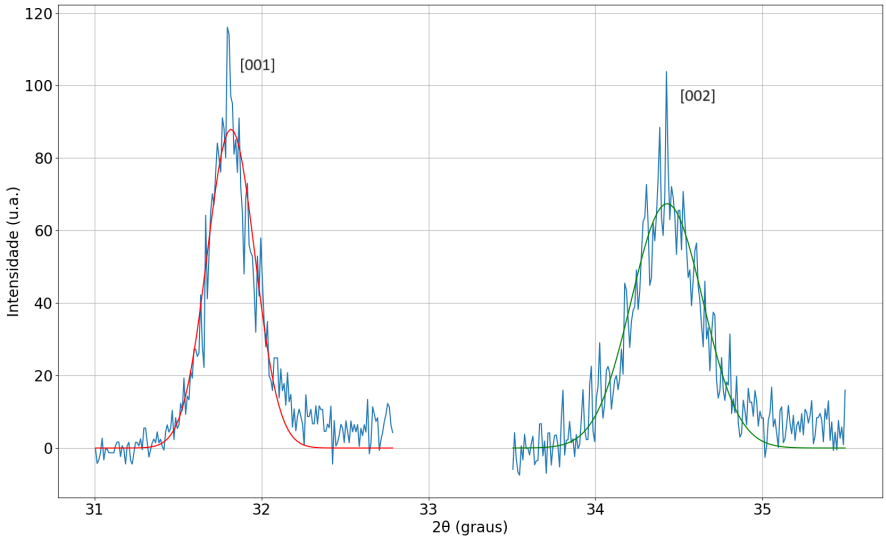
Outra maneira de se medir a espessura do filme fino da figura 2.14b, assim como seu índice de refração, se dá com a técnica da elipsometria, cujo equipamento utilizado está no CCS. Essa técnica mede o valor de dois coeficientes, Δ e Ψ, de forma indireta e não destrutiva. O resultado é encontrado através de cálculos numéricos performados pelo software *DAFIBM*. Os parâmetros de entrada incluem ambos os coeficientes e são acrescidos valores iniciais para o índice de refração e espessura do filme fino de forma que o software tenta convergir os valores em torno desses parâmetros iniciais para fornecer a resposta da medição.

O equipamento exige uma calibração inicialmente para um material cujos valores de Δ e Ψ são previamente conhecidos. Para tanto, a medição dos valores de uma amostra de nitreto de silício auxiliou nessa metodologia com a inserção de seus valores $\Delta = 81,08$ e $\Psi = 51,32$.

Após a calibração, mediu-se sobre a amostra de ZnO os valores $\Delta = 153,60$ e $\Psi = 11,60$, correspondendo um valor de espessura em torno de (200 ± 2) nm com o cálculo numérico efetuado



(a)



(b)

Figura 2.16: Gráfico da difração de raios-x, em que estão destacados os picos relacionado às orientações cristalinas [001], [002] do ZnO e o pico relacionado ao silício. (a) Resultados originais e (b) resultados sem o pico referente ao silício e com a curva Gaussiana vermelha ajustada para o pico [001] e verde para o pico [002] do ZnO ajustadas.

pelo software. Esse valor está de acordo com a variação de altura do filme fino feito por perfilometria na amostra da figura 2.14a. No entanto, a computação não forneceu convergência adequada para o índice de refração do ZnO, devido ao fato que o ZnO é um material muito absorvedor.

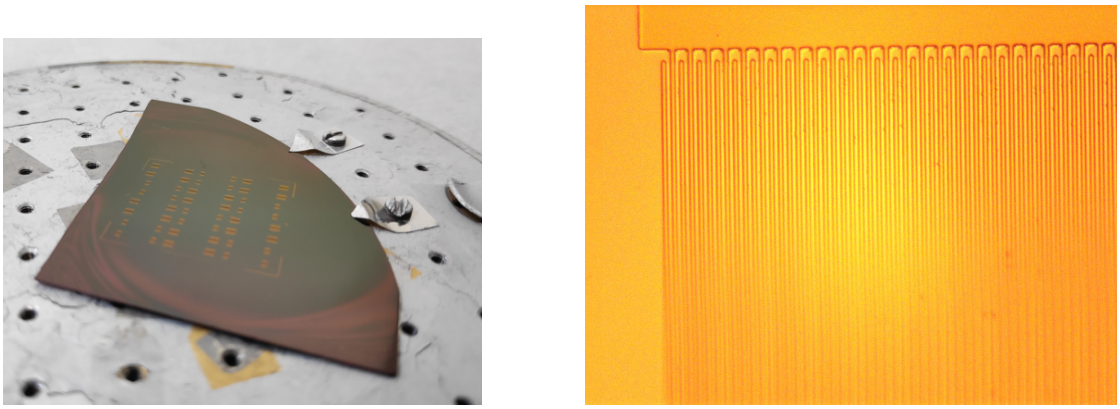
2.9.2 Transdutor Interdigital

A deposição de material piezoelétrico sobre o *wafer* de silício e sua caracterização representam a fabricação e análise do substrato piezoelétrico que deve ser responsável pela propagação das ondas acústicas de superfície. Para dar continuidade no desenvolvimento do dispositivo completo, os eletrodos de material condutor, nesse caso feito de alumínio, são depositados via revelação litográfica sobre o substrato ZnO/Si. A máscara litográfica foi fornecida pelo GPO (Grupo de Propriedades Ópticas), a qual possui 24 pares de IDTs de dedo simples (fig. 2.9a) para produzir SAW de $\lambda_{SAW} = 8\ \mu m$ de comprimento de onda e 24 pares de dedos duplos (fig. 2.9b) para ondas de $\lambda_{SAW} = 16\ \mu m$. Esses comprimentos de onda são originadas pelos dedos de largura de a = $\lambda_{SAW}/4 = 2\ \mu$m, assim como o espaço entre eles. A máquina usada nesse procedimento foi uma *Karl Suss Photoaligner* do tipo MJB3 tanto no CCS (onde os fotorresistentes AZ5206 e AZ5214 foram utilizados) quanto no Laboratório de Pesquisa em Dispositivos (LPD) do DFA (com o fotorresistente AZ5214).

Uma litográfica de boa qualidade com a máscara utilizada possui como características o desenho das linhas de atraso bem definidas, contornos retos e sem linhas quebradas. De todas a tentativas, a de melhor resultado, isto é, aquela em que as características expostas estão mais nítidas visualmente, foi feita no LPD sob a supervisão de Antônio von Zuben. A figura 2.17 demonstra o feito.

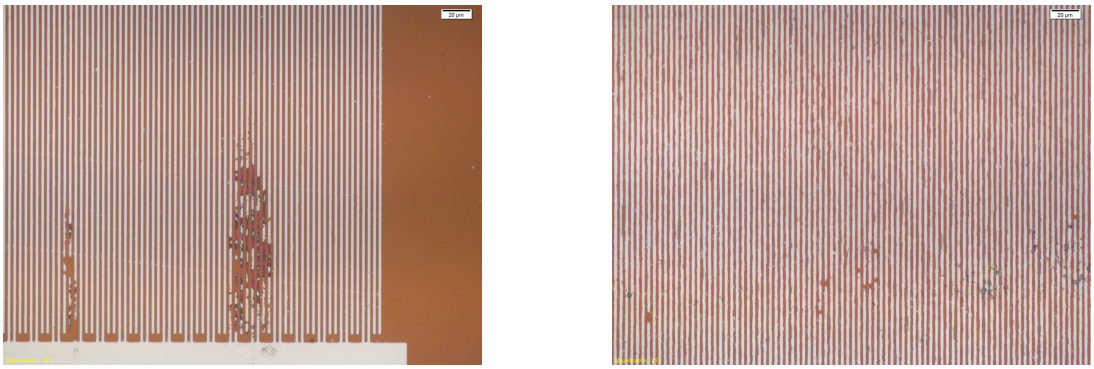
A receita seguida foi modificada em cada tentativa para estudar como cada etapa afetava o resultado final. Progressivamente a receita era adaptada de forma que a impressão se tornava visualmente melhor que a anterior. Com isso, otimiza-se a qualidade e a quantidade fabricada de dispositivos funcionais dentre todos os blocos contidos na máscara. Dentre as variáveis alteradas, inclui-se o fotorresistente empregado, o período de exposição à luz UV, o tempo de revelação e a substância reveladora. Em ambos os laboratórios, foi empregado o MIF300, com 1 parte de AZ400 diluída em 4 partes de água.

Após a etapa de revelação, prossegue-se com a metalização e *lift-off* dos IDTs para modelar o alumínio em cima do substrato piezoelétrico nos moldes apropriados dos IDTs. Essa etapa ocorreu no LPD, em que uma evaporadora e-beam formou uma camada de 100 nm de alumínio e todo o material foi submerso em acetona por 24 horas para dissolver o fotorresiste e retirar consequentemente o alumínio para fora da área não revelada pela litografia.



(a) (b)

Figura 2.17: (a) Foto do substrato de ZnO após a revelação litográfica. (b) Foto tirada no microscópio óptico com foco em um molde de IDT SF.



(a) (b)

Figura 2.18: Falhas comuns encontradas no processo de metalização. Em (a) encontram-se quebras de linha; em (b) linhas mal definidas e curto circuitos.

No entanto, não houve nenhum par de IDT funcional, já que todos os pares de IDT apresentavam falhas em pelo menos um de seus dispositivos. A metodologia de fabricação mostrou-se ineficiente e, a partir desse momento, foi necessário inclusive mudar os rumos da pesquisa. De qualquer forma, a imagem 2.18 demonstra algumas das falhas mais comuns, e foram obtidas combinando a câmera com um microscópio óptico, ampliando o dispositivo em 50×.

Os defeitos dos dispositivos refletiram nas medições de transmissão RF com o *Network Analyzer*. Na tentativa de medir o sinal de transmissão e reflexão, o contato elétrico do aparelho com o dispositivo deu-se com uma *Probe-Station* do CCS, a qual possui pontas de contato de tungstênio, e que entram em contato com o IDT do dispositivo para estabelecer conexão elétrica. Dentre os pares de dispositivos, havia alguns que apresentavam falhas que aparentemente não iriam invia-

bilizar totalmente as medições, mesmo que apresentassem distorções nas curvas e demonstrassem que o dispositivo não operasse corretamente, inclusive sendo improvável que a frequência ressonante pudesse ser vista. Os pares escolhidos não aparentavam curto-circuito. Mesmo com essas considerações, não houve nenhuma medida plausível, visto que a transferência de energia foi extremamente baixa, até mesmo nula. Não somente os defeitos do IDT constituem uma possível explicação, como também levantou-se a hipótese que, na deposição de ZnO, a espessura do filme fino foi insuficiente para a propagação das SAW.

2.10 Conclusão

Nesse capítulo, foi visto que as Leis de Newton, quando aplicadas utilizando o tensor de *stress* (da equação 2.2.5) como a modelagem das forças externas atuantes sobre o dispositivo de ondas acústicas de superfície, fornecem a equação de movimento na forma de uma equação diferencial parcial, conhecida como equação de onda. Dentre as soluções possíveis, as quais revelam diferentes modos de propagação de ondas, destaca-se um tipo específico denominado de Ondas Rayleigh, que se propagam pela superfície do material e decaem exponencialmente na direção da profundidade (aqui designada pela coordenada x_3). Esse modo de propagação modula o funcionamento do dispositivo de ondas acústicas de superfície, tornando claro a importância das constantes de piezoeletricidade e do tensor de *stiffness*.

O trabalho prosseguiu com a explicação da funcionalidade do dispositivo: através da equação de onda, materiais que o formam e geometria, o método para encontrar a solução da equação de onda pode ser efetuado numericamente com o Métodos dos Elementos Finitos. O próximo capítulo será de aplicação desse método e resultados encontrados com as simulações, sendo importante para prever o funcionamento do dispositivo e conseguir projetá-o corretamente de forma a torná-lo útil no desenvolvimento de tecnologias para o LFDQ.

Os materiais piezoelétricos estudados nessa pesquisa foram ZnO e $LiNbO_3$. O primeiro pode ser integrado na fabricação com as tecnologias disponíveis no IFGW, através da deposição de filme fino por ALD e sua caracterização com os equipamentos presentes no LAMULT e CCS. Esses procedimentos foram explorados ao longo do capítulo. Por outro lado, o $LiNbO_3$ é um material com bastante relatos na literatura, devido ao forte acoplamento piezoelétrico, e o estudo dele permite adquirir experiência visando a continuidade do trabalho que foi desenvolvido até o momento, ainda mais considerando que o LFDQ, atualmente, possui *waffers* de $LiNbO_3$ depositados sobre silício. O estudo da fabricação do dispositivo é importante para que o LFDQ possa usar o trabalho feito para os futuros projetos de integração de qubits supercondutores com os dispositivos SAW a partir

das tecnologias disponíveis no IFGW.

Capítulo 3

Resultados do dispositivo SAW

Nossas simulações foram realizadas utilizando o Método dos Elementos Finitos (FEM, do inglês *Finite Element Method*) [75] por meio do software COMSOL Multiphysics 5.5. [74] Este método tem se mostrado eficaz na análise da geração de ondas acústicas [55, 86, 87, 88, 76]. O software divide a geometria em subdomínios discretos chamados elementos e resolve a equação de onda em cada um desses elementos, aplicando condições de contorno apropriadas. A simulação com IDTs oferece a vantagem de possibilitar a caracterização do dispositivo SAW em termos de parâmetros S.

Realizamos simulações iniciais em uma célula unitária, que é uma estrutura básica que se repete indefinidamente. Isso demanda menos poder computacional devido ao tamanho reduzido em comparação com a *delay line*. Entretanto, essa abordagem fornece apenas o parâmetro de reflexão S_{11} e não considera alguns efeitos relacionados à geometria completa, como a interferência causada pela inserção do transdutor de saída.

Também conduzimos simulações com a linha de atraso. Ao introduzir o transdutor de saída na geometria, todos os parâmetros S podem ser calculados, uma vez que a estrutura permite medir tanto a parcela do sinal transmitido da entrada para o transdutor de saída quanto a reflexão.

Adicionalmente, investigamos os efeitos da adição de refletores Bragg. O principal propósito desses refletores é aumentar a parcela do sinal transmitido na frequência de ressonância pelo confinamento das ondas acústicas no dispositivo.

Vale observar que, embora o dispositivo real seja tridimensional, optamos por simular uma estrutura bidimensional. Isso se justifica pelo fato de que, como mencionado na seção 2.3, a onda Rayleigh está restrita ao plano x_1Ox_3. Além disso, um modelo completo em todas as dimensões exigiria um esforço computacional substancialmente maior, o que tornaria a simulação mais complexa. Mais detalhes sobre essa escolha serão apresentados na próxima seção.

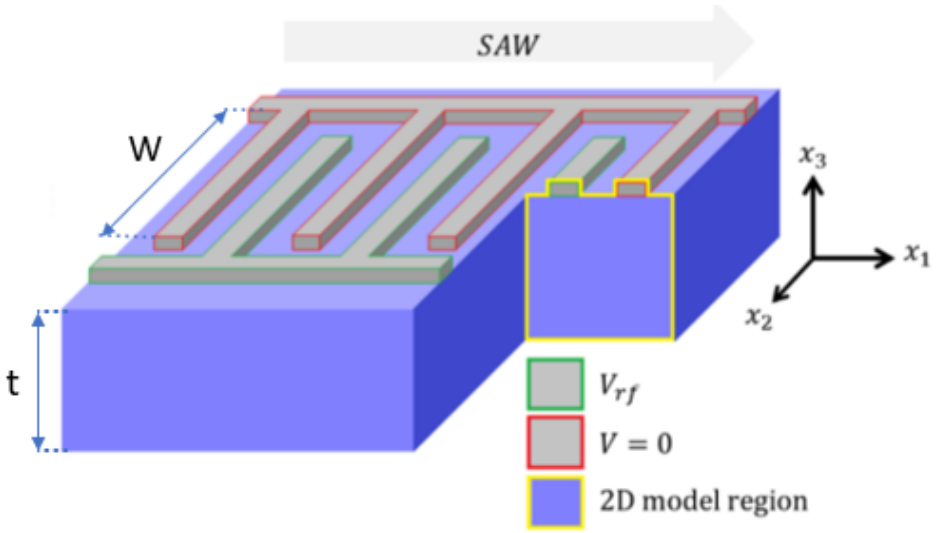


Figura 3.1: A região contornada de amarelo é a célula unitária bidimensional, que é a região que se repete indefinidamente. O contorno verde representa o sinal RF no transdutor de entrada e o vermelho é o transdutor do par que está aterrado. As dimensões destacadas na figura são a abertura W e a altura do substrato t. As coordenadas espaciais são representadas por x_1, x_2 e x_3. Adaptado de [55].

3.1 A Célula Unitária

A Figura 3.1 apresenta a estrutura da célula unitária bidimensional simulada em contorno amarelo. Esta figura mostra as coordenadas, incluindo x_2, que não será visível na geometria da simulação, em que os IDTs estão em cinza e o substrato piezoelétrico, cuja superfície superior ocorre no plano x_1Ox_2 para $x_3 = 0$, está em azul. O contorno amarelo se refere ao desenho da região da simulação, e os contornos verde e vermelho representam, respectivamente, o eletrodo que recebe o sinal RF e o aterrado.

A geometria simulada é mostrada na figura 3.2. O passo a passo para a obtenção dos resultados foi inspirado na referência [89]. Ele também mostra as principais características da simulação, que incluem:

- Materiais: os dois retângulos na parte superior da geometria são os eletrodos, feitos de alumínio. A porção restante é o material piezoelétrico, cujas escolhas foram o ZnO e o $LiNbO_3 - 128Y$.

  As matrizes para os tensores piezoelétricos, tensão e permissividade elétrica já estão definidas no COMSOL para o ZnO e alumínio, mas para o $LiNbO_3 - 128Y$ teve que ser inserida manualmente, como foi dito anteriormente.

- *Perfectly Matched Layer (PML)*: este é um recurso do COMSOL que nos permite criar um amortecimento artificial que força os componentes de deformação u_1 e u_3 a decair exponencialmente nas direções x_1 e x_3. Isso é importante para obter as ondas de Rayleigh e filtrar as ondas de *bulk*, as quais também são uma solução para a equação 2.4.8.

- Dimensões: para produzir um comprimento de onda de $\lambda_{SAW} = 8\ \mu m$, a largura do IDT (na direção x_3) foi definida para $\lambda_{SAW}/4 = 2\ \mu m$. O espaçamento entre os IDTs é $\lambda_{SAW}/4 = 2\mu m$ e entre as arestas e os IDTs é $\lambda_{SAW}/8 = 1\ \mu m$. Assim, a célula tem $\lambda_{SAW} = 8\mu m$ de largura. Além disso, a altura do IDT é $h_{IDT} = 0,5\mu m$. A figura 3.2a mostra a largura do IDT e da célula unitária.

  A altura do substrato piezoelétrico é $t_{NL} = 3\lambda_{SAW} = 24\ \mu m$ para o niobato de lítio e $t_{ZnO} = 4\lambda_{SAW} = 32\ \mu m$ para o óxido de zinco. A discrepância desta dimensão entre os materiais citados é importante porque a onda não desaparece em uma altura menor para o ZnO, como requerido para uma onda Rayleigh. Há também uma parte inferior do substrato que é usada para a PML, com altura $t_{PML} = \lambda_{SAW} = 8\ \mu m$.

  Embora não seja visível, o modelo se estende na direção x_2 porque o COMSOL nos permite colocar uma espessura diferente de zero. Ele define a extensão do modelo na direção dada, cujo valor impacta a condutância acústica. Isso representa a abertura do IDT e a distância foi escolhida para ser $W = 400\ \mu m$.

- . Condições de contorno: para resolver a equação 2.4.8, devemos impor algumas condições de contorno.

  i . O eletrodo esquerdo em verde está em um potencial V_{rf},

  ii . O eletrodo da direita e a parte de baixo da célula em vermelho estão aterrados (V = 0).

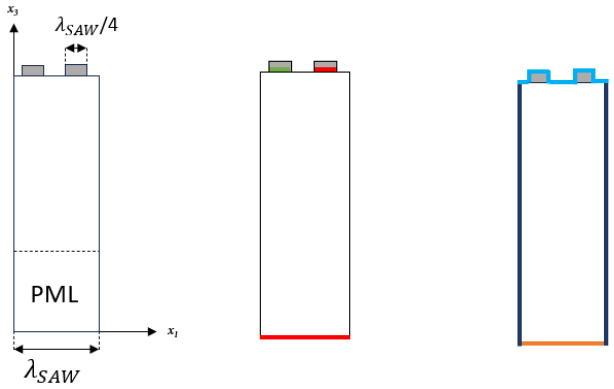
  Essas duas situações estão mostradas na figura 3.2b. Na figura 3.2c, estão as demais condições de contorno:

  iii . A parte superior, em azul claro, indica a superfície livre de *stress*.

  iv . Ambas as laterais têm uma condição periódica na cor azul escuro tal que:

$$\vec{u}_L = \vec{u}_R \tag{3.1.1a}$$

$$\phi_L = \phi_R \tag{3.1.1b}$$



(a) (b) (c)

Figura 3.2: Geometria e condições de contorno para a simulação de uma célula unitária, com o material piezoelétrico representado em azul e o alumínio dos eletrodos em cinza. Para as condições de contorno, o potencial elétrico no IDT esquerdo e o aterramento no IDT direito e na parte inferior do modelo estão em vermelho. Na parte inferior, ainda há a alternância do vermelho com o laranja para também representar a superfície sem deslocamento. Nas partes laterais, em magenta, os deslocamentos e potenciais elétricos são periódicos e, finalmente, a superfície superior é livre de condições. Também são mostradas as dimensões de altura e largura do IDT, bem como altura do substrato.

onde $\vec{u}$ é o vetor deslocamento, ϕ é o potencial elétrico e os subíndices L e R se referem ao lado esquerdo e direito, respectivamente, e ϕ é o potencial elétrico,

v . Em laranja, na parte inferior, a superfície é restrita (sem deslocamento), ou seja, $|\vec{u}| = 0$.

As simulações foram realizadas com a configuração SF.

3.1.1 Autofrequências

O COMSOL tem a capacidade de efetuar o cálculo numérico de auto-frequências para encontrar as ressonâncias acústicas testando valores no entorno de uma região de frequências determinadas pelo usuário através do *eigenfrequency solver*. Ele resolve um problema de autovalores lineares ou linearizados obtidos da discretização FEM, a qual encaminha ao sistema de autovalores abaixo:

$$\begin{cases} (\lambda - \lambda_0)^2 M\Psi - (\lambda - \lambda_0) N\Psi + O\Psi + P\Lambda = 0 \\ Q\Psi = 0 \end{cases} \tag{3.1.2}$$

em que λ é o autovalor e λ_0 é o ponto de linearização, com o valor nulo para a simulação feita. O problema é resolvido encontrando M, N, O, P e Q para o vetor solução Ψ. Há duas situações para se analisar: uma em que M é não nulo, se tratando de um problema de autovalores quadrático, sendo necessário que o COMSOL linearize o problema, e também M = 0, reduzindo a um problema de autovalores lineares. Esse procedimento retorna a solução da equação 2.4.8, cujos autovalores correspondem aos deslocamentos (u_i) e ao potencial piezoelétrico (ϕ).

Ao executar esta rotina com o substrato de $LiNbO_3 - 128YX$, pode-se observar que as ondas de Rayleigh ocorreram em uma frequência de $f_{SAW} = 486,7 \pm 0,1$ MHz, com velocidade de propagação de $v_{SAW} = \lambda_{SAW} \times f_{SAW} \approx 3896$ m/s. A literatura relata velocidades entre 3968 e 3993 m/s [90], uma diferença de cerca de 1,85% e 2,5%, respectivamente. A figura 3.3 mostra as componentes x (figura 3.3a) e y (figura 3.3b) do campo de deformação e do campo elétrico **E**, também nos eixos x (figura 3.3c) e y (figura 3.3d). A diferença de fase dos componentes de deformação horizontal u_x e vertical u_y é $\pi/2$, sendo essa uma característica das ondas elípticas de Rayleigh. Pode-se ver que, por comparação, as componentes x e y da deformação estão em fase com as do campo elétrico.

Com a substituição do substrato de LiNbO3 − 128YX por ZnO, a mesma rotina foi realizada. Como já foi dito, as dimensões do dispositivo foram mantidas, exceto a altura do substrato piezoelétrico, que foi elevada para $t = 4\lambda_{SAW} = 32$ μm. A frequência de ressonância medida neste caso é $f_{SAW} = 332,4 \pm 0,1$ MHz, conferindo uma velocidade de propagação de $v_{SAW} = \lambda_{SAW} \times f_{SAW} \approx 2656$ m/s. A literatura relata velocidades de 2700 m/s [91], uma diferença de cerca de $\sim 1,63\%$. A figura 3.4 exibe a distribuição espacial da deformação e do campo elétrico nas direções x e y da mesma forma que a figura 3.3.

3.1.2 Parâmetro de Reflexão (S_{11})

O modelo de célula unitária também possibilita encontrar a curva do parâmetro de reflexão S_{11} apenas alterando o modo de auto frequência do COMSOL para o domínio da frequência. Essa rotina varre uma faixa de frequências pré-determinada, calculando a porção do sinal refletido como a razão do sinal refletido pelo sinal de entrada no dispositivo. Conforme aponta a figura 3.5, o pico obtido tem seu mínimo em uma frequência próxima a $f_{SAW} = 487$MHz, com a varredura da frequência variando de 484 a 490 MHz. Isso significa que, nessa frequência, o sinal transmitido está em seu máximo na faixa de frequências da varredura, representando a frequência de ressonância para a onda Rayleigh. Observe que esta é a frequência de ressonância encontrada nas medidas de distribuição espacial.

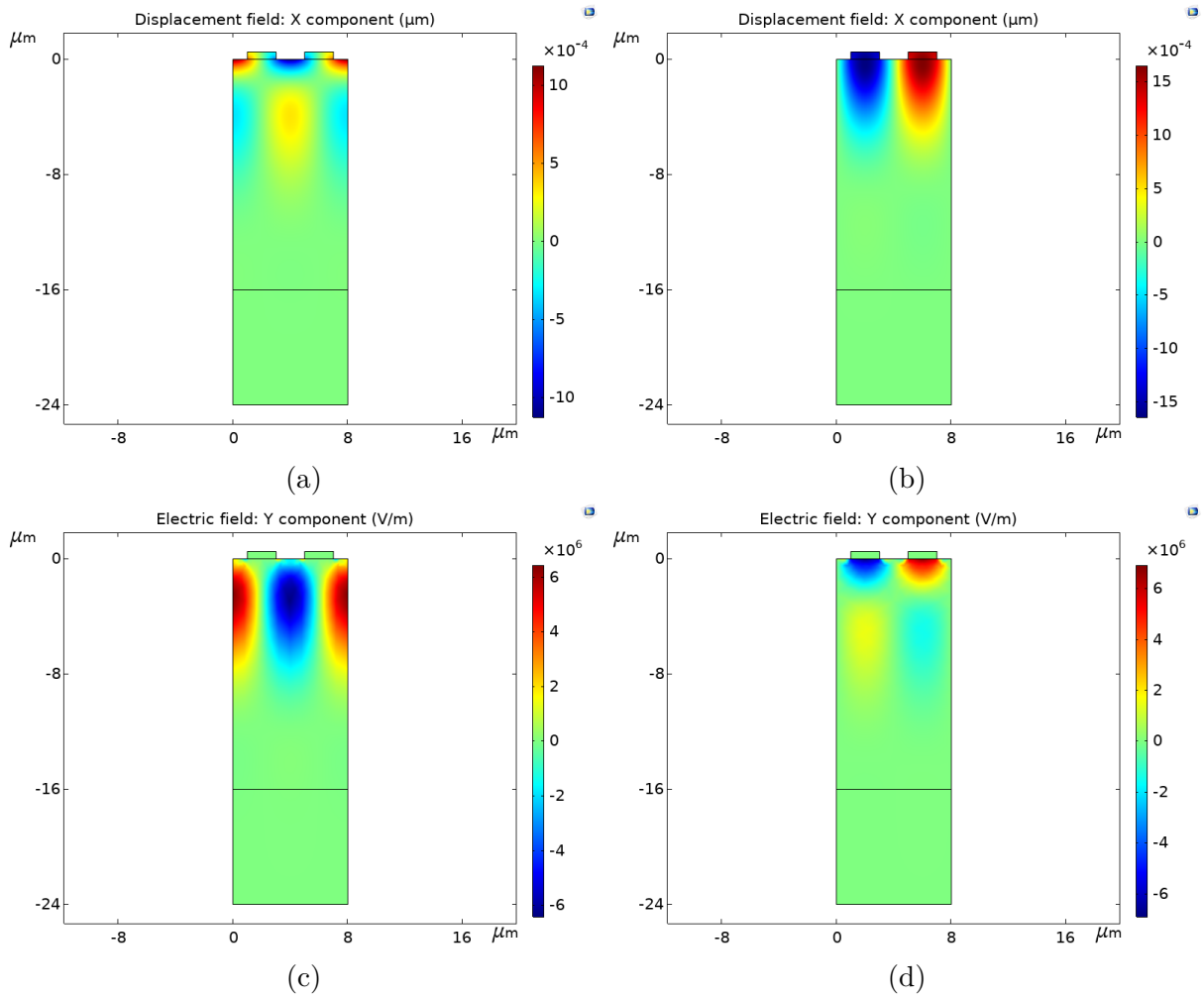


Figura 3.3: Distribuição espacial de (a) deformação no eixo x (b) deformação no eixo y (c) campo elétrico no eixo x (d) campo elétrico no eixo y para uma célula unitária de $LiNbO_3 - 128Y$.

3.1.3 COMSOL e as Propriedades do Dispositivo SAW

Foram testados os efeitos de vários parâmetros de simulação, tanto do COMSOL quanto da própria geometria do dispositivo, visando entender o papel das configurações do software e da física envolvida nas dimensões do dispositivo. O material de substrato piezoelétrico escolhido para ser simulado é $LiNbO_3 - 128Y$ e eles não foram replicados para ZnO porque as conclusões físicas e de simulação são as mesmas para ambos os materiais.

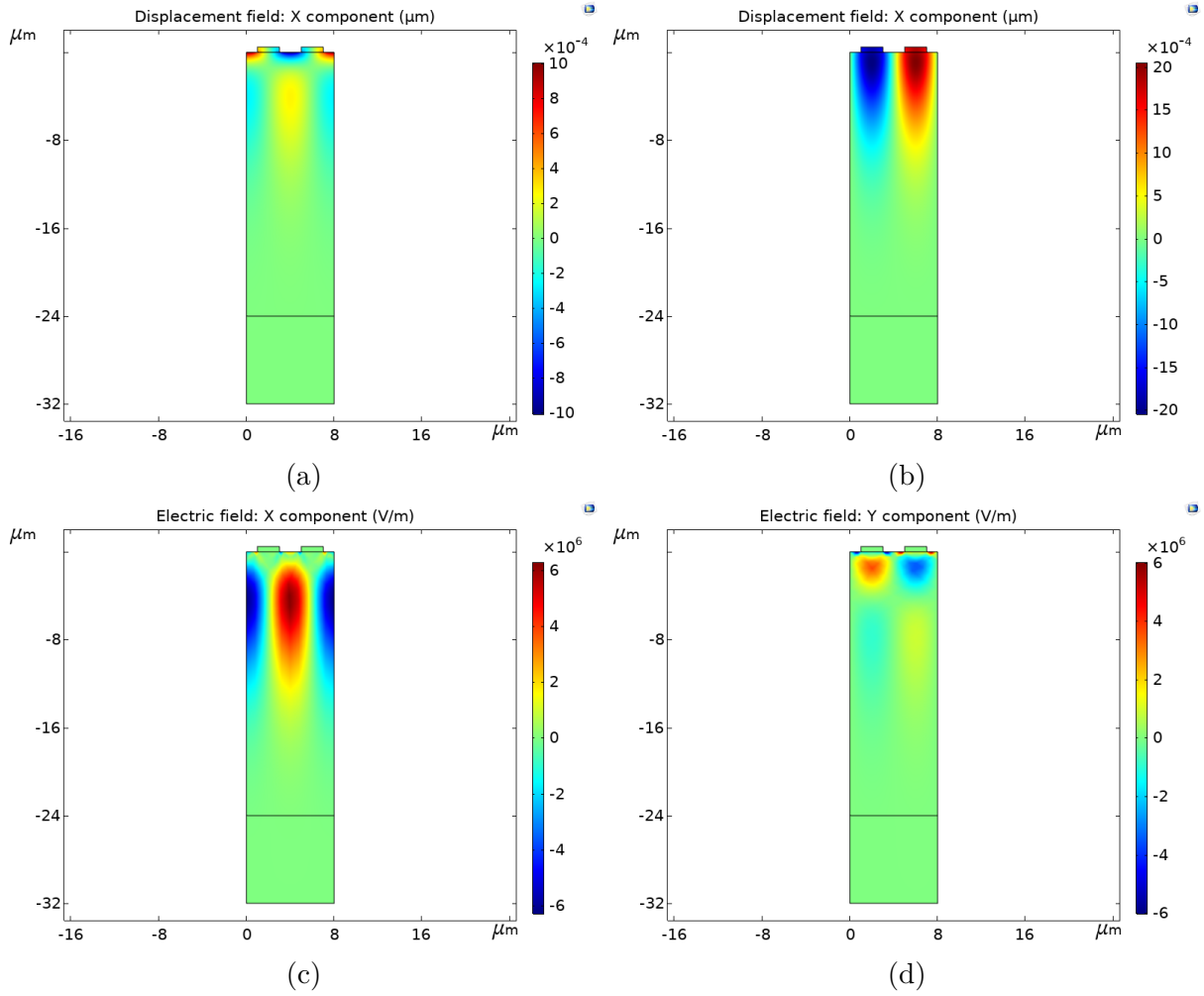


Figura 3.4: Distribuição espacial de (a) deformação no eixo x, (b) deformação no eixo y, (c) campo elétrico no eixo x e (d) campo elétrico no eixo y para uma célula unitária de ZnO.

3.1.4 Mesh

A forma como o software COMSOL discretiza a geometria em pequenos elementos, chamados de *mesh*, é mostrada na figura 3.6. Existem algumas opções para configurá-la:

- Figura 3.6a representa a divisão da geometria de maneira mapeada, ou seja, em objetos retangulares e quadrados;
- Figura 3.6b representa a divisão da geometria de maneira mapeada, porém com mais elementos. Nesse caso, os resultados são mais precisos, porém o custo computacional para simular essa geometria é maior;

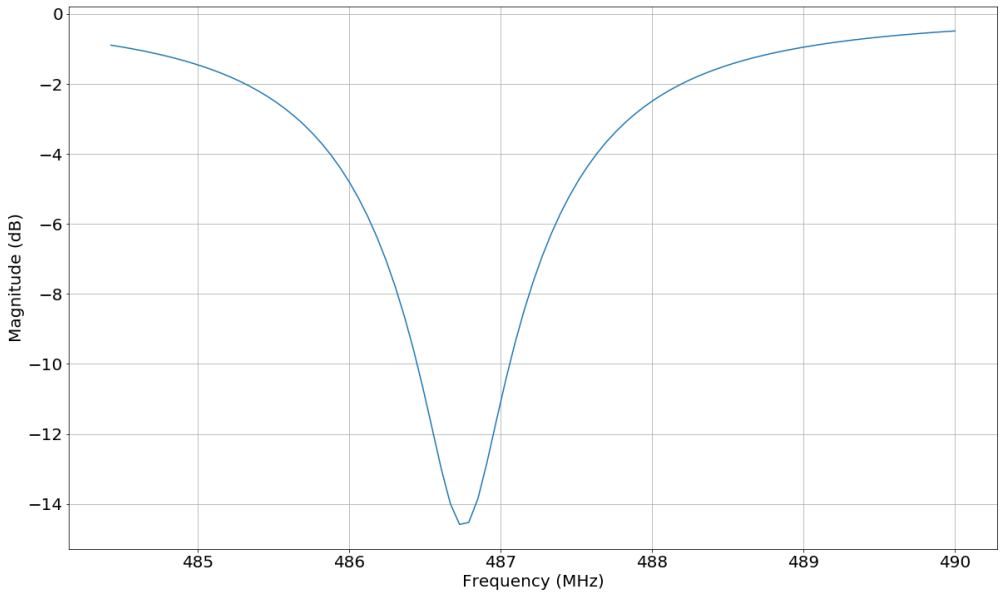


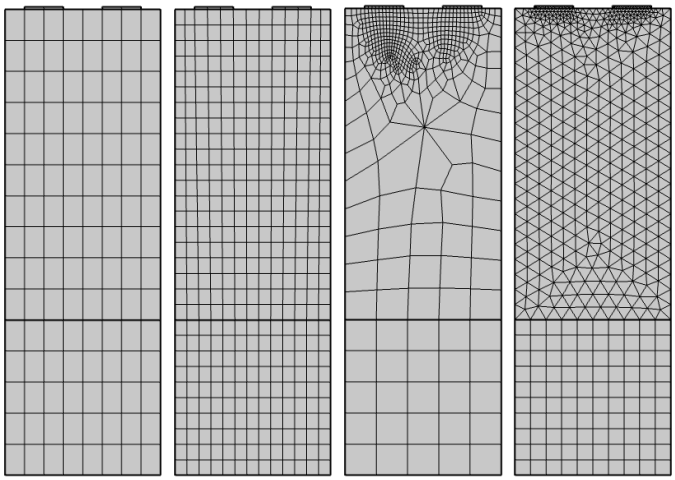
Figura 3.5: O parâmetro S_{11} com a frequência de ressonância em torno de $f_{SAW} = 487MHz$, corroborando com o resultado da distribuição espacial da figura 3.3.

- Figura 3.6c representa a divisão da geometria com enquadramento livre, isso é, com objetos quadrangulares, sejam eles regulares ou não;

- Figura 3.6d representa a divisão da geometria em que a parte que contém a PML foi dividida de maneira mapeada e o restante foi dividido de maneira triangular. Note que, na interface da PML com o substrato, os vértices do triângulo coincidem com os vértices do polígono quadrangular, o que não ocorreria se substituíssemos a divisão mapeada pela de enquadramento livre.

Para cada um desses elementos, soluções numéricas para a equação de onda em sólidos piezoelétricos (equação 2.4.8) são encontradas por meio de métodos de fatoração de matrizes. Quanto maior o número de elementos finitos, melhor a convergência dos resultados. No entanto, isso aumentará o esforço computacional.

A tentativa aqui é encontrar o maior tamanho possível dos elementos finitos para que o resultado convirja. Isso é feito para utilizar a menor quantidade desses elementos a fim de otimizar a simulação com o menor esforço computacional possível. O estudo foi elaborado com as divisões de enquadramento livre na PML e triangulares nas demais partes da geometria, de forma semelhante

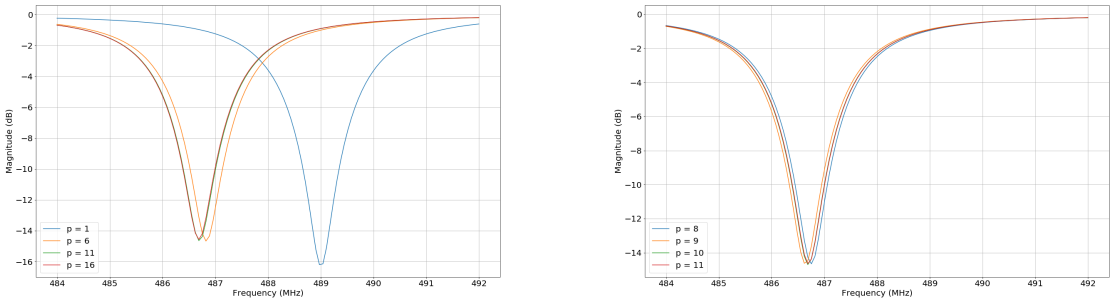


(a) (b) (c) (d)

Figura 3.6: Algumas maneiras de configurar a distribuição dos elementos finitos. (a) Mapeado, em que a área é subdividida em polígonos regulares quadrangulares. (b) Mapeado com elementos discretos menores. Em comparação com o tamanho dos elementos da figura (a), a simulação leva a resultados mais precisos, embora com um esforço computacional maior, devido à maior quantidade de elementos para calcular a equação de onda. (c) Enquadramento livre, com divisão em polígonos quadráticos, não necessariamente regulares. (d) Mistura de diferentes estruturas, com enquadramento livre na PML e triangular nos IDTs e na parte superior do substrato, onde não há PML.

à figura 3.6d. As divisões triangulares foram escolhidas por apresentarem maior densidade de elementos na superfície, que é a mesma região em que as ondas de Rayleigh estão confinadas, por ser mais precisa na interface de diferentes materiais, pela maior precisão em contornos e cantos e, por fim, as divisões quadrangulares não se adéquam para as pequenas espessuras de alumínio dos IDTs. Por outro lado, os elementos finitos mapeados foram escolhidos nas partes onde a PML está presente, pois não há interface entre os diferentes materiais e, por ser uma região onde as ondas de Rayleigh não atuam, não é de interesse para a simulação. Portanto, não é um problema ter uma demanda menor de poder computacional em troca de uma precisão menor neste local.

A divisão da geometria em subdomínios tem pedaços de tamanhos diferentes, como aponta a figura 3.6. Para lidar adequadamente com isso, deve-se escolher o tamanho mínimo e máximo dos elementos finitos. Para a simulação, o tamanho máximo foi escolhido como λ_{SAW}/p e o tamanho mínimo, $\lambda_{SAW}/(3p)$. O valor de p variou entre 1 e 16, conforme mostrado na figura 3.7. A Figura 3.7a mostra os resultados para uma variação do passo 5 para p. A convergência ocorreu para $p = 11$ e, para encontrar o ponto exato onde isso acontece, foi realizada outra simulação entre $p = 8$ e $p = 11$ com passo de 1. Os resultados estão na figura 3.7b, sendo bastante semelhante.



(a) (b)

Figura 3.7: As curvas para S_{11} para diferentes tamanhos máximo (λ_{SAW}/p) e mínimo ($\lambda_{SAW}/(3p)$) do finito elementos. Em (a), p varia de 1 a 16, com um passo de 5 e em (b) p varia de 8 a 11, com um passo de 1.

Portanto, a opção de $p = 8$ é a mais adequada, sendo o valor que otimiza a simulação.

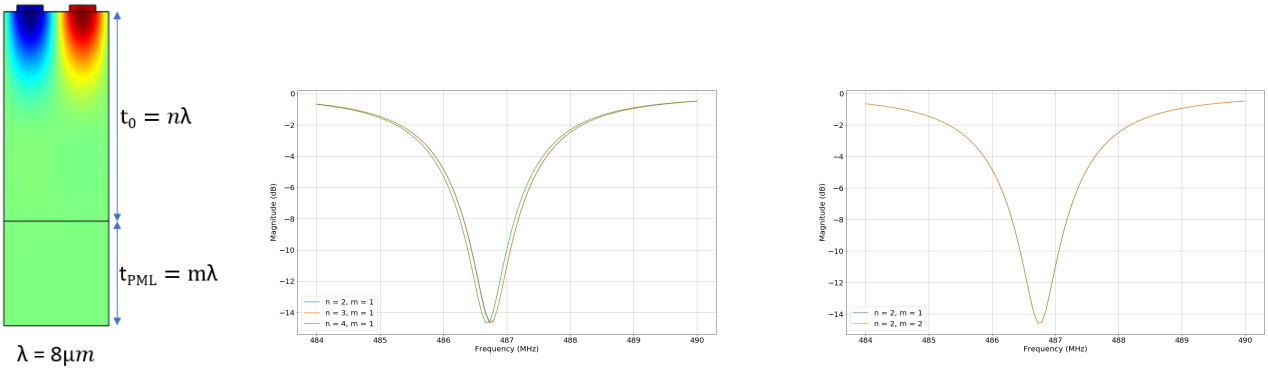
3.1.5 Altura do Substrato e da PML

A variação da altura total do modelo pode afetar os resultados da simulação, pois a altura do substrato e da PML pode não ser o suficiente para que a onda se dissipe. No caso da PML, ainda há a possibilidade de que algumas reflexões aconteçam na parte inferior do substrato, levando a modos de propagação de *bulk* [55]. A altura total é denotada por t na figura 3.1, de maneira que podemos escrever $t = t_0 + t_{PML}$, onde t_0 é a altura descontada da altura PML, a qual é indicada por t_{PML}. A variação ocorreu como múltiplos inteiros do comprimento de onda SAW, com $t_0 = n\lambda_{SAW}$ e $t_{PML} = m\lambda_{SAW}$, onde n e m são os multiplicadores de inteiros. A figura 3.8a expressa isso.

As simulações foram realizadas de forma a manter $m = 1$ constante e variar n entre 2 e 4 inicialmente, e em seguida manter $n = 2$ constante variando m entre 1 e 2. A primeira permitiu observar que a variação entre $n = 3$ e $n = 4$ é pequeno na curva de S_{11}, como indica a figura 3.8b. Mas para a segunda simulação, não são observadas diferenças na curva, conforme figura 3.8c.

3.1.6 Largura dos IDTs

A largura de onda gerado pelo dispositivo depende da configuração e da largura dos IDTs. Para um dispositivo de dedos simples, as ondas produzidas têm comprimento de onda $\breve{}_{SAW} = 4a$, como já foi mostrado, onde a é a largura do dedo. Idealmente, a velocidade de propagação das ondas não varia com o comprimento de onda e, dessa forma, a frequência muda proporcionalmente à medida que o comprimento de onda muda de forma que $v_{SAW} = \lambda_{SAW} \times f_{SAW}$. No entanto, os IDTs



(a) (b) (c)

Figura 3.8: (a) A altura da célula unitária como um múltiplo inteiro do comprimento de onda. (b) curva S_{11} variando t_0 e mantendo t_{PML} constante e (c) curva S_{11} variando t_{PML} e mantendo t_0 constante.

aplicam uma pressão mecânica no topo do substrato piezoelétrico devido ao seu peso. Logo, por consequência da pressão mecânica sobre um substrato piezoelétrico, uma deformação é produzida juntamente com a formação de uma distribuição de campo elétrico ao longo do dispositivo. Isso influencia diretamente na forma como a SAW se propaga, alterando a velocidade de propagação.

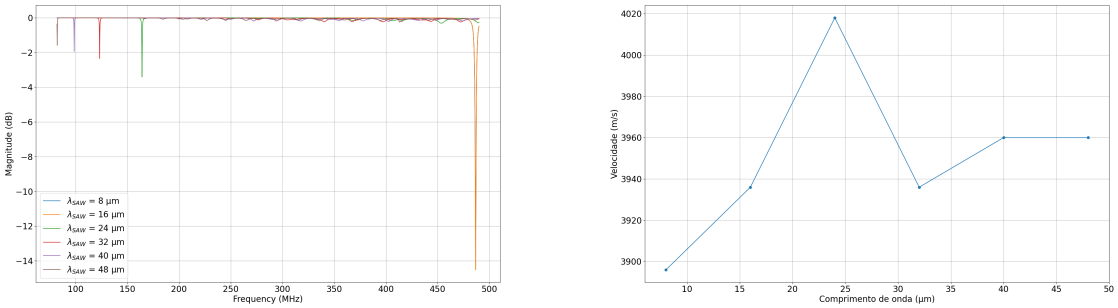
O gráfico das curvas de S_{11} está na figura 3.9a. A Figura 3.9b mostra a velocidade para cada comprimento de onda. Os valores para λ_{SAW} variaram entre $8\mu m$ e $48\mu m$, com um passo de $8\mu m$. A variação máxima da velocidade foi de cerca de 3%.

3.1.7 Altura dos IDTs

Mencionamos anteriormente que o peso do eletrodo influencia a velocidade de propagação da SAW. Então, o objetivo agora é testar esse efeito com uma largura constante de $a = 2\mu m$. Isso é feito variando a altura do eletrodo, cujos valores estão na faixa de 100 a 900 nm, pois o aumento da altura implica no aumento do peso, já que uma quantidade maior de material estará presente. A figura 3.10a mostra a curva de S_{11} e a figura 3.10b mostra o gráfico da velocidade de propagação em relação à altura do eletrodo, onde pode-se ver que a velocidade diminui conforme a altura aumenta.

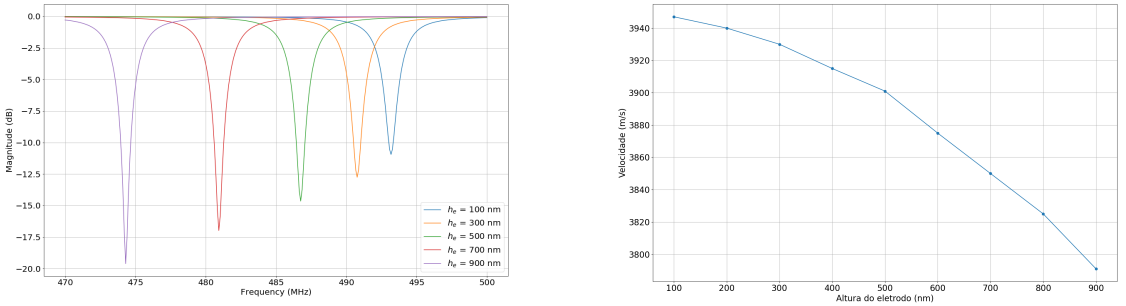
3.2 A Linha de Atraso

As linhas de atraso são formadas por um arranjo frontal de dois transdutores, como mostra a figura 3.11. Eles se mantêm distanciados um do outro por um número inteiro de comprimentos



(a) (b)

Figura 3.9: (a) Curvas de S_{11} variando a largura do IDT. Os picos do gráfico estão na posição de ressonâncias para cada comprimento de onda simulado. (b) Velocidade das SAW em função do comprimento de onda.



(a) (b)

Figura 3.10: (a) Curva de S_{11} variando a altura do eletrodo. (b) Velocidade SAW para cada altura de eletrodo. O peso do eletrodo sobre o substrato não permite que a velocidade de propagação permaneça constante.

de onda, para que a onda refletida no IDT de saída não interfira destrutivamente com a onda propagante. Um dos IDTs é responsável pela transdução do sinal elétrico na radiofrequência em dois feixes, gerado em direções opostas do IDT de entrada, na forma de um campo piezoelétrico propagante, enquanto o IDT de saída atua na detecção do sinal. Ao adicionar os IDTs de entrada e saída, simulamos a geometria da linha de atraso de um dispositivo SAW em um modelo finito e bidimensional.

Ainda há uma dificuldade extra causada pelo aumento da complexidade computacional desta situação na medida em que as dimensões simuladas crescem. Isso acontece porque agora há dois transdutores (assim podemos analisar a transmissão por causa do IDT de saída, que detecta o sinal enviado pelo IDT e de entrada), além de que o espaçamento entre eles aumenta o tamanho total

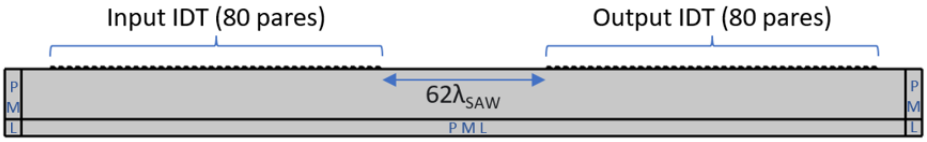


Figura 3.11: Visão do modelo bidimensional da linha de atraso que foi simulada, com IDTs de dedos simples, mantendo $\lambda_{SAW} = 8\ \mu m$. Está mostrado as partes laterais e inferior a PML, além do IDT de entrada (*Input IDT*) e de saída (*Output IDT*) e a distância entre os mesmos.

do objeto simulado. Ainda, o modelo da célula unitária não contempla alguns fenômenos físicos causados pelo fato que há um número finito de pares de dedos e pelas interferências que o IDT de saída causa no sistema. Portanto, acrescentou-se um número finito N de pares de dedos para visualizar adequadamente o efeito das ondas de superfície. Idealmente, à medida que o número N de transdutores aumenta, mais próximo o dispositivo funciona de maneira ideal, observando que seu desempenho melhora. Uma simulação variando N foi realizada para uma melhor descrição dessa dependência.

O objetivo das seções a seguir é explicar os passos para o cálculo dos parâmetros S nas simulações da linha de atraso e apresentar os resultados para a reflexão e também para a transmissão, cujo cálculo não foi realizado até então. A forma como a simulação foi feita pode ser usada para comparar os resultados com dados experimentais e investigar o desempenho do dispositivo.

3.2.1 Parâmetros de simulação: PML e condições de contorno

As condições de contorno aplicadas são um pouco diferentes das utilizadas anteriormente. Originalmente, a condição de periodicidade contínua, que era utilizada nas laterais da célula unitária, garantia nesses contornos a manutenção dos valores do potencial elétrico ϕ e do vetor de deslocamento mecânico $\vec{u}$ e ao configurá-la, os efeitos de borda se tornam desprezíveis, além de que a geometria seria considerada uma replicação periódica e infinita da célula. No entanto, para transdutores reais de uma linha de atraso funcional, uma condição em que as ondas inexistam deve ser imposta nas fronteiras laterais para que as ondas acústicas desapareçam nessas bordas, evitando a formação de reflexões sobre elas. Esta é uma forma de simular uma situação em que as ondas se propagam ao infinito, e requer a aplicação das condições de Dirichlet, as quais são impostas adicionando camadas de PML para induzir a absorção de ondas dentro delas nas partes laterais do modelo, seguindo o mesmo intuito que já foi feito na parte inferior do substrato para a célula unitária. A camada inferior da PML é mantida na linha de atraso. Outra alternativa que também poderia ser utilizada seria a aplicação de uma condição crítica de amortecimento nas bordas do problema, que atuaria eliminando as ondas nestes contornos. No entanto, embora essa

seja uma possibilidade válida, optamos pelo uso da PML, visto que essa escolha é recomendado pela documentação COMSOL [92] para estudos no domínio da frequência.

Para adequar o uso do PML e otimizar seu efeito, o COMSOL oferece a opção de sistema de coordenadas. Portanto, é essencial garantir que as coordenadas cartesianas sejam utilizadas, pois são mais adequadas à geometria simulada. Outras opções disponíveis para aplicar na PML são fator de escala (do inglês *scale factor - SF*) e parâmetro de curvatura de escala (do inglês *scale curvature parameter - SCP*), cuja otimização leva a uma atenuação mais eficiente para os modos concentrados nas bordas do sistema. Para escolher uma forma de atenuação mais apropriada, são oferecidas diferentes equações de atenuação, dentro das quais a função polinomial é mais eficiente para situações envolvendo diferentes tipos de ondas, sendo implementadas nos modelos. É expressa por [74]:

$$f_p(\xi) = s\xi p(1-i) \tag{3.2.1}$$

onde s e p são os valores de SF e SCP, respectivamente, ξ representa uma coordenada adimensional, cujo valor varia entre 0 e 1, sendo gerada e aplicada pelo COMSOL na função de atenuação $f_p(\xi)$.

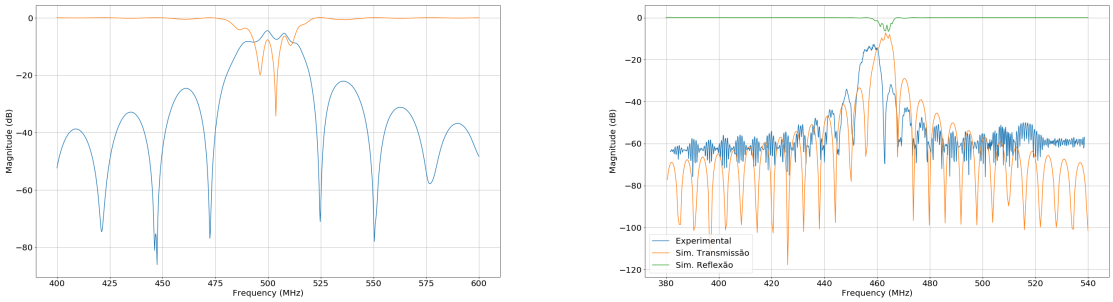
Com o valor desta função, o deslocamento complexo de atenuação em uma direção específica é:

$$\Delta x = \lambda_{SAW} f_p(\xi) - \Delta_w \xi \tag{3.2.2}$$

em que $\Delta_w = \lambda_{SAW}$ denota a largura da PML. Cada direção possui um *offset* complexo, que é calculado separadamente, atenuando as ondas em cada uma dessas regiões.

3.2.2 Simulação do Comsol

A primeira ilustração de simulação da linha de atraso foi feita com os mesmos parâmetros do $LiNbO_3128Y$ da célula unitária, com os resultados expressos na figura 3.12. Ela foi projetada com as mesmas dimensões da abertura e largura de dedos do dispositivo físico usado para coletar os dados experimentais. O dispositivo possui uma abertura de 400 µm e IDTs da configuração SF com dedos de largura $a = 2\ \mu m$, resultando em um SAW de 8 mum. A distância entre os IDTs ($L_p = 500\lambda_{SAW}$), porém a simulação não segue a mesma do dispositivo físico. A primeira curva, da figura 3.12a possui $L_p^{sim} = 10\lambda_{SAW}$ e a segunda, da figura 3.12b possui $L_p^{sim} = 62\lambda_{SAW}$. Isso não deve interferir nos resultados porque não foram adicionadas perdas de substratos, portanto não terá mudanças nos resultados conforme aumenta essa distância. Foram feitas duas simulações, cada uma das quais contemplavam as diferentes matrizes para o niobato de lítio mostradas no



(a) (b)

Figura 3.12: Gráfico dos parâmetros S em que a transmissão medida está em azul, enquanto que as simulações estão em laranja para a transmissão e verde para a reflexão.(a) Curva de reflexão (S_{11}) e transmissão (S_{21}) para a *delay line* com 20 pares de dedos e abertura de 400 μm com os coeficientes cuja frequência de ressonância se adéqua às velocidades reportadas.(b) Curvas de reflexão (S_{11}) e transmissão (S_{21}) para a *delay line* com 80 pares de dedos e abertura de 400 μm com os coeficientes que se adéquam às curvas experimentais.

capítulo anterior.

Para a primeira curva, as matrizes usadas foram as que foi acrescentada uma rotação em relação às matrizes originais, e foram utilizados 20 pares de dedos. Nesse caso, a frequência na qual o sinal transmitido é máximo, chamada de frequência de ressonância, é em torno de 499,7 MHz, correspondendo a uma velocidade SAW de $v_{SAW} = \lambda_{SAW} f = 3998$ m/s. A referência [90] relata velocidades de 3968 e 3993 m/s, uma diferença de 0,75% e 0,13%, respectivamente, em boa concordância com a simulação.

Porém, a curva não se adéqua corretamente com os resultados observados experimentalmente. A figura 3.12b mostra os resultados comparando a simulação de S_{21} do dispositivo, em laranja, em comparação com os resultados experimentais obtidos, em azul. Aqui a simulação contou com a mesma quantidade de pares de dedos do dispositivo físico, isto é, N = 80. Ainda, há na simulação a curva verde para os resultados de S_{11} da simulação. A frequência de ressonância da simulação ficou em torno de 463,3 MHz, enquanto o resultado experimental ficou em 458,9 MHz, representando uma diferença de cerca de 0,95%.

As próximas considerações das simulações serão feitas utilizando os tensores que apresentaram o resultado mais próximo do que foi obtido experimentalmente.

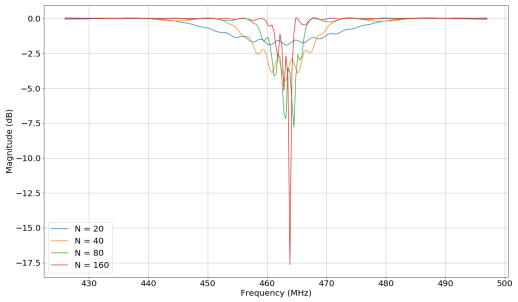
3.2.3 O efeito de aumentar o número de pares de dedos N

Aqui devemos avaliar como o aumento do número de pares de dedos N atua no desempenho do dispositivo. Espera-se que a dependência entre a condutância acústica do dispositivo aumente com o número de pares de dedos N. O modelo da célula unitária pressupõe um modelo ideal com infinitos pares de dedos, então também espera-se que a curva seja mais bem definida conforme N aumenta e se aproxima do modelo ideal.

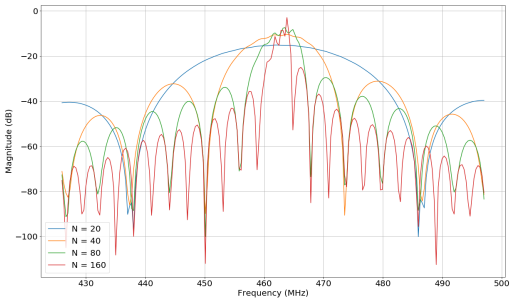
Realizamos simulações no domínio da frequência para encontrar S_{11} e S_{21}. Foram utilizados quatro valores diferentes para N, que são: 20, 40, 80 e 160, e a figura 3.13 mostra os gráficos com as curvas interpoladas para cada N. A figura 3.13a refere-se à curva do sinal refletido, ou seja, S_{11}. Em geral, a frequência de ressonância tem um vale mínimo que diminui para um N maior, indicando que menos do sinal é refletido, mostrando que a transmissão é mais eficiente. Além disso, os picos ficam mais definidos à medida que N aumenta, no qual se nota uma redução da largura, ou seja, a transmissão acontece com maior definição.

Comparando esses resultados com a simulação de célula unitária da figura 3.5, os picos e vales bem definidos estão sem sincronia em comparação com os das simulações da linha de atraso, onde alguns sinais secundários apareceram. Em outra simulação apresentada na figura 3.13c, em que foi retirado o IDT de saída, foi calculado o parâmetro S_{11}, e então não foram constatadas o ruído e as ondulações. Por esta razão, a evidência é que estes fenômenos se originam devido aos múltiplos efeitos de trânsito que a alocação do transdutor de saída provoca, além de efeitos de difração [93]. E, como a distância dos IDTs é um número inteiro múltiplo de comprimentos de onda, há o aparecimento de ondas estacionárias mais evidentes formadas devido à interferência construtiva. Lembrando a figura 3.13 para as linhas de atraso, os cálculos para N = 160 revelam que essas distorções são mais expressivas, causando a perda de eficiência do dispositivo. Essas considerações para grandes valores de N são válidas, onde as reflexões dentro do transdutor também são mais significativas, com a eficiência diminuindo com o aumento de N.

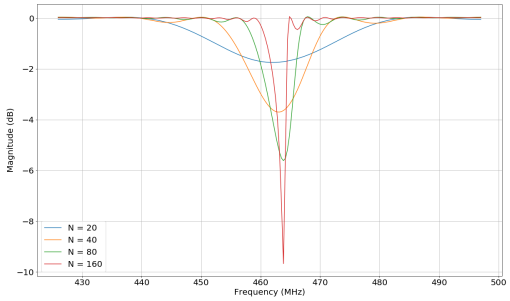
Foi observado que efeitos não lineares da transmissão de saída podem ocorrer em dispositivos reais com a adição de mais dedos, formando mais perdas e reflexões internas [80]. Acrescenta-se o fato de que essas considerações também não estão nas simulações, mesmo alguns outros efeitos como a capacitância que existe entre os dedos do transdutor. Mesmo assim, a análise é boa o suficiente para observar que a alocação dos dedos tem limitações para o bom funcionamento do aparelho.



(a)



(b)



(c)

Figura 3.13: (a) Gráficos do parâmetro S_{11} para diferentes números de pares de dedos. (b) Gráficos do parâmetro S_{21} para diferentes números de pares de dedos. (c) Gráficos do parâmetro S_{11} para diferentes números de pares de dedos após retirar o IDT de saída. Observe que as ondulações em torno da frequência de ressonância não apareceram, indicando que o IDT de saída provoca interferências no resultado dos parâmetros S.

3.2.4 Emissão e Transmissão do Sinal

Espera-se que a soma dos coeficientes de reflexão e transmissão em dispositivos ideais de duas portas seja um, ou seja, todo o sinal emitido seja transmitido ou refletido. Isso pode ser enunciado como [78]:

$$|S_{11}|^2 + |S_{21}|^2 = 1 \tag{3.2.3}$$

Em dispositivos reais, esta equação não é válida, pois as dissipações não estão incluídas. Dessa maneira, a soma apresentada na equação acima deve ser menor que um, e isso pode ser colocado de forma matemática como:

$$|S_{21}|^2 < 1 - |S_{11}|^2 \tag{3.2.4}$$

O parâmetro S_{11} no lado direito desta equação significa que nem todo sinal enviado da primeira porta (em módulo) é recebido pela segunda porta.

Esta é uma generalização para qualquer dispositivo de duas portas, mas os IDTs são bidirecionais, pois as emissões dos feixes acústicos dos transdutores são divididas igualmente em ambas as direções. Por causa disso, diz-se que os IDTs são essencialmente dispositivos de 3 portas. Assim, apenas metade do sinal enviado pelo transdutor de entrada é transmitido para o segundo ao realizar medições de radiofrequência em uma linha de atraso. Então, também é verdade que:

$$|S_{21}|^2 < \frac{1 - |S_{11}|^2}{2} \tag{3.2.5}$$

Podemos imaginar uma situação em que alocamos mais um transdutor de saída de forma que o transdutor de entrada fique no meio de dois receptores de sinal. Assim, o sinal enviado por ele seria capturado nos dois sentidos da emissão. Então, uma maneira semelhante de expressar a equação 3.2.3, considerando que nenhum sinal é perdido, é:

$$|S_{11}|^2 + \left|S_{21}^L\right|^2 + \left|S_{21}^R\right|^2 = 1 \tag{3.2.6}$$

onde S_{21}^L representa o sinal transmitido recebido pelo IDT no lado esquerdo do IDT de entrada e S_{21}^R no lado direito. Idealmente, ambos os coeficientes são iguais, e considerar a presença de perdas implica em recuperar a equação 3.2.5.

Para ver isso nas simulações, a figura 3.14 mostra o gráfico para o sinal emitido e transmitido calculado para a linha de atraso dos resultados da figura 3.12b. Para relembrar, os valores usados são N = 80 e W = 400 μm. Como esperado, a emissão para o transdutor de saída corresponde a um máximo abaixo de 0,5 do sinal total, porém próximo a esse valor. Também é possível ver que, na frequência de ressonância, a transmissão se aproxima de seu valor máximo de $\left(1 - |S_{11}|^2\right)/2$, mas as perdas internas fazem com que o dispositivo não funcione de maneira ideal, então é impossível alcançar a igualdade [80].

3.2.5 Ressonador SAW (SAWR)

Buscou-se simular como a inserção de refletores de Bragg (BR) afeta o funcionamento do dispositivo. Essas estruturas são formadas por tiras de metal que constituem uma configuração interferométrica, que podem ser fabricadas junto com os IDTs. O espelho de quarto de onda é amplamente utilizado, onde o espelho é projetado para ter uma largura de $\lambda_0/4$ e uma separação entre as tiras de mesma dimensão. Cada uma delas reflete uma pequena parte da onda incidente, e cada vez mais que se incluem estruturas como essa com as dimensões especificadas, a reflexão

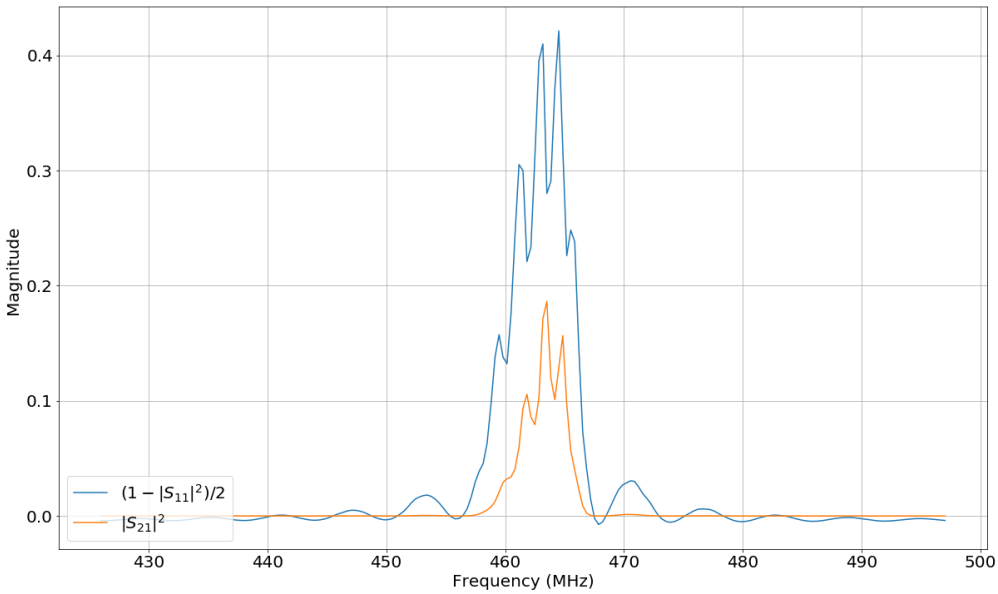


Figura 3.14: Sinal emitido pelo IDT de entrada em azul e sinal transmitido para o IDT de saída em verde em escala absoluta, ou seja, diferentemente dos casos anteriores, não é logarítmica. Observe que o sinal não é transmitido em sua totalidade, embora o valor fique próximo ao máximo ao redor da frequência de ressonância.

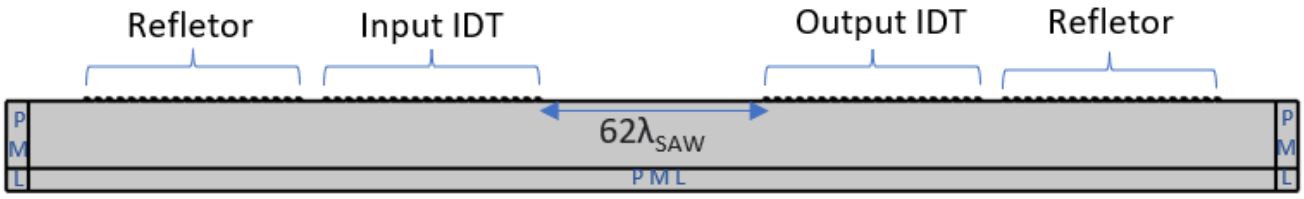


Figura 3.15: Geometria da seção transversal simulada no Comsol com os espelhos de Bragg (refletores) e IDTs inclusos. O valor da abertura foi mantido em $W = 400\mu m$

total do sinal aumenta progressivamente, causando interferência construtiva das ondas refletidas.

Com a inserção dos BRs, cria-se uma banda de parada no espectro de transmissão da onda de entrada. O número de refletores, a altura e o material utilizado alteram a forma e magnitude da onda [94].

Ressonador de duas portas

A Figura 3.15 mostra a inserção das tiras que compõem os refletores de Bragg em uma imagem da seção transversal da geometria simulada no *Comsol*. A simulação foi feita variando a quantidade de tiras dos refletores para ver o efeito de potencializar a transmissão progressivamente, com variação de 100, 300 e 500. Para uma melhor visualização, o parâmetro S_{21} não foi colocado em escala logarítmica. Em vez disso, os resultados estão na forma do módulo do parâmetro de transmissão, $|S_{21}|$, em função da frequência. A distância entre os IDTs e os espelhos mais próximos é $\lambda_{SAW} = 8\mu m$, seguindo a condição de otimização de distância, a qual deve ser dada por um múltiplo inteiro do comprimento de onda a fim de que a reflexão nos espelhos de Bragg produzam interferências construtivas com as ondas incidentes. Os resultados da simulação são mostrados na figura 3.16, onde, a transmissão máxima (em torno de 460 MHz) foi de 0,31 (sem tiras) contra 0,65 com a inserção de 500 tiras para os BMs, uma diferença de 0,34.

Ressonador de uma porta

A geometria simulada nesse caso é de apenas um IDT, que envia e recebe o sinal refletido, com as grades postas em sua periferia, como mostra a figura 3.17. A distância entre as grades foi escolhida para ser $d_s = \lambda_{SAW} = 8\ \mu m$, seguindo a referência [95], também para garantir a condição de interferência construtiva.

A figura 3.18 mostra os resultados encontrados para 80 pares de dedos e 700 tiras para a grade. Como o ressonador de uma porta possui apenas o IDT de entrada, os resultados só puderam ser expressos como $|S_{11}|$.

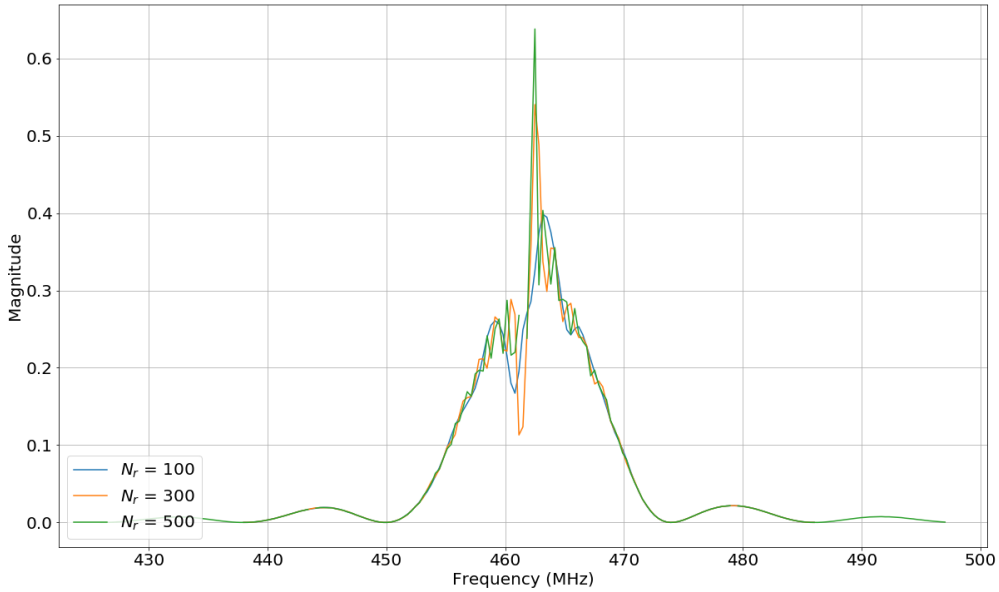


Figura 3.16: Variação do sinal $|S_{21}|$ para diferentes números de tiras de metal que compõem o espelho de Bragg.

3.3 Resultados experimentais

3.3.1 Fabricação

O substrato $LiNbO_3 - 128Y$ serviu como substrato piezoelétrico para imprimir os IDTs por fotolitografia (consulte o apêndice C para obter detalhes do procedimento). A impressão ocorreu no Centro de Componentes Semicondutores - CCS Nano UNICAMP. O fotorresistente positivo AZ 5206 foi aplicado na amostra para que o *Photoaligner Karl Suss*, modelo MJB3, o excitasse por exposição à luz UV. O "molde" da luz UV para excitar o fotorresistente utilizado é uma máscara de cromo depositada sobre o vidro fabricado no Centro de Tecnologia Integrado Renato Archer - CTI. A matriz possui 48 pares de dispositivos, sendo 24 pares modelo de dedos simples, gerando um comprimento de onda SAW $\lambda_{SAW} = 8\ \mu m$, e os outros 24 pares são de dedos duplos, para geração de $\lambda_{SAW} = 16\ \mu m$. Cada dedo tem 2 μm de largura. O modelo foi desenhado com o software K-layout, cujo modelo está na figura 3.19a.

Usando um evaporador por feixe de elétrons, seguido da remoção do material por *lift-off*, camadas de 10 nm Ti e 60 nm Al foram depositadas para alocar os IDTs no substrato. Esses processos ocorreram no Laboratório de Pesquisas em Dispositivos - LPD do Departamento de

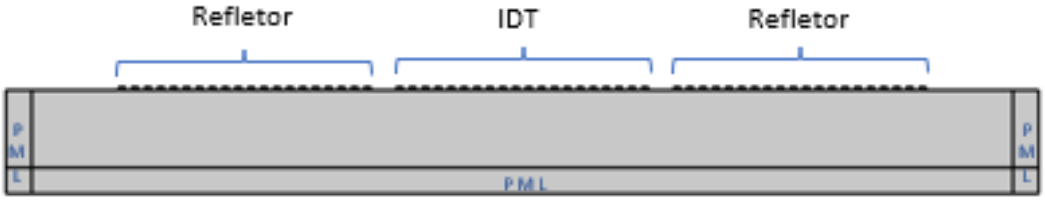


Figura 3.17: Geometria da seção transversal simulada no *Comsol* com os espelhos de Bragg (refletores) e IDTs inclusos para o ressonador de uma porta. O valor da abertura foi mantido em W = 400 μm

Física Aplicada do IFGW - DFA [96].

As outras características físicas da fabricação do dispositivo são o número de pares de dedos (N = 80) e a abertura (W = 400 μm), que são idênticas à simulação de linha de atraso da figura 3.12b. A única exceção é a separação entre os transdutores de entrada e saída, que é L_p = $500\lambda_{SAW}$. No caso da simulação, este não é um fator que afeta os resultados obtidos, pois as perdas de substrato não foram incluídas. Ou seja, a onda se propagaria com uma perda cada vez maior de sua intensidade, implicando que quanto mais longo for o caminho de propagação, maior será a perda, diminuindo o sinal transmitido. Como este efeito não está presente na simulação, a onda pode se propagar indefinidamente mantendo sua intensidade livre das perdas do substrato. Além disso, quanto maior a geometria a ser simulada, maior o esforço computacional, justificando a simulação de uma geometria menor.

3.3.2 Medições

Para realizar as medições elétricas, o dispositivo foi alocado em um porta-amostras (SH), que é mostrado na figura 3.20a. Foi construído no IFGW, com a carcaça feita de alumínio e com quatro trilhos de cobre (para transportar o sinal elétrico) apoiados sobre um material isolante para evitar que os metais se tocassem, o que provocaria um curto-circuito. Quatro conectores SMA foram colocados em cada lado para fazer a conexão dos cabos de RF com as trilhas de cobre, que foram soldadas no conector do tipo *SMA*. Além disso, os PADs dos IDTs foram conectados ao porta-amostra pela técnica do *wire bonder*, feita no CTI. Por um lado, o contato dos PADs com a trilha de cobre é feito para receber o sinal elétrico e por outro, o contato do outro PAD do mesmo IDT é feito com a parte de alumínio do SH, servindo como aterramento.

Com esta configuração, pode-se perceber como funcionam os dois dispositivos colocados no SH, um SF e outro DF. O esquema é mostrado na figura 3.20b.

As medições de RF foram executadas com um analisador de rede vetorial (do inglês *Vectorial Network Analyser - VNA*) presente no Laboratório de Física de Dispositivos Quânticos (LFDQ). Ele

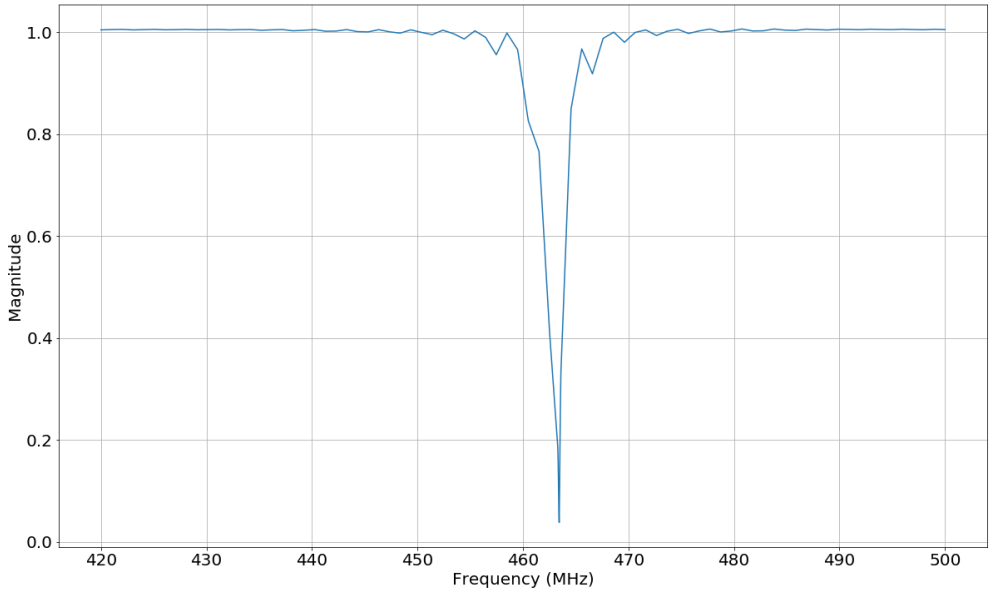


Figura 3.18: Sinal $|S_{11}|$ medido para o ressonador de uma porta com 700 tiras de metal para os espelhos de Bragg.

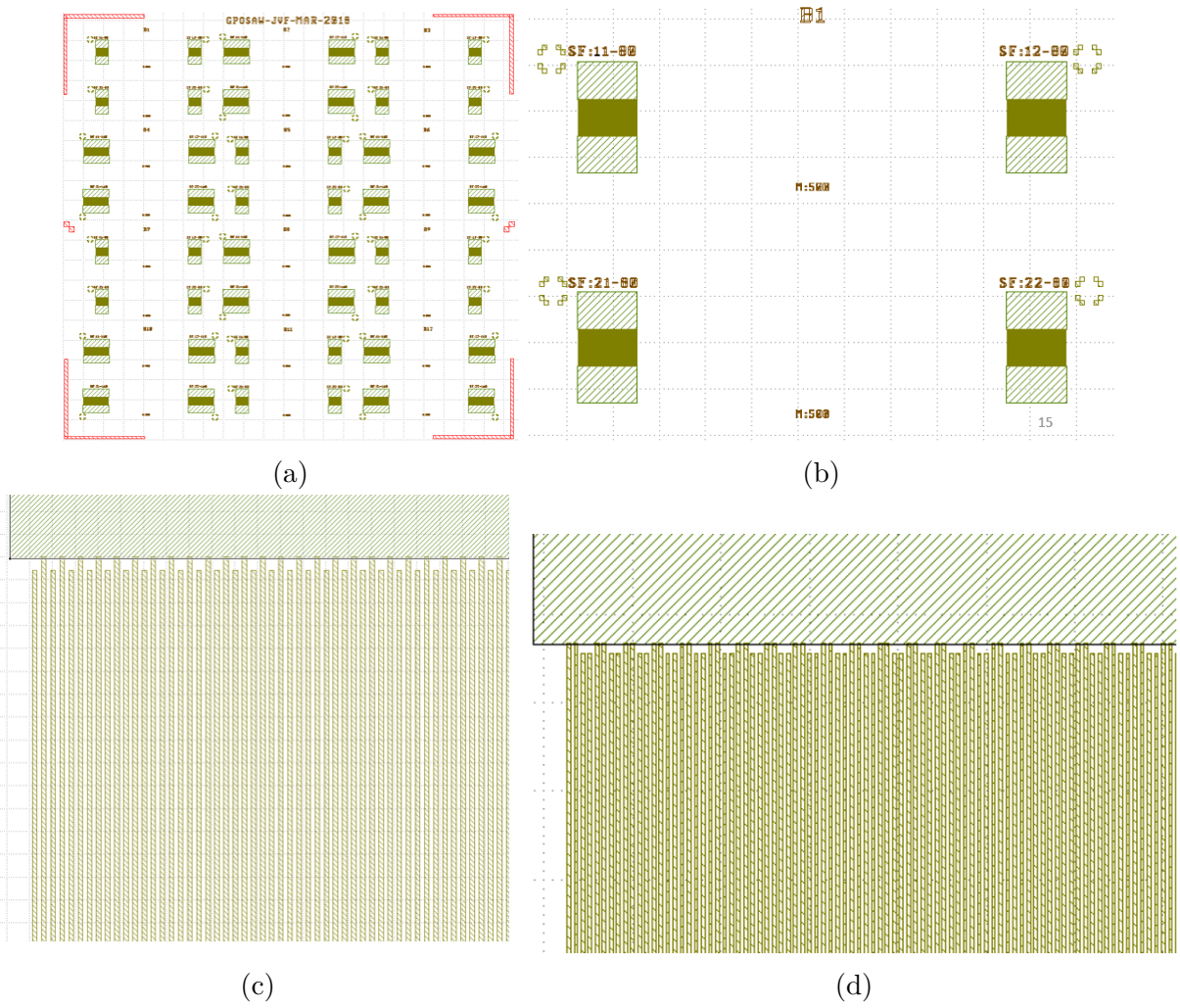
realiza medições de potência e expressa os resultados como parâmetros S, tanto para a transmissão (S_{12} e S_{21}) quanto para a reflexão (S_{11} e S_{22}).

A impedância complexa do j-ésimo dispositivo é dada por [97]:

$$Z_j = Z_{of}\left(\frac{1+S_{jj}}{1-S_{jj}}\right) \tag{3.3.1}$$

em que Z_{of} é a impedância característica da linha de transmissão, sendo calculada para a calibração dos parâmetros do analisador de rede. Esse valor geralmente é $Z_{of} = 50\ \Omega$.

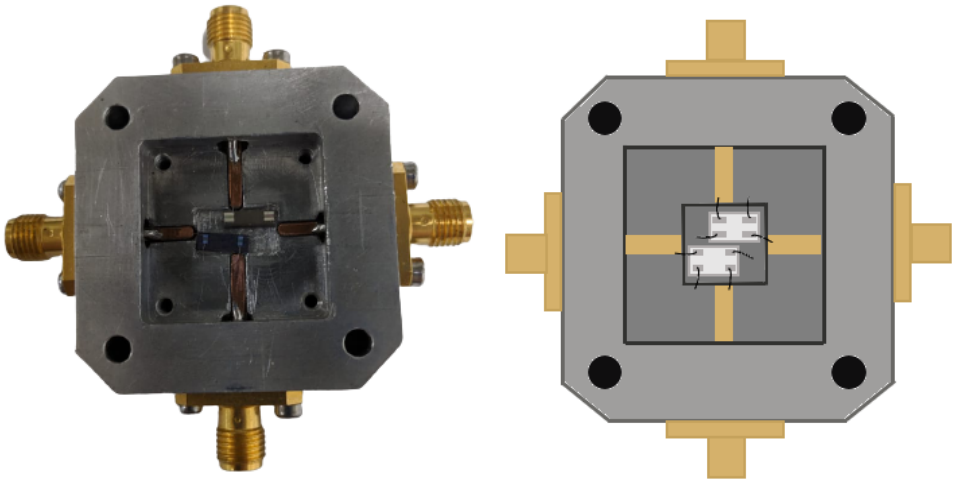
Os resultados são mostrados na figura 3.21. As figuras 3.21a e 3.21d representam os coeficientes de reflexão e as figuras 3.21b e 3.21c os transmitidos. Pode-se notar que o dispositivo possui uma frequência de ressonância, na qual ocorre a maior transmissão de potência, em torno de 456 MHz, onde as curvas de transmissão apresentam picos e as curvas de reflexão um vale. A velocidade para esta frequência é em torno de $v_{SAW} = \lambda_{SAW} f = 3648 m/s$. Este valor está aproximadamente 10% distante dos encontrados na referência [90] e cerca de 1,3% de diferença em relação às simulações.



(a) (b)

(c) (d)

Figura 3.19: Imagens obtidas do software *k-layout* com o desenho da máscara, feito por João Victor Fernandes. (a) os 12 blocos contendo 48 pares de IDTs. (b) Um bloco, denotado por B1, como mostra a parte superior, com dois pares de IDTs SF. (c) Detalhamento de um IDT SF, com o PAD para a conexão por *wirebond* na parte superior e os dedos na parte inferior. (d) Detalhamento de um IDT DF, com o PAD para a conexão por *wirebond* na parte superior e os dedos na parte inferior.



(a) (b)

Figura 3.20: (a) Porta amostra com os dispositivos SAW dentro. Os conectores SMA estão soldados em trilhas de cobre, que por sua vez são conectadas aos dispositivos através da técnica *wire-bonder*. (b) Esquema de como foi feita a conexão utilizando a *wire-bonder*. O próprio porta-amostra foi usado como aterramento.

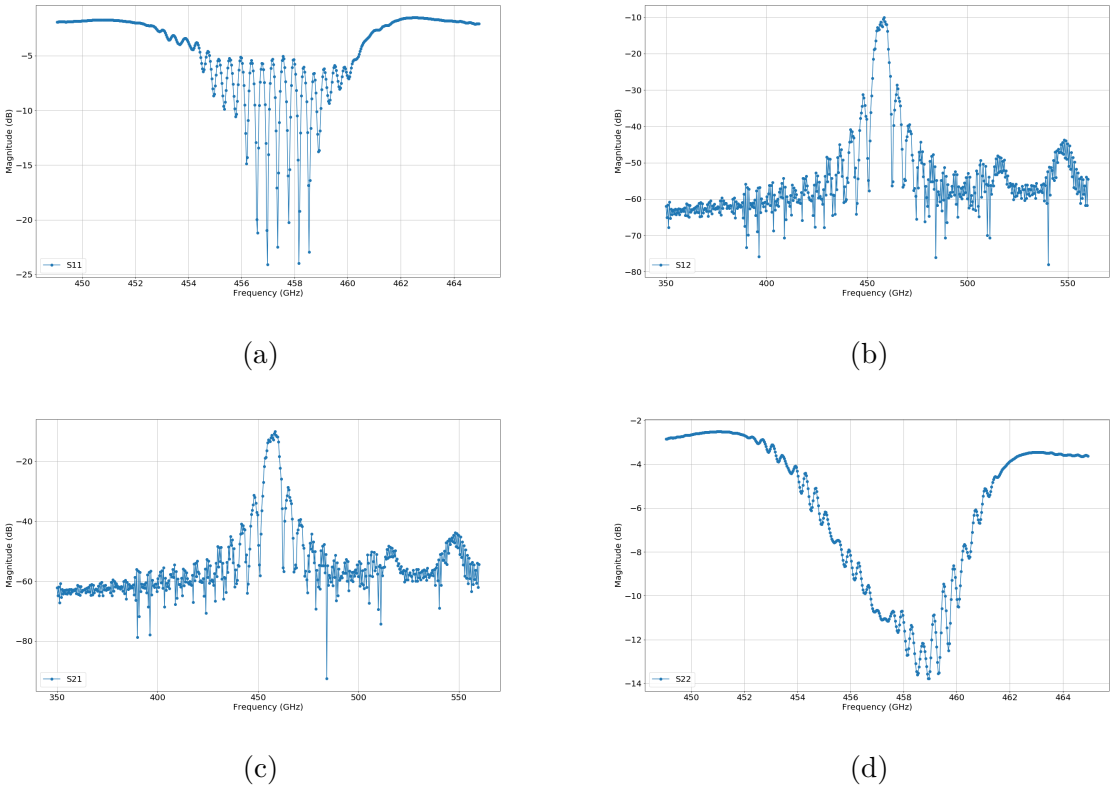
3.4 Medições em temperaturas ultrabaixas

Deseja-se estudar o comportamento dos parâmetros S em temperaturas ultrabaixas para futuros experimentos em LFDQ, onde serão incorporadas tecnologias SAW com cQED. Para isso, o porta-amostra contendo os dispositivos SAW foi colocado dentro de um criostato de diluição Hélio-3/Hélio-4, o qual atinge temperaturas de base de 10 mK. O porta-amostra foi conectado ao VNA para fazer as medições.

3.4.1 Setup Experimental

Utilizamos o criostato de diluição da figura 3.22a, que atingiu uma temperatura de cerca de 7 mK, sendo responsável por trabalhar com a mistura ^{3}He e ^{4}He para chegar a uma temperatura tão baixa. A física da mistura dos dois isótopos estáveis de hélio, quando resfriada abaixo de uma temperatura crítica, causa a separação em duas fases, como mostra o diagrama de fases da figura 3.22b.

As duas fases correspondem a uma fase concentrada, mais leve e rica em ^{3}He, e uma fase diluída, mais pesada e rica em ^{4}He. O diagrama mostra que a variação da temperatura determina a concentração de ^{3}He em cada fase. O ^{3}He evapora da fase concentrada para a diluída, pois sua entalpia nas duas fases é diferente, proporcionando uma maneira eficiente de resfriamento. De



(a) (b)

(c) (d)

Figura 3.21: Curvas dos parâmetros S encontradas experimentalmente com o auxílio de um analisador de rede. Essas curvas representam (a) S_{11} (b) S_{12} (c) S_{21} (d) S_{22}.

forma simplificada, a fase concentrada da mistura é quase composta apenas por ^{3}He, enquanto a fase diluída é composta por gás ^{3}He. O ^{4}He da fase diluída, que compõe a maior parte da mistura, é inerte e não interage, portanto, pode ser desprezado.

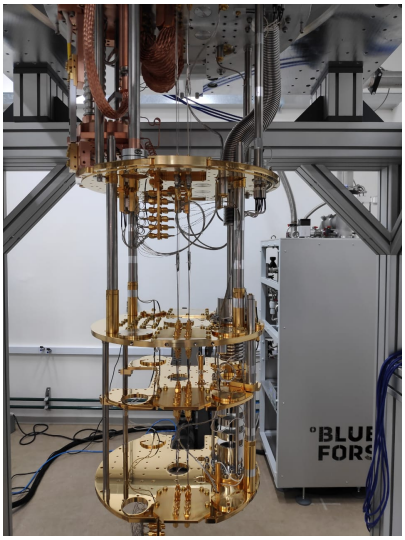
Para entender porque ocorre o resfriamento, leva-se em consideração a quantidade total de energia em um sistema termodinâmico, contabilizando tanto a energia interna quanto a pressão externa. A energia é descrita pela entalpia da função termodinâmica, que é formulada como:

$$H = U + PV \tag{3.4.1}$$

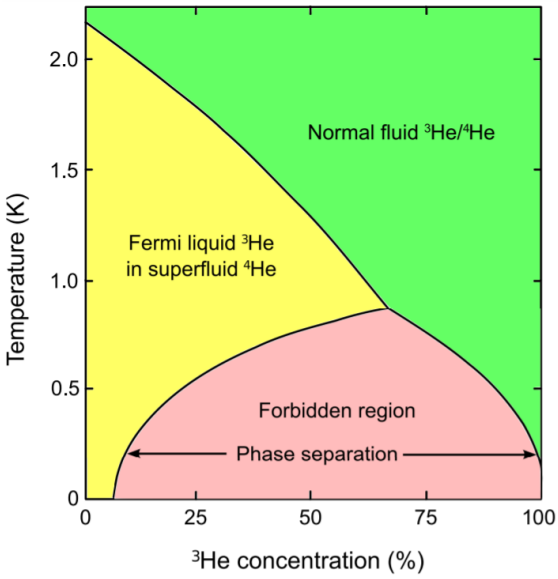
onde H é a entalpia, U é a energia interna, P é a pressão e V é o volume do sistema.

A evaporação de ^{3}He esfria a amostra porque a entalpia da fase líquida é maior que a da fase gasosa, cujo efeito continua acontecendo mesmo em temperaturas próximas de zero, dado que a concentração de equilíbrio de ^{3}He na fase diluída permanece finita.

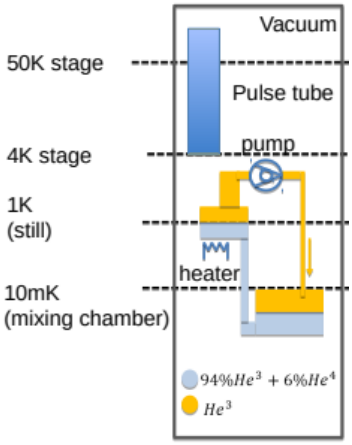
A Figura 3.22c apresenta o esquema de funcionamento do refrigerador. Durante a operação, o *1K pot* condensa a mistura de hélio na unidade de diluição. Embora a temperatura diminua,



(a)



(b)



(c)

Figura 3.22: (a) Diluidor de refrigeração utilizado para fazer as medias em ultra-baixas temperaturas.(b) Diagrama de fases da mistura de ^3He e ^4He. Adaptado de [94]. (c) Esquema dos principais componentes do refrigerador de diluição. Retirado de [94].

não é suficiente para atingir o limite de fase, atingindo apenas 1,2 K. A separação de fases ocorre quando a temperatura desce abaixo do ponto tri-crítico, situado em 0,86 K. O *still*, responsável por esse resfriamento, refrigera o ^{3}He que então entra nos *heat exchangers* e na *mixing chamber*.

O resfriamento prossegue gradualmente até que a temperatura da diluição alcance o ponto de separação de fases. Para a concentração adequada de ^{3}He e o volume total de hélio, o limite de fase ocorre dentro da *mixing chamber*, enquanto a superfície do líquido permanece no *still*. Caso a concentração e o volume não estejam adequados, o criostato não atingirá a temperatura base.

Para evitar a saturação, o ^{3}He deve ser removido da fase diluída e reintroduzido na fase concentrada. O processo continua com o bombeamento contínuo de ^{3}He para longe da superfície do líquido no *still*. Nesse ponto, a evaporação do ^{3}He ocorre aproximadamente 1000 vezes mais rápido que a do ^{4}He, atingindo uma temperatura em torno de 0,6 K. Um fluxo de ^{3}He concentrado retorna, passando por *heat exchangers*, enquanto o ^{3}He saindo da *mixing chamber* o resfria. Um sistema de bombeamento a vácuo, à temperatura ambiente, extrai o ^{3}He do *still* antes de comprimi-lo. Em seguida, o ^{3}He passa por filtros para remover impurezas, duas *coldtraps* em diferentes temperaturas (277 K e 4,2 K) e, finalmente, retorna ao criostato.

O banho de hélio principal resfria a mistura, condensando-a no *1k pot* por meio de um tubo capilar, aumentando suficientemente a pressão para a condensação do gás.

A *mixing chamber* é o local onde o porta-amostras é posicionado para garantir um contato térmico adequado [98, 94].

3.4.2 Resultados

A dependência da temperatura das ondas acústicas de superfície para um corte Y com rotação de 131° de $LiNbO_3$ foi estudada na referência [99], onde foi relatado um aumento de até ∼1% na velocidade de propagação da onda para valores de temperatura abaixo de ∼70 K, a partir da qual a velocidade estabilizou-se. Seguindo este trabalho, espera-se o mesmo aumento para a velocidade da onda em nosso sistema, em que a temperatura da medição foi de cerca de ∼10 mK.

Com o auxílio do Python, o máximo encontrado nessa curva foi em 463,32 MHz em comparação com 463,26 MHz em temperatura ambiente, uma diferença de aproximadamente 0,0123%. Contudo, as distorções causadas pelos atenuadores e amplificadores podem ter deslocado alguns picos, impedindo que a variação fosse tanto quanto o esperado.

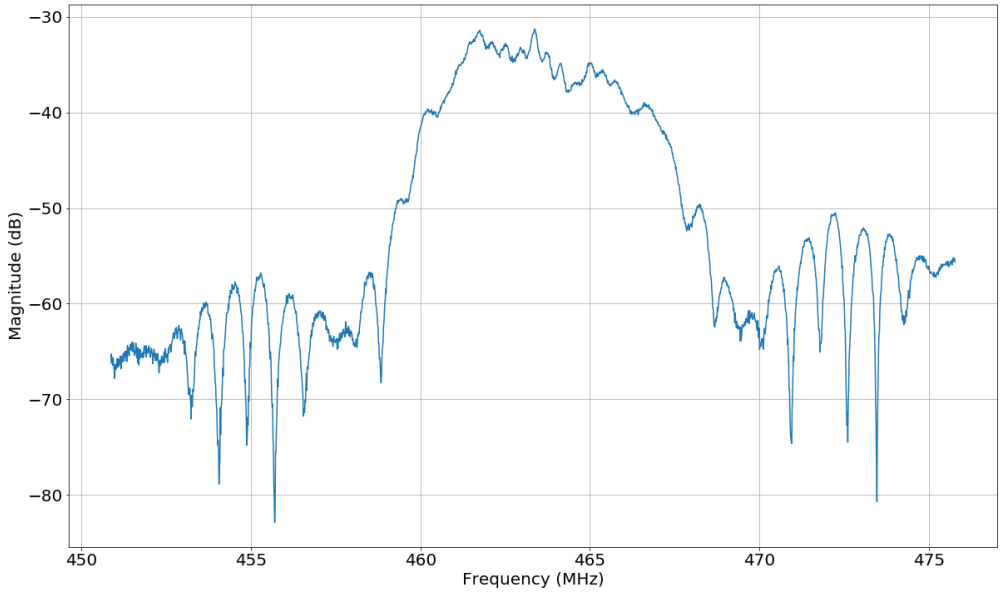


Figura 3.23: Gráfico da curva de S_{21} em temperaturas em torno de 10 mK. As distorções em comparação com a figura 3.21c se deve à inserção dos atenuadores e amplificadores.

3.5 Conclusão

Esse capítulo foi dedicado ao estudo da solução numérica da equação de onda, com foco no modo Rayleigh de propagação e com as condições de contorno dadas pelas características do dispositivo SAW. Iniciamos com uma breve explicação sobre o método dos elementos finitos, do *software Comsol* (responsável por efetuar os cálculos) e das condições de contorno iniciais. Os resultados foram dados, principalmente, na forma dos parâmetros S. As primeiras simulações foram feitas seguindo um modelo simples de uma célula unitária, com medidas apenas de S_{11}, por não haver um eletrodo para captar o sinal de saída. Também houve uma exploração das subdivisões (*mesh*) e das dimensões do dispositivo antes de partir para o modelo finito, para otimizar a simulação.

No modelo finito, além dos parâmetros relativos à reflexão serem calculados, também foi observado alguns efeitos físicos nos dispositivos, como a difração e múltiplos efeitos de trânsito. Foram avaliadas as condições em que esses efeitos amplificam com o aumento do número de dedos do IDT e a inserção do IDT de saída, assim como o aumento do sinal transmitido ao alocar os refletores nas adjacências do dispositivo.

Os resultados teóricos encontrados estavam em linha com o relatado na literatura experimental e, portanto, as propriedades e os efeitos físicos podem ser estudados de maneira que se tornou

viável projetar e analisar o funcionamento do dispositivo antes de fabricá-lo com uma grande precisão. Além disso, o estudo dos ressonadores já adianta parte do trabalho para a produção de dispositivos quânticos, pois essa configuração pode atuar como mediador para a interação entre qubits supercondutores.

Capítulo 4

Conclusão

O foco principal deste trabalho concentrou-se nos dispositivos de ondas acústicas de superfície. O Capítulo 2 proporcionou uma revisão teórica abrangente dos principais conceitos necessários, incluindo estresse (*stress*), deformação (*strain*), piezoeletricidade, lei de Hook e propagação de ondas em sólidos piezoelétricos. A partir dessas bases teóricas, introduzimos constantes físicas em forma de tensor que caracterizam sólidos piezoelétricos, como ZnO e $LiNbO_3$, ambos estudados neste projeto. Esse capítulo é fundamental para entender a formação das ondas acústicas de superfície e de onde os parâmetros surgem, de forma que se demonstre sua influência nos resultados obtidos.

Também detalhamos o que é um dispositivo de ondas acústicas de superfície e o caracterizamos por meio de simulações computacionais e experimentos, os quais forneceram resultados com menos de 1% de erro na comparação na velocidade de propagação das ondas, tanto com os valores relatados na literatura quanto no experimento feito em laboratório. Calculamos as frequências de geração de SAW em substratos piezoelétricos, velocidades de propagação, amplitudes de deslocamento, deformações, campos piezoelétricos e potenciais, bem como diversos efeitos físicos relacionados ao design dos dispositivos.

Além disso, investigamos os efeitos da adição de espelhos de Bragg nas proximidades dos dispositivos, visando aumentar a quantidade de sinal transmitido. A concordância entre o modelo teórico e experimental traz como vantagem a facilidade para projetar os dispositivos, alterando materiais que o compõem, dimensões e quantidade de dedos do IDT e do refletor de Bragg com versatilidade. A substituição dos materiais do substrato piezoelétrico determina a velocidade da onda acústica de superfície e a largura dos dedos, o comprimento de onda. A quantidade de dedos do IDT auxilia na transmissão de sinal ao custo de distorções na curva dos parâmetros S e a quantidade de dedos dos refletores de Bragg aumenta a transmissão através da reflexão do sinal

que é gerado na direção contrária do IDT de saída.

O desenvolvimento de dispositivos de ondas acústicas de superfície conectados a qubits supercondutores está previsto para trabalhos futuros no Laboratório de Física e Dispositivos Quânticos (LFDQ). Esse acoplamento medeia interações quânticas de longa distância com grande fidelidade [100], o que o torna essencial para a realização de processos quânticos. Os IDTs precisarão ser menores para melhorar o acoplamento com qubits supercondutores, aumentando a frequência dos dispositivos. Devido a esta redução de escala, devem ser utilizadas técnicas de produção modernas, como a litografia por feixe de elétrons (EBL), que produz estruturas com dimensões nanométricas e maior precisão do que as técnicas tradicionais de litografia óptica.

Esses desenvolvimentos têm como objetivo melhorar o desempenho e a eficiência dos dispositivos de ondas acústicas de superfície, ao mesmo tempo que criam uma estrutura experimental sólida para investigar novos regimes de física quântica e colocar em prática sistemas quânticos mais complexos. O desenvolvimento adicional e a caracterização completa destes dispositivos produzirão informações importantes e darão uma contribuição substancial à ciência e tecnologia dos dispositivos quânticos.

Referências

[1] Per Delsing et al. “The 2019 surface acoustic waves roadmap”. Em: *Journal of Physics D: Applied Physics* 52.35 (2019), p. 353001.

[2] Jacques Curie e Pierre Curie. “Développement par compression de l’électricité polaire dans les cristaux hémièdres à faces inclinées”. fre. Em: *Bulletin de Minéralogie* 3.4 (1880). Publisher: Persée - Portail des revues scientifiques en SHS, pp. 90–93. DOI: 10.3406/bulmi.1880.1564. URL: https://www.persee.fr/doc/bulmi_0150-9640_1880_num_3_4_1564 (acesso em 24/03/2020).

[3] Gabriel Lippmann. “Principe de la conservation de l’électricité, ou second principe de la théorie des phénomènes électriques”. Em: *Journal de Physique Théorique et Appliquée* 10.1 (1881), pp. 381–394.

[4] Jacques Curie e Pierre Curie. “Contractions et dilatations produites par des tensions électriques dans les cristaux hémièdres à faces inclinées”. Em: *Compt. Rend* 93 (1881), pp. 1137–1140.

[5] Richard M White. “Surface elastic waves”. Em: *Proceedings of the IEEE* 58.8 (1970), pp. 1238–1276.

[6] DS Ballantine Jr et al. *Acoustic wave sensors: theory, design and physico-chemical applications*. Elsevier, 1996.

[7] Jan Tich et al. *Fundamentals of piezoelectric sensorics: mechanical, dielectric, and thermodynamical properties of piezoelectric materials*. Springer Science & Business Media, 2010.

[8] Jeff T. Hill et al. “Coherent optical wavelength conversion via cavity optomechanics”. Em: *Nature Communications* 3.1 (jan. de 2012), p. 1196. ISSN: 2041-1723. DOI: 10.1038/ncomms2201. URL: http://www.nature.com/articles/ncomms2201.

[9] Leonardo Midolo, Albert Schliesser e Andrea Fiore. *Nano-opto-electro-mechanical systems*. Jan. de 2018. DOI: 10.1038/s41565-017-0039-1. URL: https://www.nature.com/articles/s41565-017-0039-1%20http://www.nature.com/articles/s41565-017-0039-1.

[10] Keith C Schwab e Michael L Roukes. "Putting mechanics into quantum mechanics". Em: *Physics Today* 58.7 (2005), pp. 36–42.

[11] K. Jacobs, A. N. Jordan e E. K. Irish. "Energy measurements and preparation of canonical phase states of a nano-mechanical resonator". en. Em: *Epl* 82.1 (2008), p. 18003. ISSN: 02955075. DOI: 10.1209/0295-5075/82/18003. URL: http://stacks.iop.org/0295-5075/82/i=1/a=18003.

[12] F. Massel et al. "Microwave amplification with nanomechanical resonators". Em: *Nature* 480.7377 (dez. de 2011), pp. 351–354. ISSN: 00280836. DOI: 10.1038/nature10628. URL: http://dx.doi.org/10.1038/nature10628.

[13] Markus Aspelmeyer, Pierre Meystre e Keith Schwab. "Quantum optomechanics". en. Em: *Physics Today* 65.7 (jul. de 2012), pp. 29–35. ISSN: 00319228. DOI: 10.1063/PT.3.1640. URL: http://scitation.aip.org/content/aip/magazine/physicstoday/article/65/7/10.1063/PT.3.1640.

[14] Ze Liang Xiang et al. "Hybrid quantum circuits: Superconducting circuits interacting with other quantum systems". Em: *Reviews of Modern Physics* 85.2 (abr. de 2013), pp. 623–653. ISSN: 15390756. DOI: 10.1103/RevModPhys.85.623. URL: http://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.85.623.

[15] K. Stannigel et al. "Optomechanical transducers for quantum-information processing". Em: *Physical Review A - Atomic, Molecular, and Optical Physics* 84.4 (out. de 2011), p. 042341. ISSN: 10502947. DOI: 10.1103/PhysRevA.84.042341. URL: http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.84.042341.

[16] Joerg Bochmann et al. "Nanomechanical coupling between microwave and optical photons". en. Em: *Nature Physics* 9.11 (nov. de 2013), pp. 712–716. ISSN: 17452481. DOI: 10.1038/nphys2748. URL: http://www.nature.com/nphys/journal/v9/n11/full/nphys2748.html.

[17] T. Bagci et al. "Optical detection of radio waves through a nanomechanical transducer". en. Em: *Nature* 507.7490 (mar. de 2014), pp. 81–85. ISSN: 14764687. DOI: 10.1038/nature13029. URL: http://www.nature.com/nature/journal/v507/n7490/full/nature13029.html.

[18] R. W. Andrews et al. “Bidirectional and efficient conversion between microwave and optical light”. Em: *Nature Physics* 10.4 (mar. de 2014), pp. 321–326. ISSN: 17452481. DOI: 10.1038/nphys2911. URL: http://arxiv.org/abs/1310.5276.

[19] A. N. Cleland e M. R. Geller. “Superconducting qubit storage and entanglement with nanomechanical resonators”. Em: *Physical Review Letters* 93.7 (ago. de 2004), p. 070501. ISSN: 00319007. DOI: 10.1103/PhysRevLett.93.070501. URL: http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.93.070501.

[20] L. Tian e S. M. Carr. “Scheme for quantum teleportation between nanomechanical modes”. Em: *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics* 74.12 (set. de 2006), p. 125314. ISSN: 10980121. DOI: 10.1103/PhysRevB.74.125314. URL: http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.74.125314.

[21] Mikael Kervinen, Ilkka Rissanen e Mika Sillanpää. “Interfacing planar superconducting qubits with high overtone bulk acoustic phonons”. Em: *Physical Review B* 97.20 (2018), p. 205443.

[22] Xu Han, Chang Ling Zou e Hong X. Tang. “Multimode Strong Coupling in Superconducting Cavity Piezoelectromechanics”. Em: *Physical Review Letters* 117.12 (set. de 2016), p. 123603. ISSN: 10797114. DOI: 10.1103/PhysRevLett.117.123603. URL: http://arxiv.org/abs/1604.06050.

[23] Krishna C. Balram et al. “Coherent coupling between radiofrequency, optical and acoustic waves in piezo-optomechanical circuits”. en. Em: *Nature Photonics* 10.5 (mai. de 2016), pp. 346–352. ISSN: 1749-4885, 1749-4893. DOI: 10.1038/nphoton.2016.46. URL: http://www.nature.com/articles/nphoton.2016.46 (acesso em 09/04/2020).

[24] G Wendin. “Quantum information processing with superconducting circuits: a review”. Em: *Reports on Progress in Physics* 80.10 (out. de 2017), p. 106001. ISSN: 0034-4885. DOI: 10.1088/1361-6633/aa7e1a. URL: http://stacks.iop.org/0034-4885/80/i=10/a=106001?key=crossref.c62bd2db0f55f28063f06e8a7f7e3c02.

[25] Maxim Goryachev et al. “Extremely low-loss acoustic phonons in a quartz bulk acoustic wave resonator at millikelvin temperature”. Em: *Applied Physics Letters* 100.24 (2012), p. 243504. DOI: 10.1063/1.4729292. eprint: https://doi.org/10.1063/1.4729292. URL: https://doi.org/10.1063/1.4729292.

[26] A. D. O'Connell et al. "Quantum ground state and single-phonon control of a mechanical resonator". Em: *Nature* 464.7289 (abr. de 2010), pp. 697–703. ISSN: 0028-0836. DOI: 10.1038/nature08967. URL: http://dx.doi.org/10.1038/nature08967 (acesso em 19/02/2012).

[27] Andrew N Cleland. *Foundations of nanomechanics: from solid-state theory to device applications*. Springer Science & Business Media, 2013.

[28] Tobias J Kippenberg e Kerry J Vahala. "Cavity optomechanics: back-action at the mesoscale". Em: *science* 321.5893 (2008), pp. 1172–1176.

[29] Miles Blencowe. "Quantum electromechanical systems". Em: *Physics Reports* 395.3 (2004), pp. 159–222.

[30] D. Mozyrsky e I. Martin. "Quantum-Classical Transition Induced by Electrical Measurement". Em: *Physical Review Letters* 89.1 (jun. de 2002), p. 018301. ISSN: 10797114. DOI: 10.1103/PhysRevLett.89.018301. URL: https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.89.018301.

[31] A. D. Armour, M. P. Blencowe e K. C. Schwab. "Entanglement and decoherence of a micromechanical resonator via coupling to a Cooper-pair box". Em: *Physical Review Letters* 88.14 (mar. de 2002), pp. 1–148301. ISSN: 00319007. DOI: 10.1103/PhysRevLett.88.148301. URL: http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.88.148301.

[32] D. Wahyu Utami e A. A. Clerk. "Entanglement dynamics in a dispersively coupled qubit-oscillator system". Em: *Physical Review A - Atomic, Molecular, and Optical Physics* 78.4 (out. de 2008), p. 042323. ISSN: 10502947. DOI: 10.1103/PhysRevA.78.042323. URL: http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.78.042323.

[33] A. D. Armour e M. P. Blencowe. "Probing the quantum coherence of a nanomechanical resonator using a superconducting qubit: I. Echo scheme". en. Em: *New Journal of Physics* 10.9 (set. de 2008), p. 095004. ISSN: 13672630. DOI: 10.1088/1367-2630/10/9/095004. URL: http://iopscience.iop.org/1367-2630/10/9/095004.

[34] Kevin Joseph Satzinger et al. "Quantum control of surface acoustic-wave phonons". Em: *Nature* 563.7733 (2018), pp. 661–665.

[35] Michael Möller et al. "Polarized recombination of acoustically transported carriers in GaAs nanowires". en. Em: *Nanoscale Research Letters* 7.1 (mai. de 2012), p. 247. ISSN: 1556-276X. DOI: 10.1186/1556-276X-7-247. URL: https://doi.org/10.1186/1556-276X-7-247 (acesso em 10/04/2020).

[36] S. Nadj-Perge et al. “Spin–orbit qubit in a semiconductor nanowire”. Em: *Nature* 468 (2010), p. 1084.

[37] Per Delsing et al. “The 2019 surface acoustic waves roadmap”. Em: *Journal of Physics D: Applied Physics* 52.35 (ago. de 2019), p. 353001. ISSN: 0022-3727. DOI: 10.1088/1361-6463/ab1b04. URL: https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1361-6463/ab1b04.

[38] S Büyükköse et al. “High-frequency acoustic charge transport in GaAs nanowires”. Em: *Nanotechnology* 25.13 (abr. de 2014), p. 135204. ISSN: 0957-4484. DOI: 10.1088/0957-4484/25/13/135204. URL: http://stacks.iop.org/0957-4484/25/i=13/a=135204?key=crossref.4a5054c12f2947feb7f7372df73ff6d1.

[39] Peidong Yang, Ruoxue Yan e Melissa Fardy. “Semiconductor nanowire: Whats Next?” Em: *Nano Letters* 10.5 (abr. de 2010), pp. 1529–1536. ISSN: 15306984. DOI: 10.1021/nl100665r.

[40] Sylvain Hermelin et al. “Electrons surfing on a sound wave as a platform for quantum optics with flying electrons”. Em: *Nature* 477.7365 (2011), pp. 435–438.

[41] R. P. G. McNeil et al. “On-demand single-electron transfer between distant quantum dots”. Em: *Nature* 477 (2011), p. 439.

[42] J. Rudolph, R. Hey e P. V. Santos. “Long-range exciton transport by dynamic strain fields in a GaAs quantum well”. Em: *Physical Review Letters* 99.4 (jul. de 2007), p. 047602. ISSN: 00319007. DOI: 10.1103/PhysRevLett.99.047602. URL: https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.99.047602.

[43] James A. H. Stotz et al. “Coherent spin transport via dynamic quantum dots”. Em: *Nature Materials* 4 (2005), p. 585.

[44] O. D. D. Couto, Jr. et al. “Anisotropic spin transport in (110) GaAs quantum wells”. Em: *Phys. Rev. Lett.* 98 (2007), p. 036603.

[45] O. D. D. Couto, Jr. et al. “Photon anti-buching in acoustically pumped quantum dots”. Em: *Nature Photonics* 3 (2009), p. 645.

[46] C. Brueggermann et al. “Laser mode feeding by shaking quantum dots in a planar microcavity”. Em: *Nature Photon.* 6 (2011), p. 30.

[47] D. A. Fuhrmann et al. “Dynamic modulation of photonic crystal nanocavities using gigahertz acoustic phonons”. Em: *Nature Photon.* 5 (2011), p. 605.

[48] D. A. Golter et al. “Optomechanical quantum control of a nitrogen-vacancy center in diamond”. Em: *Phys. Rev. Lett.* 116 (2016), p. 143602.

[49] M. J. A. Schuetz et al. “Universal quantum transducers based on surface acoustic waves”. Em: *Phys. Rev. X* 5 (2015), p. 031031.

[50] E. D. S. Nysten et al. “Multi-harmonic quantum dot optomechanics in fused LiNbO3–(Al)GaAs hybrids”. Em: *J. Phys. D: Appl. Phys* 50 (2017), 43LT01.

[51] Per Delsing et al. *The 2019 surface acoustic waves roadmap*. Ago. de 2019. DOI: 10.1088/1361-6463/ab1b04. URL: https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1361-6463/ab1b04.

[52] A. Hernández-Minguez et al. “Acoustically driven photon antibunching in nanowires”. Em: *Nanolett.* 12 (2012), p. 252.

[53] Daniel Royer e Eugene Dieulesaint. *Elastic waves in solids I: Free and guided propagation*. Springer Science & Business Media, 1999.

[54] Daniel Royer e Eugene Dieulesaint. *Elastic waves in solids II: generation, acousto-optic interaction, applications*. Springer Science & Business Media, 1999.

[55] Allan Cassio Trevelin Covacevice et al. “Modulation of planar optical microcavities by surface acoustic waves: Modulação de microcavidades ópticas planares por ondas acústicas de superficie”. Em: (2015).

[56] https://eng.libretexts.org/Bookshelves/Materials$_S$cience/Supplemental$_M$odules$_($Materials$_S$cience)/I Ago. de 2021.

[57] John Frederick Nye et al. *Physical properties of crystals: their representation by tensors and matrices*. Oxford university press, 1985.

[58] Ahmad Safari e E Koray Akdogan. *Piezoelectric and acoustic materials for transducer applications*. Springer Science & Business Media, 2008.

[59] John XJ Zhang e Kazunori Hoshino. “Mechanical transducers: Cantilevers, acoustic wave sensors, and thermal sensors”. Em: *Molecular Sensors and Nanodevices; Elsevier: Amsterdam, The Netherlands* (2019), pp. 311–412.

[60] RM White e FW Voltmer. “Ultrasonic surface-wave amplification in cadmium sulfide”. Em: *Applied Physics Letters* 8.2 (1966), pp. 40–42.

[61] Lord Rayleigh. “On waves propagated along the plane surface of an elastic solid”. Em: *Proceedings of the London mathematical Society* 1.1 (1885), pp. 4–11.

[62] Howard F McMurdie et al. “Standard X-ray diffraction powder patterns from the JCPDS research associateship”. Em: *Powder Diffraction* 1.2 (1986), pp. 64–77.

[63] Helen D Megaw. “A note on the structure of lithium niobate, LiNbO3”. Em: *Acta Crystallographica Section A: Crystal Physics, Diffraction, Theoretical and General Crystallography* 24.6 (1968), pp. 583–588.

[64] Akira Onodera e Masaki Takesada. “Ferroelectricity in simple binary crystals”. Em: *Crystals* 7.8 (2017), p. 232.

[65] Simone Sanna e Wolf Gero Schmidt. “LiNbO3 surfaces from a microscopic perspective”. Em: *Journal of Physics: Condensed Matter* 29.41 (2017), p. 413001.

[66] Jerry B Marion. *Classical dynamics of particles and systems*. Academic Press, 2013.

[67] Frank Kreith e Raj M Manglik. *Principles of heat transfer*. Cengage learning, 2016.

[68] David J Griffiths. *Introduction to electrodynamics*. 2005.

[69] Claude Cohen-Tannoudji, Bernard Diu e Frank Laloe. “Quantum Mechanics, Volume 1”. Em: *Quantum Mechanics* 1 (1986), p. 898.

[70] George B Arfken e Hans J Weber. *Mathematical methods for physicists*. 1999.

[71] Endre Süli. “Lecture notes on finite element methods for partial differential equations”. Em: *Mathematical Institute, University of Oxford* (2012).

[72] Leonhard Euler. *Introduction to analysis of the infinite: Book I*. Springer Science & Business Media, 2012.

[73] Miloš Zlámal. “On the finite element method”. Em: *Numerische Mathematik* 12.5 (1968), pp. 394–409.

[74] C. Multiphysics. “ver 5.4.(2018)”. Em: *Reference manual*. 2018.

[75] Ivo Babuška, Uday Banerjee e John E Osborn. “Generalized finite element methods—main ideas, results and perspective”. Em: *International Journal of Computational Methods* 1.01 (2004), pp. 67–103.

[76] Thirumalai Kannan. “Finite element analysis of surface acoustic wave resonators”. Tese de dout. 2006.

[77] Hercules G du Plessis e Willem J Perold. “Simulation of ZnO enhanced SAW gas sensor”. Em: *Proceed. Comsol Conf.* 2013.

[78] Clive Poole e Izzat Darwazeh. *Microwave active circuit analysis and design*. Academic Press, 2015.

[79] David Morgan. *Surface acoustic wave filters: With applications to electronic communications and signal processing*. Academic Press, 2010.

[80] Luca de Oliveira Trinchão. *Fabricação e caracterização de dispositivos unidirecionais para geração de ondas acústicas de superfície*. FAPESP Report of Grupo de Espectroscopia Acústica (Acoustic Espectroscopy Group) of IFGW-Unicamp. 2020.

[81] Johannes GE Gardeniers, ZM Rittersma e GJm Burger. "Preferred orientation and piezoelectricity in sputtered ZnO films". Em: *Journal of Applied physics* 83.12 (1998), pp. 7844–7854.

[82] Rodrigo Oliveira Tambellini. *Caracterização de filmes piezoelétricos de ZnO para dispositivos acústicos*. Comunicação Interna do Grupo de Propriedades Ópticas do IFGW-Unicamp. 2017.

[83] Paul Scherrer. "Bestimmung der Grosse und inneren Struktur von Kolloidteilchen mittels Rontgenstrahlen". Em: *Nach Ges Wiss Gottingen* 2 (1918), pp. 8–100.

[84] BE Warren. "X-ray diffraction Addison-Wesley". Em: *Reading, Mass* (1969).

[85] BD Cullity e SR Stock. "Elements of x-ray diffraction, Prentice Hall". Em: *Upper Saddle River, NJ* 388 (2001).

[86] Bilel Achour et al. "Modelling and simulation of SAW delay line sensors with COMSOL Multiphysics". Em: *MOL2NET 2018, International Conference on Multidisciplinary Sciences, 4th edition*. MDPI. 2018, p. 5887.

[87] D John Pradeep, N Rama Krishnan e Harshal B Nemade. "Simulation of unidirectional interdigital transducers in SAW devices using COMSOL multiphysics". Em: *Proceedings of the COMSOL Conference, Hannover, Germany*. 2008, pp. 4–6.

[88] MM Elsherbini, MF Elkordy e AM Gomaa. "Using COMSOL to model high frequency surface acoustic wave (SAW) device". Em: *Journal of Electrical and Electronics Engineering Research* 8.1 (2016), pp. 1–8.

[89] Zdravko P. Khlebarov, Any I. Stoyanova e Diana I. Topalova. "Surface acoustic wave gas sensors". Em: *International Journal of Computational Methods* 8 (1992), pp. 33–40.

[90] XY Du et al. "Surface acoustic wave induced streaming and pumping in 128 Y-cut LiNbO3 for microfluidic applications". Em: *Journal of Micromechanics and Microengineering* 19.3 (2009), p. 035016.

[91] XY Du et al. "ZnO film thickness effect on surface acoustic wave modes and acoustic streaming". Em: *Applied Physics Letters* 93.9 (2008), p. 094105.

[92] C. Multiphysics. "Rf module users guide version 4.3 a". Em: *COMSOL AB Stockholm*. 2012.

[93] Kentaro Nakamura. *Ultrasonic transducers: Materials and design for sensors, actuators and medical applications*. Elsevier, 2012.

[94] Andre Luiz Oliveira Bilobran. "Coupled Surface Acoustic Wave Cavities". Em: (2020).

[95] Baofa Hu et al. "Fabrications of L-band LiNbO3-based SAW resonators for aerospace applications". Em: *Micromachines* 10.6 (2019), p. 349.

[96] Diego Scolfaro da Silva. *Modulação Acústica de Nanoestruturas Semicondutoras*. Internal Comunication of Grupo de Espectroscopia Acústica (Acoustic Espectroscopy Group) of IFGW-Unicamp. 2018.

[97] JH Hines e DC Malocha. "A simple transducer equivalent circuit parameter extraction technique". Em: *1993 Proceedings IEEE Ultrasonics Symposium*. IEEE. 1993, pp. 173–177.

[98] Frank Pobell. *Matter and methods at low temperatures*. Vol. 2. Springer, 2007.

[99] Chong Sang Kim et al. "Temperature dependence of the elastic surface wave velocity on LiNbO3 and LiTaO3". Em: *Japanese Journal of Applied Physics* 13.1 (1974), p. 24.

[100] Wenbing Jiang et al. "Thin film aluminum nitride surface acoustic wave resonators for quantum acoustodynamics". Em: *Applied Physics Letters* 123.2 (2023).

[101] Charles Kittel e Paul McEuen. *Introduction to solid state physics*. Vol. 8. Wiley New York, 1976.

[102] Donald A Neamen. *Semiconductor physics and devices*. 1992.

[103] S Perera et al. "Nearly intrinsic exciton lifetimes in single twin-free Ga As/ Al Ga As core-shell nanowire heterostructures". Em: *Applied Physics Letters* 93.5 (2008), p. 053110.

[104] Richard Beaudry et al. "Photoreflectance study of phosphorus passivation of GaAs (001)". Em: *Journal of Applied Physics* 87.11 (2000), pp. 7838–7844.

[105] Abuduwayiti Aierken et al. "GaAs surface passivation by ultra-thin epitaxial GaP layer and surface As–P exchange". Em: *Applied surface science* 253.14 (2007), pp. 6232–6235.

[106] ODD Couto Jr et al. "Effect of a GaAsP shell on the optical properties of self-catalyzed GaAs nanowires grown on silicon". Em: *Nano letters* 12.10 (2012), pp. 5269–5274.

[107] Mohammad Montazeri et al. "Direct measure of strain and electronic structure in GaAs/-GaP core- shell nanowires". Em: *Nano letters* 10.3 (2010), pp. 880–886.

[108] PL Gourley e RM Biefeld. "Quantum size effects in GaAs/GaAs x P1- x strained-layer superlattices". Em: *Applied physics letters* 45.7 (1984), pp. 749–751.

Apêndices

Apêndice A Grupo de Pontos de Cristais

Um material cristalino tem um arranjo periódico de átomos. No entanto, em escalas macroscópicas, qualquer translação básica da rede pode ser considerada infinitesimal e, como consequência, o material parece ser contínuo, o que implica que podemos desprezar a influência da periodicidade. Mesmo assim, algumas propriedades físicas, incluindo a piezoeletricidade, ocorrem em algumas direções específicas, o que demonstra a relevância da anisotropia nesses efeitos físicos.

Contudo, devido à simetria dos materiais, existem propriedades que permanecem idênticas em diferentes direções. Isso permite a aplicação de operações de simetria que mantêm o estado macroscópico do cristal indistinguível. O conjunto de todas as operações de simetria de um cristal é chamado de grupo de pontos.

A própria periodicidade da rede limita sua simetria. Então, com algumas restrições no grupo de pontos, a rede pode ser classificada em 7 grupos cristalinos diferentes. Ainda assim, diferentes redes podem ter a mesma simetria e, para contemplá-las, os pontos podem ser distribuídos nas chamadas 14 redes de Bravais.

Ao adicionar átomos nos nós da rede, o cristal pode perder algumas operações de simetria comparando com o grupo de pontos de sua rede. O conjunto de todos os grupos de simetria que contabilizam a remoção de elementos de simetria fornece 32 classes de simetria de orientação cristalina, distribuídas entre os sete sistemas cristalinos.

A.1 Transformações de Pontos de Simetria

Existem dois elementos de transformação de simetria de pontos:

1. **Elemento de simetria direta:** algumas classes de cristais podem ser giradas em torno de um eixo por um ângulo de $2\pi/n$, onde n é um número inteiro que indica a ordem do cristal,

permanecendo geometricamente inalterado. Neste caso, diz-se que o cristal tem um eixo de rotação direta n vezes, que é denotado por A_n. Para uma ordem de n = 2, 3, 4 e 6, os eixos são chamados, respectivamente, de díade, tríade, tétrade e hexade.

2. **Elemento de simetria inversa:** esta é uma operação que pode ser:

   a. um centro de simetria (também chamado de inversão): a operação de simetria que inverte a posição de um ponto através de um segmento de reta que passa pelo centro.

   b. um eixo de rotação inverso: esta é uma combinação de uma rotação de 2π/n seguida por uma inversão através de um ponto no eixo que deixa o cristal inalterado, e é denotado por $\overline{A}_n$ para um eixo de rotação inverso n vezes. Esta operação pode ser representada por um produto comutativo:

$$\overline{A}_n = A_n \cdot C = C \cdot A_n \tag{A.1.1}$$

Existem alguns casos particulares que dão origem a operações equivalentes. Por exemplo, um plano de espelho, também chamado de plano de simetria, é um eixo inverso 2 vezes ($\overline{A}_2 \equiv M$) e uma inversão é o mesmo que um eixo inverso 1 ($\overline{A}_1 \equiv C$).

Projeção Estereográfica

A projeção estereográfica é uma representação planar de operações mais complexas que mapeiam pontos de uma esfera em pontos em seu plano equatorial, como mostra a figura A.1.

Na figura, **N** é o pólo norte e **S** é o pólo sul. O ponto $P(\mathbf{Q})$ no hemisfério norte(sul) é representado pelo ponto $p(\mathbf{q})$, que é a interseção do segmento de reta $\overline{PS}(\overline{QN})$ com o equatorial plano E. Observe que os pontos são representados por uma cruz ou um ponto dentro de um círculo, dependendo se são uma projeção do hemisfério norte ou sul, respectivamente.

O eixo $\overline{NS}$ é escolhido para ser o eixo de maior simetria e sempre que houver um centro de simetria, ele está localizado no centro da esfera. As construções geométricas são representadas por linhas tracejadas, enquanto as projeções reais usam linhas sólidas.

A.2 Sistemas Cristalinos

Qualquer cristal é formado por um conjunto repetitivo de células paralelepipédicas, cujas propriedades de simetria de periodicidade de rede [53] são:

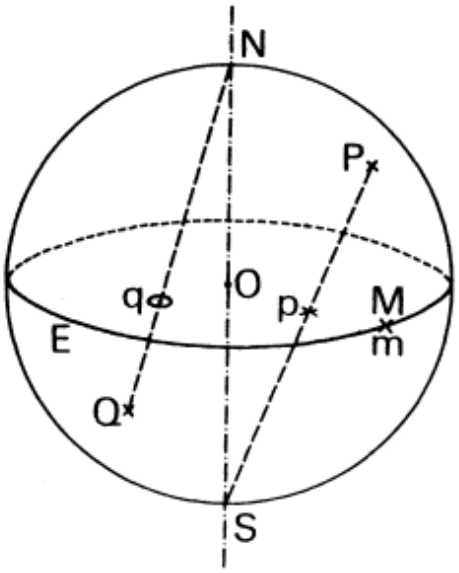


Figura A.1: Projeção estereográfica. Os pontos p e q são originários da intersecção do plano equatorial E com os segmentos de reta $\overline{SP}$ e $\overline{NQ}$ respectivamente. Esses pontos são representados por uma cruz se o segmento de reta partir do polo sul (ponto S) ou com um ponto no meio de um círculo se o segmento de reta partir do polo norte (ponto N). Retirado de [53].

1. uma linha reta passando por um nó e paralela a um eixo *n-fold* da rede é um eixo *n-fold*;
2. um eixo de simetria passando por um nó é uma linha da rede;
3. um nó da rede é um centro de simetria;
4. um eixo de simetria com ordem n maior que dois implica a presença de n eixos da díade;
5. os eixos diretos ou inversos de uma rede só podem ser de ordem 1, 2, 3, 4 ou 6.

As classes de simetria de pontos que são consistentes com a periodicidade da rede estão listadas abaixo: [53]:

1. um centro de simetria C define a classe mais simples;
2. se um eixo de díade é adicionado a C, há um espelho perpendicular M que implica a simetria: $\frac{A_2}{M}C$;
3. adicionar outro eixo de díade implica em três eixos de díade em ângulos retos A_2, A_2' e A_2''. Por outro lado, o centro de simetria implica na existência de três planos de espelho M, M' e M" perpendiculares aos eixos, então a simetria é:

$\frac{A_2}{M}\frac{A'_2}{M'}\frac{A''_2}{M''}C$;

4. se uma rede tem 3 eixos de tríade A_3, ela também deve ter três eixos de díade A'_2 e três planos de espelho M' por causa de seu centro de simetria, então temos:
   $A_3\frac{3A'_2}{3M'}C$;

5. um eixo *4-fold* tem uma equivalência em base alternada com eixos de díade, fornecendo:
   $\frac{A_4}{M}\frac{2A'_2}{2M'}\frac{2A''_2}{2M''}C$;

6. também os eixos da díade podem ser agrupados alternadamente com o eixo *6-fold* A_6:
   $\frac{A_6}{M}\frac{3A'_2}{3M'}\frac{3A''_2}{3M''}C$;

7. a simetria cúbica possui a maior simetria, que inclui:

   (a) quatro eixos da tríade A_3 nas diagonais do cubo;

   (b) perpendicular às faces, existem três eixos tetrad A_4;

   (c) seis diads eixos A'_2 conectando arestas opostas;

   (d) um centro de simetria e consequentemente planos de espelho perpendiculares aos eixos A_4 e A'_2.

Com base na simetria de ponto da rede, sete sistemas cristalinos são usados para classificar os cristais por sua rede, de modo que, se houver alguns cristais pertencentes à mesma simetria de grupo de pontos, sua rede terá a mesma simetria de pontos.

Rede de Bravais

A rede cristalina mais simples do sistema cristalino é a célula primitiva (P), onde os pontos estão localizados nos vértices dos paralelepípedos periódicos, formando a menor unidade de uma rede [101]. Adicionar alguns nós à rede primitiva dos sistemas cristalinos às vezes pode levar à mesma simetria de ponto, mesmo que a rede mude. Os locais possíveis para pontos extras para manter a simetria de pontos podem ser no centro da célula, que leva à célula de corpo centrado (I), ou no centro de todas as faces, gerando a rede de face centrada (F) e mesmo no centro de apenas duas faces para um outro tipo de rede de face centrada (C).

A adição de nós não pode ser feita em todos os sistemas porque, em alguns casos, modifica a célula, conduzindo-a para o mesmo tipo de rede. Dessa forma, a figura A.2 mostra todas as maneiras possíveis que adicionar nós não implica em redundância, onde cada maneira possível é

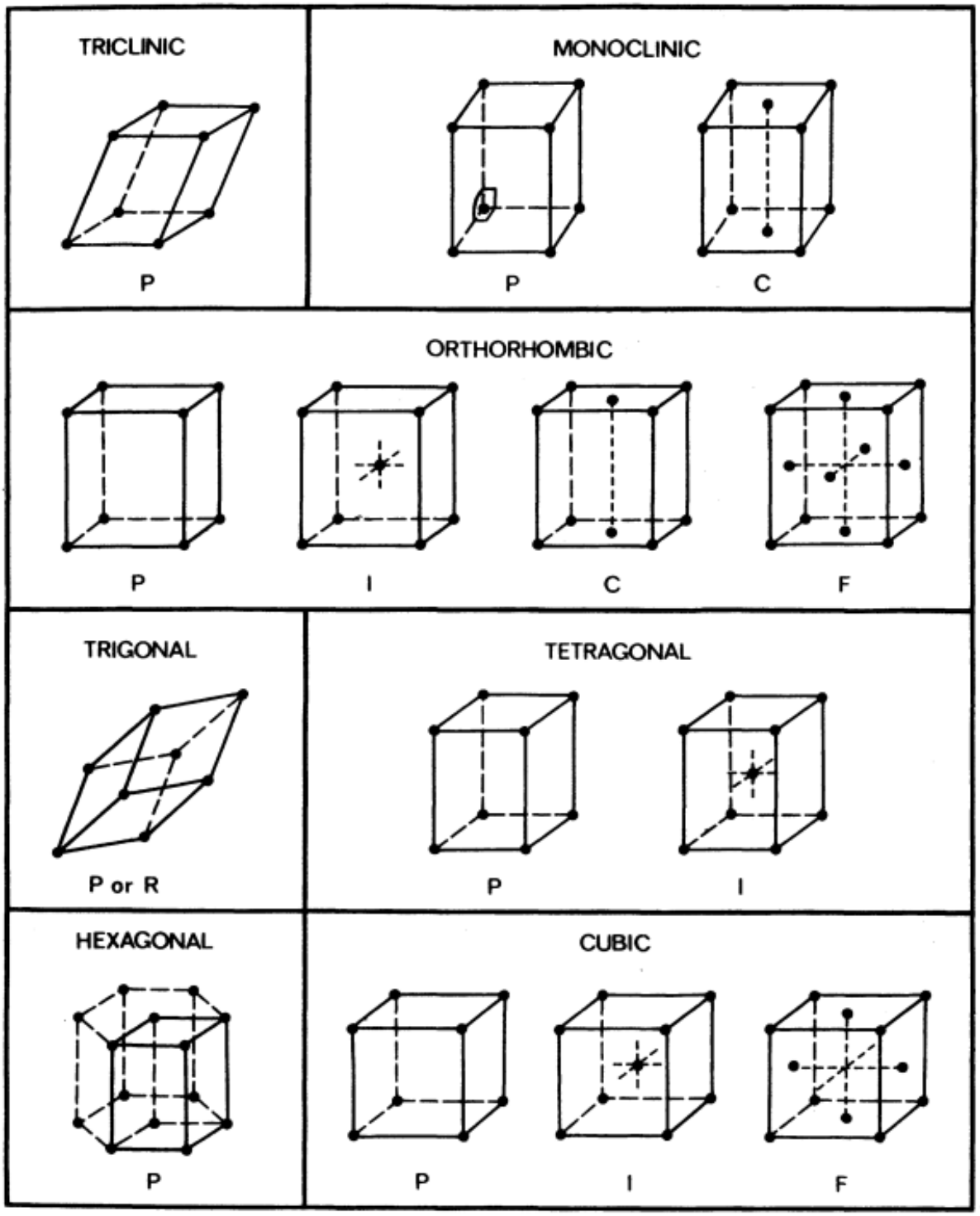


Figura A.2: Os sete sistemas cristalinos com as quatorze redes de Bravais. Retirado de [53].

agrupada com sua respectiva simetria de grupo de pontos. Isso leva às quatorze redes de Bravais distribuídas entre os sete sistemas de cristais.

A.3 Classes de simetria de pontos de cristais

Quando os átomos que compõem o cristal são distribuídos aos nós da rede, a simetria pode ser quebrada. Isso significa que a simetria do cristal é, no máximo, a mesma de sua rede. A simetria de um cristal é obtida pela remoção sucessiva de elementos não essenciais, como mostra a figura A.3, também nomeando cada classe.

Um resumo das classes de simetria de trinta e dois pontos de cristais é mostrado abaixo, com seu símbolo da projeção estereográfica.

1. Triclínica: classe $\overline{1}$;
   - deletando o centro de simetria, resultará em nenhuma simetria: classe 1;
2. Monoclínica: a simetria $\frac{A_2}{M}C$ é denotada como classe 2/m;
   - mantendo o eixo da díade: classe 2;
   - retendo o plano do espelho: classe m;
3. Ortorrômbico: simetria $\frac{A_2}{M}\frac{A'_2}{M'}\frac{A''_2}{M''}C$ é denotado como classe mmm;
   - mantendo os três eixos da díade: classe 222;
   - mantendo o eixo da díade A_2 e os planos de espelho M' e M": classe 2mm;
4. Trigonal: a partir da simetria $A_3\frac{3A'_2}{3M'}C$, temos:
   - removendo o centro de simetria, as classes $A_3 3A_2$ (denotado 32) e $A_3 3M'$ (denotado 3m);
   - removendo as três díades A'_2, o que implica em remover os dois planos espelhados M' e M", temos $A_3C = \overline{A}_3$: classe $\overline{3}$;
   - removendo C: classe A_3 (denotado 3);
5. Tetragonal: tem as simetrias de rede $\frac{A_4}{M}\frac{2A'_2}{2M'}\frac{2A''_2}{2M''}C$ ou $\frac{\overline{A}_4}{M}\frac{2A'_2}{2M'}\frac{2A''_2}{2M''}C$.
   (a) Retirando o centro de simetria, as situações possíveis são:
      - mantendo os eixos da díade: $A_4 2A'_2 2A''_2$: classe 422;

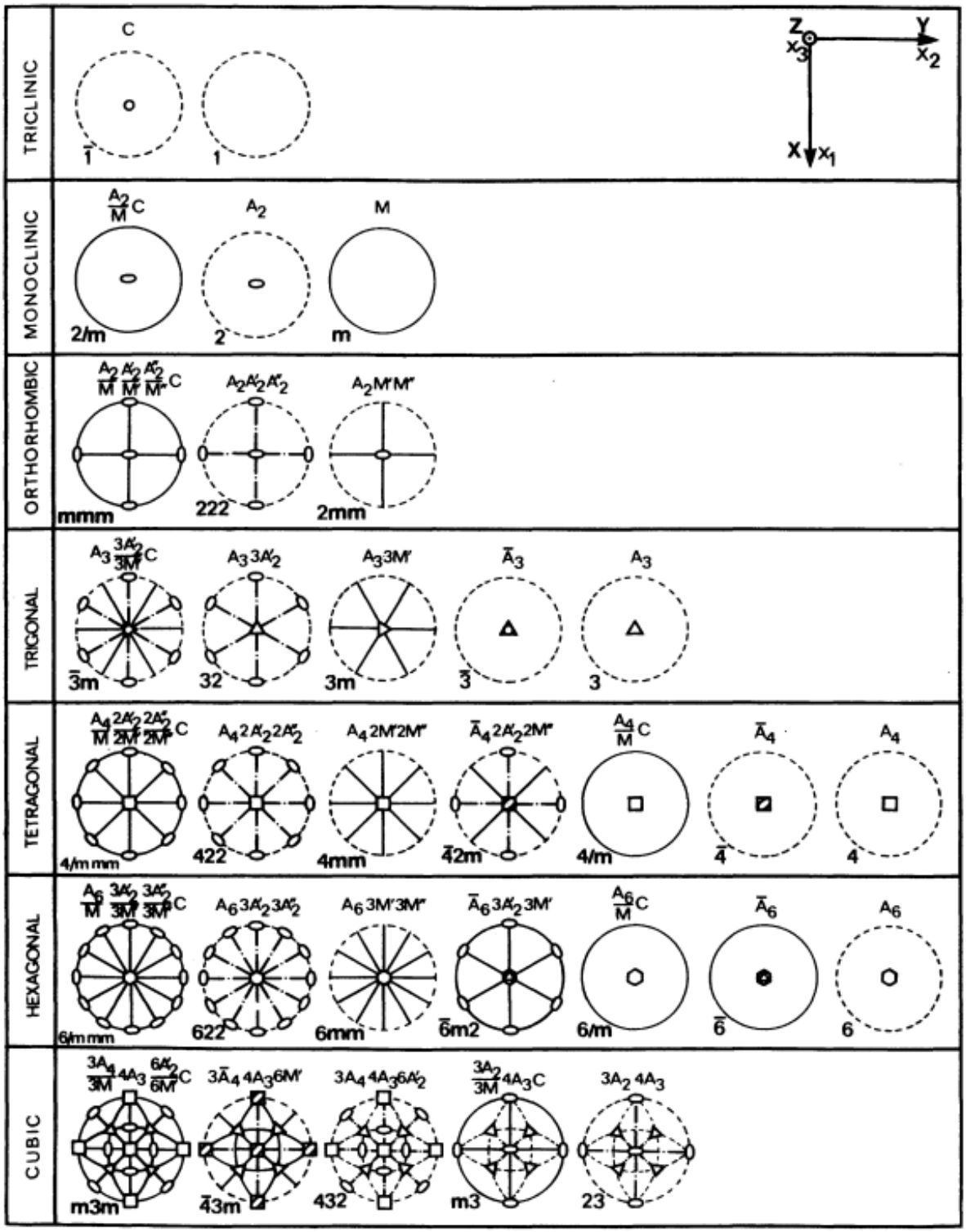


Figura A.3: As classes de simetria de pontos dos cristais. Retirado de [53].

- mantendo os planos do espelho: $A_4 2M' 2M''$: classe 4mm;
- mantendo um eixo de díade e um plano de espelho: $\overline{A}_4 2A'_2 2M''_2$: class $\overline{4}2m$;
- removendo todos os elementos, os casos restantes são A_4 para a classe 4 e $\overline{A}_4$ para a classe $\overline{4}$;

(b) mantendo o centro de simetria, existe o caso $\frac{A_4}{M}C$, que corresponde à classe 4/m;

6. Hexagonal: pode ser feito as mesmas considerações do que no caso tetragonal. As simetrias das redes são $\frac{A_6}{M}\frac{3A'_2}{3M'}\frac{3A''_2}{3M''}C$ ou $\frac{\overline{A}_6}{M}\frac{3A'_2}{3M'}\frac{3A''_2}{3M''}C$.

(a) Retirando o centro de simetria, as situações possíveis são:

- mantendo os eixos da díade: $A_6 3A'_2 3A''_2$: classe 622;
- mantendo os planos do espelho: $A_6 3M' 3M''$: classe 6mm;
- mantendo um eixo de díade e um plano de espelho: $\overline{A}_6 3A'_2 3M''_2$: classe $\overline{6}2m$;
- removendo todos os elementos, os casos restantes são A_6 para a classe 6 e $\overline{A}_6$ para a classe $\overline{6}$;

(b) mantendo o centro de simetria, existe o caso $\frac{A_6}{M}C$, que corresponde à classe 6/m;

7. Cúbico: a simetria é $\frac{3A_4}{3M}4A_3\frac{6A'_2}{6M}C$ ou $\frac{3\overline{A}_4}{3M}4A_3\frac{6A'_2}{6M}C$

- removendo o centro de simetria, as classes $3A_4 4A_3 6A'_2$ (denotado 432) e $3\overline{A}_4 4A_3 6M'$ (denotado $\overline{4}3m$);
- com os quatro eixos da tríade, a simetria é $3A_2 4A_3$: classe 23;
- somando o centro de simetria C: simetria $A\frac{3A_2}{3M}4A_3C$: classe m3.

A.4 A relação linear de causa e efeito em cristais

As propriedades de um cristal como efeito de uma causa podem ser descritas com relações lineares entre elas. Em um meio anisotrópico, uma causa aplicada em uma determinada direção geralmente produz um efeito em outra direção.

Seja e_i o efeito na direção i e c_j a causa na direção j, com i e j variando de 1 a 3. Então, eles podem ser conectados pela relação $e_i = A_{ij}c_j$, onde A_{ij} são os 9 coeficientes necessários para compor a relação linear como característica do material e e_i é o efeito da causa c_j. O subíndice j repetido na expressão do lado direito é devido a convenção de soma de Einstein sobre j.

A.5 Simetria de Cristais

Em um sistema de coordenadas $Ox_1x_2x_3$, os componentes $A_{...ijk...}$ de um tensor que descreve uma propriedade física de um cristal podem ser expressos em outra orientação pelos componentes $A'_{...ijk...}$ aplicando uma matriz de transformação α. Por outro lado, $A'_{...ijk...}$ pode ser transformado em $A_{...ijk...}$ aplicando a matriz de transformação inversa $\mathbf{S}^{-1}$. Então, nós temos:

$$A_{...ijk...} = ...\alpha_i^p \alpha_j^q \alpha_k^r ... A'_{...pqr...} \tag{A.5.1}$$

Um cristal pode manter suas propriedades físicas macroscópicas após uma operação de simetria de seu grupo de pontos, o que significa que $A'_{...ijk...} = A_{...ijk...}$. Esta afirmação sugere que podemos reduzir o número de elementos independentes nos tensores.

A.5.1 Matrizes de Transformação de Simetria de Pontos

Na seção A.1, foi dito que os elementos de simetria pontuais de um cristal são o eixo direto ou inverso, o plano do espelho e o centro de simetria. A matrizes de transformação que leva os vetores de base $\mathbf{e}_k$ a uma nova base $\mathbf{e}'_i$ pela relação $\mathbf{e}'_i = \alpha_i^k \mathbf{e}_k$ é representada como:

$$\alpha = \begin{bmatrix} \alpha_1^1 & \alpha_1^2 & \alpha_1^3 \\ \alpha_2^1 & \alpha_2^2 & \alpha_2^3 \\ \alpha_3^1 & \alpha_3^2 & \alpha_3^3 \end{bmatrix} \tag{A.5.2}$$

As matrizes de transformação de simetria de pontos podem ser expressas como:

- Rotação φ em torno do eixo Ox_3:

$$\alpha_{x_3,\varphi} = \begin{bmatrix} cos\varphi & sin\varphi & 0 \\ -sin\varphi & cos\varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \tag{A.5.3}$$

- Centro de simetria em torno de um ponto na origem:

$$\alpha_c = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \tag{A.5.4}$$

- Eixo de rotação inverso de ordem n: vem da relação $\bar{A}_n = A_n \cdot C$, o que implica que $\bar{\alpha}_{x_3,2\pi/n} = \alpha_{x_3,2\pi/n} \cdot \alpha_c$.

- Plano de simetria (espelho) perpendicular ao eixo Ox_3:

$$\alpha_{M\perp x_3} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \tag{A.5.5}$$

A.6 Ausência de centro de simetria

Como foi dito na equação A.5.4, a matriz para a transformação do centro de simetria é dada por $\alpha^i_j = -\delta_{ij}$, onde δ_{ij}, o delta de Kronecker, é igual a 0 para $i \neq j$ e 1 para $i = j$. Então, a equação A.5.1 se torna:

$$A_{...ijk...} = ...\delta^p_i \delta^q_j \delta^r_k ... A'_{...pqr...} = (-1)^n A_{...ijk...} \tag{A.6.1}$$

onde n é o posto tensorial. Segue-se que, para n ímpar, $(-1)^n = -1$, implicando que os componentes são todos zero. Isso significa que uma propriedade física é representada por um tensor centrossimétrico de rank ímpar está ausente. Para o tensor piezoelétrico, n = 3, então:

$$d_{ijk} = \delta^p_i \delta^q_j \delta^r_k d'_{pqr} = (-1)^3 d_{ijk} = -d_{ijk} \tag{A.6.2}$$

Portanto, $d_{ijk} = 0$. Existem onze classes centrossimétricas de cristais que, como foi determinado pela equação acima, não se qualificam para serem piezoelétricos, são:

$$\bar{1},\ 2/m;\ mmm,\ \bar{3},\ \bar{3}m,\ 4/m,\ 4/mmm,\ 6/m,\ 6/mmm,\ m3\ e\ m3m.$$

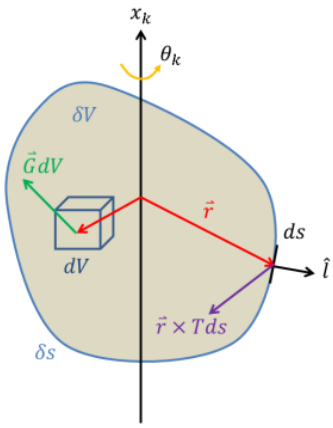


Figura B.1: Nessa figura é representado os elementos necessários para entender o motivo de T_{ij} ser simétrico. Nela, temos δV representando o elemento de volume dentro de um objeto de área δs. Por fim, θ_k representa a rotação em torno do eixo Ox_k causada por um torque na forma de uma tração. Retirado de [55].

Apêndice B Simetria do Tensor de Stress

A figura B.1 esquematiza a rotação local de um pedaço de volume δV. A rotação acontece em torno do eixo Ox_k por um ângulo θ_k, com momento de inércia I_k. Suponha que uma tração $\vec{T}$ seja aplicada. Então, o torque em uma posição $\vec{r}$ é dado por:

$$(\vec{r} \times \vec{T})_k = \epsilon_{ijk} x_i T_j \tag{B.1}$$

em que o tensor ϵ_{ijk} denota o tensor antissimétrico, ou seja, ele vale 1 para uma permutação par de i, j e k; -1 para uma permutação ímpar de i, j e k e 0 se pelo menos dois índices forem iguais.

Os componentes do torque M_k são calculados considerando que todo o entorno do volume δV se encontra tracionado em todas as direções pelo material, resultando em uma integral sobre a superfície δs, ou seja:

$$M_k = \int_{\delta_s} \epsilon_{ijk} x_i T_j ds_m \tag{B.2}$$

Através da definição dada em 2.1.15b, a equação anterior é reescrita como:

$$M_k = \int_{\delta_s} \epsilon_{ijk} x_i T_{jm} l_m ds \tag{B.3}$$

Para transformar essa equação sobre uma área em uma equação sobre um volume, escrevemos:

$$M_k = \sum_{m=1}^{3} \int_{\delta_V} \frac{\partial(\epsilon_{ijk} x_i T_{jm} l_m)}{\partial x_m} dV = \sum_{m=1}^{3} \int_{\delta_V} \left(\epsilon_{ijk} x_i \frac{\partial T_{jm}}{\partial x_m} + \epsilon_{ijk} \frac{\partial x_i}{\partial x_m} T_{jm} \right) dV \tag{B.4}$$

Como x_i e x_m são coordenadas independentes, $\partial x_i / \partial x_m = \delta_{ij}$, ou seja:

$$M_k = \sum_{m=1}^{3} \int_{\delta_V} \left(\epsilon_{ijk} x_i \frac{\partial T_{jm}}{\partial x_m} + \epsilon_{ijk} \delta_{im} T_{jm} \right) dV = \sum_{m=1}^{3} \int_{\delta_V} \left(\epsilon_{ijk} x_i \frac{\partial T_{jm}}{\partial x_m} + \epsilon_{ijk} T_{ji} \right) dV \tag{B.5}$$

Definimos o momento de inércia como:

$$I_k = \int_{\delta_k} \rho r^2 dV \tag{B.6}$$

para que a equação de movimento, considerando a aplicação de um torque externo de densidade volumétrica τ_k, seja escrita como:

$$I_k \frac{\partial^2 \theta_k}{\partial t^2} = \sum_{m=1}^{3} \int_{\delta_V} \left(\epsilon_{ijk} x_i \frac{\partial T_{jm}}{\partial x_m} + \epsilon_{ijk} T_{ji} + \tau_k \right) dV \tag{B.7}$$

Na equação anterior, as integrais que dependem das coordenadas espaciais se tornam desprezíveis na medida em que $\delta V \to 0$, podendo ser reescrita como:

$$\epsilon_{ijk} T_{ji} + \tau_k = T_{ji} - T_{ij} + \tau_k = 0 \tag{B.8}$$

Se não houver torque externo, isso é, $\tau_k = 0$, então:

$$T_{ij} = T_{ji} \tag{B.9}$$

Dessa forma, prova-se que o T_{ij} é simétrico.

Apêndice C

Fotolitografia e Lift-off

Essas etapas consistem na inserção dos IDTs no substrato piezoelétrico para finalizar a fabricação do dispositivo SAW, com a fotolitografia imprimindo o molde dos IDTs e o lift-off a metalização dos mesmos. A figura C.1 mostra o funcionamento do processo. O substrato é revestido com HMDS e colocado no *spinner* por 40s a 5000 rpm para que a rotação espalhe o material, depois a amostra ficou 1 minuto secando. Essa parte serve para melhorar a aderência do fotorresiste com o substrato. Em seguida, o substrato foi revestido uniformemente com fotorresiste AZ5214, também com o auxílio do *spinner* rotacionando a 5000 rpm por 40 s. Essa etapa é mostrada na parte superior da figura, em vermelho junto ao wafer em cinza. Depois há um tratamento térmico do fotorresiste, em que o substrato é colocado no *hot plate* a 110 °C por 2 minutos, para endurecer o fotorresiste.

A próxima etapa consiste em "modelar"o fotorresiste com a máscara, cujo molde foi mostrado na figura 3.19. A máscara é feita de vidro (parte branca da figura) e cromo (parte preta da figura) de maneira que a luz passa onde o metal não está depositado e a parte hachurada do fotorresiste é atingida pela luz, com o formato desejado da figura a ser impressa. Assim, aloca-se a máscara na superfície do fotorresiste com o auxílio usando um alinhador de máscara.

É enviado, então, luz ultravioleta para sensibilizar o fotorresiste por 18 s, com o auxílio de uma alinhadora de máscara Karl Suss MJB3, no LPD (Laboratório de Pesquisa em Dispositivos) no IFGW - Unicamp. Todo o substrato é submerso em solução reveladora, constituída de 1 parte de revelador (AZ400) para 4 partes de água, por 35 s. A partir daí, há duas opções possíveis: se o fotorresiste for negativo, as partes sensibilizadas do fotorresistente permanecem intactas e o restante é removido, mantendo o mesmo padrão da imagem da máscara na superfície. No caso se ser positivo, assim como o que foi usado nesse projeto, a parte sensibilizada é removida e o padrão da máscara coincide com a parte removida.

Por fim, o substrato e o fotorresiste são cobertos por uma camada de material condutor, no caso o alumínio, com um evaporador e-beam e, assim, a parte em que ainda há fotorresiste é removida ao mergulhar o wafer em acetona, de maneira que o alumínio que não está em contato com o substrato é retirado em conjunto. Dessa forma, a parte metalizada mantém o desenho da

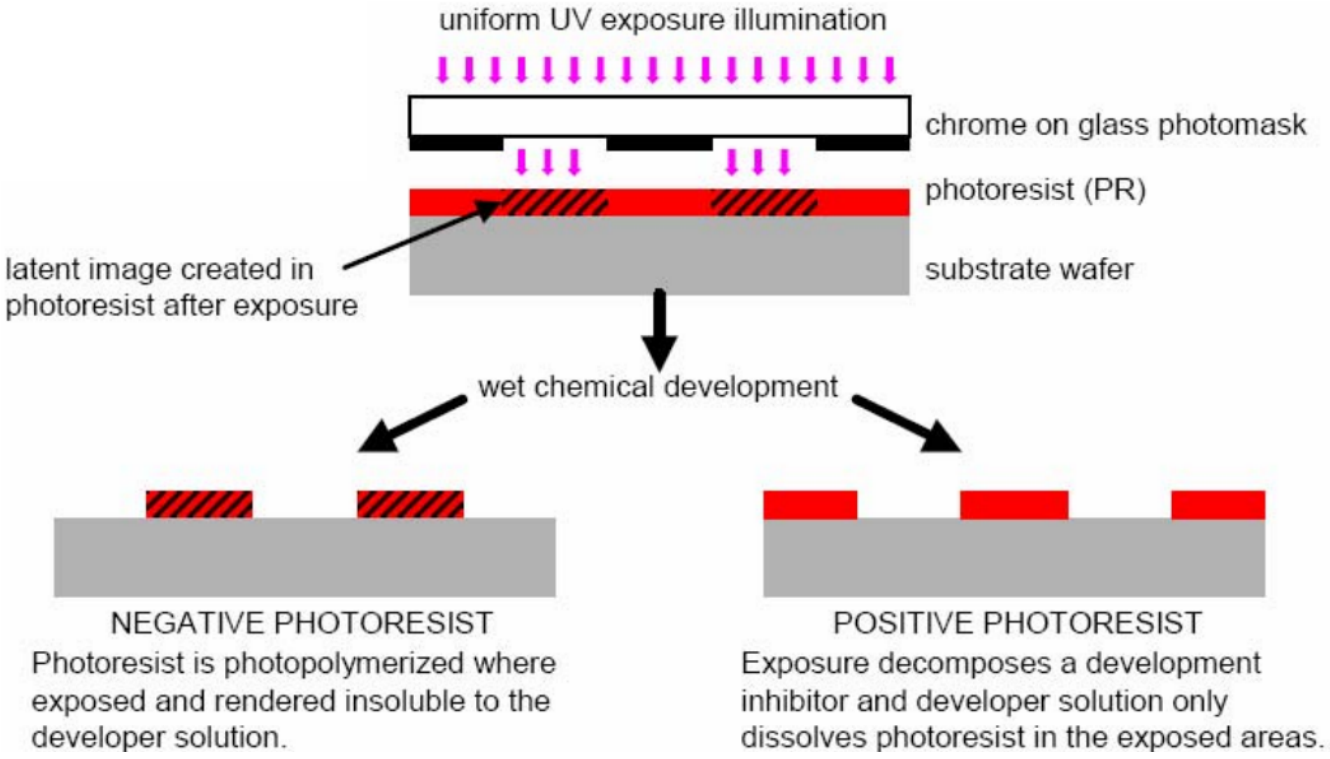


Figura C.1: Esquematização do processo de fotolitografia. A luz ultravioleta passa pelo vidro e é barrada nas partes que contém cromo, de maneira que ela atinge o fotorresiste mantendo o padrão da parte em que não há cromo, ou seja, o desenho da máscara a ser impresso. O fotorresiste dessa parte é sensibilizado e, se for negativo, é insolúvel em substância reveladora e ele permanece na superfície do material. Do contrário, se for positivo, como é o caso do AZ5247, o fotorresiste é retirado da parte que foi sensibilizada.

máscara na superfície.

Apêndice D Fotoluminescência de nanofios semicondutores

Este apêndice aborda o estudo de nanofios semicondutores GaAs/GaAsP a fim de iniciar os trabalhos para juntá-los com dispositivos SAW para investigar o deslocamento espacial do sinal

de fotoluminescência. Essa integração permite o estudo detalhado da interação entre nanofios semicondutores e ondas acústicas, proporcionando conhecimentos valiosos sobre o comportamento fotônico em escala nanométrica.

A emissão espontânea de luz em átomos ocorre com a transição de elétrons de um nível de energia maior para um nível de energia menor. A partir do momento que a emissão é consequência de uma absorção de um fóton de maior energia, o processo é chamado de fotoluminescência. Essa propriedade ocorre em materiais semicondutores. Tais materiais são uma classe cuja condutividade fica entre metais e isolantes [102] formados em um meio cristalino. A estrutura eletrônica deste tipo de material possui um gap de energia proibido que separa os estados livres e ocupados (figura D.1). Esses materiais podem ser formados por moléculas cujo átomos se encontram nos grupos 13 e 15 da tabela periódica, como é o caso do arseneto de gálio (GaAs). Nesse caso, é dito que se trata de um semicondutor do tipo III-V.

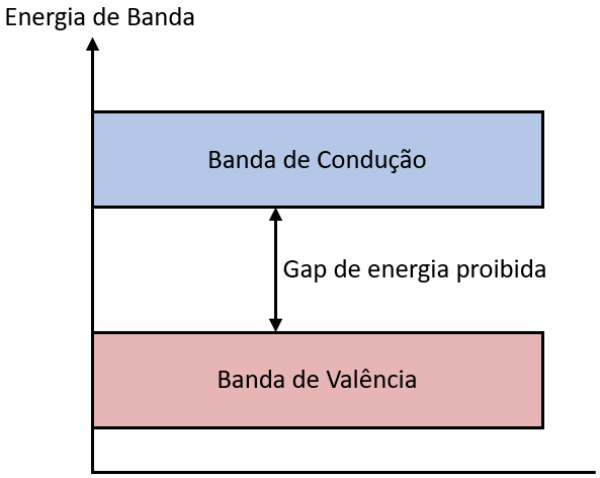


Figura D.1: Gap de energia proibido separando estados livres e ocupados de bandas de condução e valência.

D.1 Confinamento quântico

Os nanofios são um arranjo cuja geometria, dado o seu diâmetro nanométrico, influencia na estrutura de bandas do material, levando a estados de energia discretos e, consequentemente, alterações nas propriedades ópticas e eletrônicas do material. Essas alterações são causadas pelo efeito de confinamento quântico, que será abordado nessa seção.

A dependência das propriedades físicas dos cristais de tamanhos macroscópicos, como exemplo sua coloração, normalmente não se alteram com a variação de seu tamanho. Contudo, cristais

com dimensões de poucos nanômetros sofrem o efeito de confinamento quântico, o qual altera suas propriedades ópticas. Para que se tenha uma noção da dimensão em que tal efeito se faz presente, suponha que uma partícula está confinada em uma localização x de comprimento Δx. A incerteza do momento, pelo princípio da incerteza de Heinsenberg, é:

$$\Delta p_x \sim \frac{\hbar}{\Delta x} \tag{B.1}$$

em que Δp_x é a incerteza do momento e $\hbar$ é a constante de Planck reduzida.

O confinamento na direção x adiciona uma energia cinética média E_c cuja magnitude é:

$$E_c = \frac{(\Delta p_x)^2}{2m} \sim \frac{\hbar^2}{2m(\Delta x)^2} \tag{B.2}$$

Para que a energia do confinamento seja significante, deve possuir magnitude comparável ou maior à energia térmica proveniente da movimentação das partículas na direção x. Isso acontece como resultado de níveis de energia quantizados que surgem do confinamento quântico, os quais se tornam aparentes quando estão na mesma escala da energia térmica. Dessa forma:

$$E_c = \frac{\hbar^2}{2m(\Delta x)^2} \sim \frac{1}{2}k_B T \tag{B.3}$$

com k_B representando a constante de Boltzmann e m a massa da partícula. A energia cinética média do confinamento será relevante em relação a energia térmica se as dimensões do nanofio forem pequenas o suficiente ao ponto de serem comparáveis com a incerteza de Heinsenberg. Portanto, elas precisam estar dentro da restrição:

$$\Delta x \lesssim \sqrt{\frac{\hbar^2}{mk_B T}} \tag{B.4}$$

Com essa restrição, para um elétron de um semicondutor, temos que $\Delta x \lesssim 5$ nm na temperatura ambiente. Valores muito maiores não apresentarão efeitos quânticos e são considerados como semicondutores bulk. Além disso, o critério B.4 nos diz que Δx deve ser comparável com o comprimento de onda de de Broglie $\lambda_B \equiv h/p_x$, em que h é a constante de Planck.

D.2 Nanofios de *core-shell* GaAs/GaAsP

As fases blenda de zinco e wurtzita coexistem em nanofios de arseneto de gálio (GaAs). Durante a síntese de nanofios, as diferentes circunstâncias dão origem a esta distinção estrutural de forma que, ao longo do comprimento do nanofio, há uma transição entre as duas estruturas. As propri-

(a) (b)

Figura D.2: Alinhamento de bandas de (a) um nanofio de GaAs em que, ao longo de seu comprimento, há a formação de estruturas cristalinas de blenda de zinco e wurtzita, com desalinhamento de banda entre elétrons e buracos, o que produz uma "barreira"que impede o transporte de carga pelas SAW. Em (b), um nanofio de *core-shell* de GaAs/GaAsP em que a estrutura é puramente de blenda de zinco ao longo do raio, o que possibilita o transporte de carga por toda a extensão do nanofio. Retirado de [106].

edades elétricas e ópticas do material podem ser bastante afetadas por falhas de empilhamento causadas por esta variação estrutural ao longo do nanofio.

Os nanofios em que as medidas do sinal de fotoluminescência foram feitas eram formados de um núcleo de arseneto de gálio (GaAs) na parte central e passivado por uma liga de arseneto de gálio com fósforo (GaAsP). Essa liga confere uma energia de gap maior que o material sem passivação e, assim, o sinal de fotoluminescência do nanofio é intensificado, pois a passivação suprime o escape de portadores de carga de maneira não radiativa via estados de superfície [103]. Em comparação com a passivação de AlGaAs, a com GaAsP possui menor densidade de estados de superfície e menor propensão à oxidação [104, 105].

A figura D.2b compara o alinhamento de banda entre o nanofio de GaAs puro (figura D.2a) e com passivação (figura D.2b). Os nanofios desencapados emitem o sinal PL na faixa de energia 1,40-1,52 eV [106], refletindo o alinhamento de banda tipo II ao longo da direção de crescimento do nanofio, como mostra a figura D.2a. Essa é uma característica de segmentos de blenda de zinco (ZB) e wurtzita (WZ) em materiais III-V. Nesse caso, os elétrons são confinados no mínimo da banda de condução na estrutura ZB e os buracos no máximo da banda de valência da estrutura WZ. Por outro lado, a estrutura passivada possui a banda do tipo I ao longo do raio, com emissão de PL com energia em torno de 1,56 eV. A energia é maior ao comparar com a emissão nas estruturas de ZB e WZ dos nanofios desencapados indica que eles estão tensionados devido à diferença de parâmetro de rede do núcleo de GaAs e da estrutura passivada de GaAsP [107, 108].

D.3 Fabricação

O substrato de fabricação dos nanofios de $GaAs/GaAs_{1-x}P_x$ foi Si(111), em que x = 0.15 indicando uma concentração nominal de 15% de fósforo. O crescimento dos nanofios foi feito usando um Veeco Gen930 MBE que forneceu o Gálio junto com válvulas de célula de cracker Veeco, as quais fornecem o arsênico (As_4) e o fósforo (P_2). A temperatura foi calibrada de maneira que o núcleo dos nanofios fossem cultivados a 640 °C e em seguida, houve o resfriamento da amostra até 500 °C para suceder com a passivação. A estrutura em torno do núcleo possui espessura nominal de 70 nm. Nanofios sem passivação também foram fabricados, mantendo a temperatura em 635 °C.

No artigo [106] foram feitas imagens por microscopia eletrônica de varredura de alta resolução (SEM) dos nanofios, onde mostrou-se a diferença das estruturas com a passivação e sem a passivação. A partir dela, constatou-se que os comprimentos dos nanofios estavam na faixa de 1-3 μm, com diâmetros variando entre 50 a 120 nm para as estruturas passivadas e 30 a 80 nm para as estruturas não passivadas. Essa variação depende da posição do nanofio em relação ao centro do *waffer*.

Também foram feitas imagens por microscopia eletrônica de transmissão de alta resolução (TEM) em um nanofio individual de GaAs/GaAsP, com o auxílio de um microscópio TEM JEM 2100 (200 kV), nas quais foi mostrado uma parte do nanofio em cuja ponta notou-se defeitos de empilhamento, em que se observa o *twinning* dos planos cristalinos de ZB. Em outra figura na parte central, evidenciou-se a partir de um tratamento com a transformada rápida de Fourier (FFT) um padrão de pontos da estrutura de ZB.

D.4 Fotoluminescência

D.4.1 Setup Experimental

A figura D.3 mostra o aparato experimental para produzir os resultados da fotoluminescência (PL). O laser envia um sinal luminoso (indicado pela semirreta vermelha) em direção ao *beam splitter*, o qual é responsável por refletir o sinal em direção à lente objetiva (semirreta amarela). Essa, por sua vez, focaliza o feixe em um *spot* de alguns micrômetros de diâmetro para incidir sobre os nanofios, os quais absorvem a luz. Em seguida, os nanofios emitem o sinal luminoso, chamado de fotoluminescência (PL), que passa pelo *beam splitter* novamente, mas dessa vez segue em direção ao espectrômetro e na câmera CCD, medindo a intensidade da PL em função do comprimento de onda. Na figura, há a presença do criostato para manter os nanofios em baixas temperaturas ($\sim$

4 K), temperatura essa em que a PL é emitida com maior intensidade, e do gerador de RF, para ativar o dispositivo SAW.

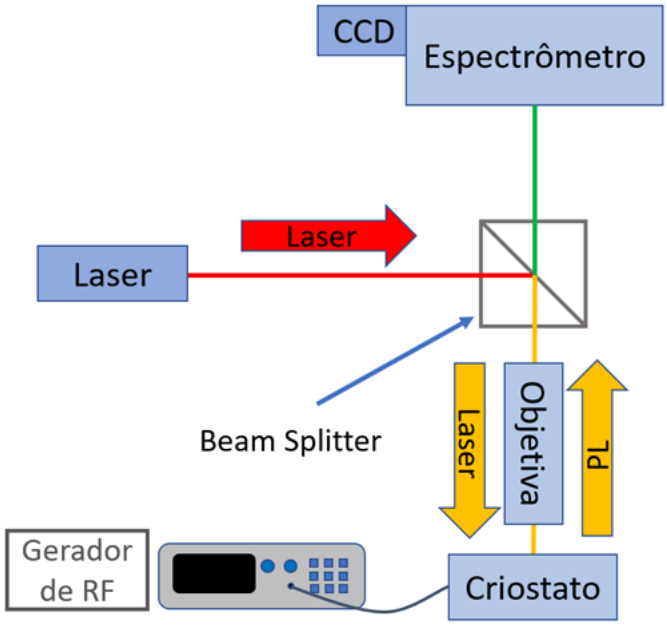
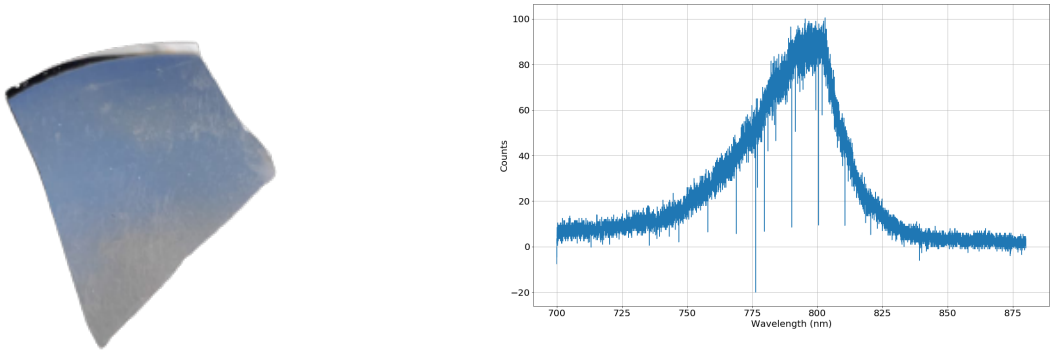


Figura D.3: Setup experimental no qual o laser envia o sinal luminoso, o qual atinge o *beam splitter* e é refletido em direção à lente objetiva, a qual focaliza o feixe de luz para um *spot* de alguns micrômetros. Esse feixe atinge o nanofio no criostato, e o sinal de fotoluminescência segue o caminho inverso do feixe de luz, passando pela lente objetiva, atravessando o *beam splitter* e chegando ao espectrômetro e à câmera CCD, registrando os resultados encontrados do espectro de luz emitido. Por fim, o gerador de RF excita o dispositivo SAW com os nanofios depositados, para que seja possível diferenciar a distribuição espacial da PL nas situações em que o dispositivo está ativado ou não e observar o que houve com o transporte de cargas.

D.4.2 Medições

Foram feitas medidas da fotoluminescência emitida em nanofios de GaAs/GaAsP crescidos por epitaxia de feixe molecular (MBE), os quais foram doados pelo Prof. Dr. Alexander Tartakovskii da Universidade de Sheffield. Os nanofios estavam em um substrato de GaAs (figura D.4a). Eles apresentam uma boa qualidade cristalina (majoritariamente na estrutura de blenda de zinco) o que, com o acréscimo da passivação, é capaz de emitir sinal de fotoluminescência com ganho de três ordens de grandeza em relação a estruturas não passivadas, inclusive emitindo sinal em temperatura ambiente. Outro efeito observado pela passivação é o desvio do sinal de PL para o azul (*blueshift*) em relação ao sinal medido em ambas as estruturas ZB e WZ GaAs, o que é



(a) (b)

Figura D.4: (a) Substrato de GaAs onde os nanofios de GaAs/GaAsP foram crescidos. As regiões alaranjadas possuem uma maior concentração de nanofios. (b) Sinal de fotoluminescência captado de um nanofio individual.

esperado para materiais com núcleo tensionado, apesar da presença de uma grande superfície livre das nanoestruturas e uma baixa concentração de fósforo [106].

Foi feito o processo de raspagem do substrato de GaAs para que os nanofios fossem passados para um substrato de Si com uma camada de alumínio. Dessa forma, eles ficaram em baixa densidade, permitindo a focalização do feixe de laser em um nanofio individual. O laser utilizado possui 488 nm de comprimento de onda e a potência que incidiu na amostra foi de 300 μW, com tempo de aquisição de dados de 10 s. A coleta de dados foi feita duas vezes para que fosse feita uma média com os dados e tratamento dos mesmos. Dessa forma, alguns picos de alta intensidade relativos aos raios cósmicos foram retirados das medidas. Os resultados estão mostrados na figura D.4b. Nota-se que a intensidade do sinal de fotoluminescência é máximo para um comprimento de onda de cerca de 800 nm, na região do infravermelho.

D.5 Conclusão

O efeito de confinamento quântico ocorre em um nanofio semicondutor devido às suas dimensões radiais, como foi mostrado na primeira seção do capítulo. São objetos com essas características que foram usados para o estudo do sinal de fotoluminescência desenvolvido nesse capítulo. Os nanofios GaAs/GaAsP fornecem um ambiente de pesquisa bastante interessante devido à fotoluminescência intensificada em comparação aos nanofios de GaAs, chegando ao ponto de poder ser medida em temperatura ambiente. Além disso, em comparação com a passivação de AlGaAs, existem menos estados de superfície (o que diminui a intensidade do sinal) e uma menor propensão à oxidação,

características que justificam o uso desses nanofios para futuras pesquisas, devido à sua melhor qualidade.