

Università Cattolica del Sacro Cuore

Sede di Brescia

Facoltà di Scienze Matematiche, Fisiche e Naturali

Corso di Laurea in Fisica



STUDIO DI UN SENSORE MOLECOLARE BASATO SU ONDE
ACUSTICHE DI SUPERFICIE IN MATERIALI
NANOSTRUTTURATI

Relatore:

Dr. FRANCESCO BANFI

Correlatore:

Dr. GABRIELE FERRINI

Laureando:

ELISA ZAGATO

Matricola 3403573

Anno Accademico 2008/2009

*A nonno Mario,
per non aver mollato mai.*

Indice

Indice	I
Introduzione	1
1 Surface Acoustic Waves: descrizione e metodi di rilevamento	3
1.1 SAW	3
1.1.1 Caratteristiche generali di un onda elastica nella materia	3
1.1.2 Rilevanza applicativa delle SAW	7
1.2 Metodi di rilevamento delle SAW	8
1.2.1 I sensori Elettro-Acustici	8
1.2.2 I Sensori Opto-Acustici	11
1.2.3 Confronto tra sensori elettro- ed opto-acustici	13
2 Modelli	15
2.1 Cristallo fononico	15
2.2 I modelli proteici	19
2.2.1 Modello a Strato Equivalente	20
2.2.2 Modello a Densità Equivalente	22
3 Ottimizzazione del dispositivo	27
3.1 Configurazione A	28

3.2	Configurazione B	31
3.3	Competitività del sensore opto-acustico	32
4	Conclusioni	34
4.1	Sviluppi Futuri	36
	Simboli	37
	Bibliografia	40

Introduzione

La crescente richiesta di guide d'onda acustiche ipersoniche in grado di generare onde acustiche coerenti e ultraveloci da utilizzare in trasduttori nano-opto-acustici ha prodotto intensi sforzi di ricerca nel campo dei metamateriali acustici. I metamateriali acustici sono materiali artificiali progettati in modo tale da essere provvisti di alcune proprietà non immediatamente disponibili in natura. Questi materiali solitamente ricavano le loro proprietà non tanto dalla loro composizione chimica, quanto piuttosto dalla loro struttura inhomogenea. In questo contesto assumono particolare rilevanza i cristalli fononici di superficie, i quali, sfruttando le oscillazioni acustiche confinate in prossimità della superficie e potendo avere periodicità inferiori ai 100 nm, hanno ottime potenzialità come trasduttori ad alta frequenza.

Il presente lavoro di tesi si sviluppa nel contesto dei metamateriali acustici: mi propongo di studiare un sensore di massa acusto-ottico per impieghi biologici. Il sensore di massa in questione è un cristallo fononico costituito da un blocco di silicio spesso $100\ \mu\text{m}$ sul quale vengono poste strisce di alluminio di altezza 5 nm. La periodicità del superreticolo così formato è $P = 1\ \mu\text{m}$. Quando un impulso laser di durata temporale dell'ordine di 100 fs ed energia per impulso dell'ordine di 10 nJ, detto di pump, scalda impulsivamente le strisce di alluminio, l'espansione termica che ne segue genera nel substrato un'onda, localizzata prevalentemente sulla superficie, di lunghezza d'onda $\lambda = P$, cioè pari alla periodicità del sistema. Misurando l'intensità del fascio diffratto dal cristallo fononico di un secondo impulso laser meno intenso del primo, impulso di probe, che incide sul cristallo con un

ritardo fissato rispetto al precedente, si può seguire la dinamica dell'onda acustica [1] e risalire alla sua frequenza.

L'aggiunta di una perturbazione nel sistema, quale ad esempio può essere uno strato di proteine, diminuisce la frequenza di oscillazione dell'onda localizzata in superficie [2, 3], che chiameremo onda *pseudo-SAW* [4], e permette di risalire alla massa depositata sulla struttura. La frequenza dell'onda pseudo-SAW è stata calcolata implementando la teoria sviluppata da Nardi et al. [4] su COMSOL [5], un software che utilizza il metodo degli elementi finiti (*FEM*). Abbiamo considerato il cristallo fononico come una struttura bidimensionale suddivisa in celle lunghe $P = 1 \mu\text{m}$ e, dopo aver analizzato il comportamento del cristallo privo di strato proteico, abbiamo proposto e confrontato tra loro due modelli proteici: il modello a *Strato Equivalente* e il modello a *Densità Equivalente*. Successivamente ci siamo dedicati a studiare l'ottimizzazione del dispositivo cercando le condizioni geometriche che rendono il sistema più sensibile a una variazione di massa, sia modificando la larghezza della striscia di alluminio, sia discutendo le modalità di posizionamento della proteina sul cristallo fononico.

Capitolo 1

Surface Acoustic Waves: descrizione e metodi di rilevamento

1.1 SAW

1.1.1 Caratteristiche generali di un onda elastica nella materia

L'equazione del moto che regola il campo degli spostamenti di un mezzo elastico (cioè gli spostamenti dei punti rispetto alla posizione 'a riposo'), d'ora in avanti denotato con il displacement $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$, è l'equazione di Navier [4],

$$\partial_j [c_{ijmn}(\mathbf{r}) \partial_n u_m] = \rho(\mathbf{r}) \ddot{u}_i, \quad (1.1)$$

dove $\rho(\mathbf{r})$ e $c_{ijmn}(\mathbf{r})$ sono rispettivamente la densità volumetrica di massa e il tensore di elasticità; si assume la convenzione di somma sugli indici ripetuti. Se consideriamo una dipendenza armonica dal tempo $e^{i\omega t} + c.c.$, l'equazione 1.1 diventa

l'equazione agli autovalori

$$\partial_j [c_{ijmn}(\mathbf{r}) \partial_n u_m] = -\rho(\mathbf{r}) \omega^2 u_i . \quad (1.2)$$

Consideriamo il caso di un cristallo di Si infinitamente esteso. In tal caso il tensore c_{ijmn} e la densità ρ sono indipendenti dalla posizione \mathbf{r} . Ricordiamo inoltre che il Si è un cristallo a simmetria cubica. Sotto queste condizioni l'equazione vettoriale 1.2 si riduce al seguente set di equazioni scalari [6] :

$$-\rho\omega^2 u_x = c_{xxxx} \frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} + c_{xyxy} \left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_x}{\partial z^2} \right) + (c_{xxxx} + c_{xyxy}) \left(\frac{\partial^2 u_y}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial x \partial z} \right)$$

$$-\rho\omega^2 u_y = c_{xxxx} \frac{\partial^2 u_y}{\partial y^2} + c_{xyxy} \left(\frac{\partial^2 u_y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial z^2} \right) + (c_{xyxy} + c_{xyxy}) \left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial y \partial z} \right)$$

$$-\rho\omega^2 u_z = c_{xxxx} \frac{\partial^2 u_z}{\partial y^2} + c_{xyxy} \left(\frac{\partial^2 u_z}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial y^2} \right) + (c_{xyxy} + c_{xyxy}) \left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial x \partial z} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial y \partial z} \right)$$

L'onda può propagare lungo diverse direzioni. Cerchiamo le soluzioni del set di equazioni sopra riportato con vettore d'onda \mathbf{k} lungo la direzione Si(100). Prendendo l'asse x lungo la direzione Si(100) si ha $\mathbf{k}=k_x \mathbf{i}$, con \mathbf{i} versore che individua l'asse orientato x.

Una soluzione è data da un'onda longitudinale $\mathbf{u}=u_0 \exp(ik_x x) \mathbf{i}$. L'onda è detta longitudinale perchè il campo \mathbf{u} è parallelo al vettore di propagazione \mathbf{k} . Sostituendo tale soluzione nella prima equazione del set di equazioni sopra riportato troviamo la relazione di dispersione $\rho\omega^2 = c_{xxxx} k_x^2$. Quest'ultima può essere scritta nella forma $\omega = v_L k_x$ con $v_L = \left(\frac{c_{xxxx}}{\rho} \right)^{\frac{1}{2}}$ velocità dell'onda longitudinale lungo la direzione Si(100).

Due altre soluzioni sono date dalle onde trasversali T_1 , $\mathbf{u}=u_0 \exp(ik_x x) \mathbf{j}$, e T_2 , $\mathbf{u}=u_0 \exp(ik_x x) \mathbf{k}$, con \mathbf{j} e \mathbf{k} versori rispettivamente degli assi y e z. I displacement sono perpendicolari al vettore d'onda, da cui la definizione di onda trasversale. Sostituendo tali espressioni rispettivamente nella seconda e terza equazione del set di equazioni otteniamo le relazioni di dispersione $\omega = v_{T_1} k_x$ e $\omega = v_{T_2} k_x$, con $v_{T_1} = v_{T_2} = \left(\frac{c_{xyxy}}{\rho} \right)^{\frac{1}{2}}$ le velocità delle onde trasversali propaganti lungo la direzione

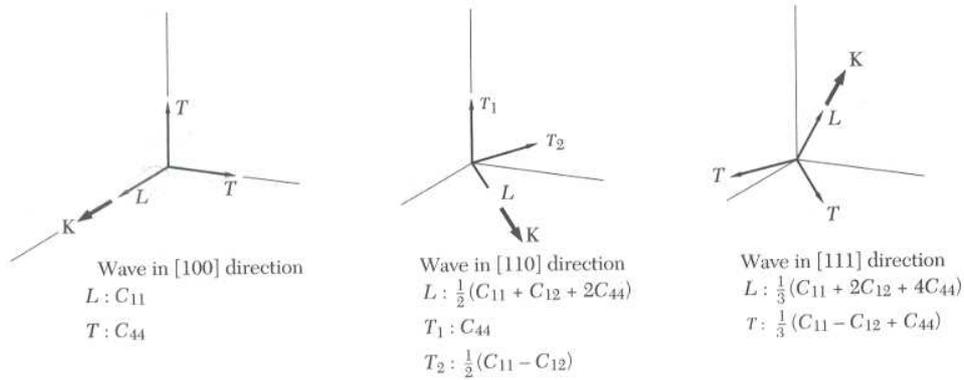


FIGURA 1.1: Costanti elastiche relative ai tre modi delle onde elastiche nelle principali direzioni di propagazione in un cristallo cubico. I due modi trasversali risultano degeneri lungo le direzioni di propagazione [100] e [111], da Ref. [6]

Si(100). Si noti che, nel caso di propagazione lungo la direzione (100) di un cristallo cubico, le velocità delle onde trasversali T_1 e T_2 sono uguali e, quindi, le soluzioni trasversali risultano degeneri. In generale ciò non accade per tutte le direzioni di propagazione, si veda figura 1.1.

In figura 1.2 vengono riportati i campi di displacement da me calcolati per le onde L e T_1 , di cui sopra, per $k = (2\pi \cdot 10^6)m^{-1}$. L'onda T_2 si presenta come la T_1 ma con displacement perpendicolare al piano del foglio. I valori delle frequenze trovate sono $\nu_L = 8.44$ GHz e $\nu_T = 5.84$ GHz e, dalle relazioni di dispersione, troviamo $v_L = 8440$ ms⁻¹ e $v_T = 8845$ ms⁻¹. Tali risultati sono stati calcolati implementando e risolvendo l'Eq. agli autovalori 1.2 con COMSOL [5], un software per la risoluzione di equazioni differenziali basato sull'analisi degli elementi finiti. L'infinita estensione del cristallo è stata simulata imponendo che il displacement fosse uguale in cima e in fondo alla cella di simulazione e sui bordi laterali della cella stessa. La condizione di ciclicità ai bordi della cella verrà spiegata in maggior dettaglio nei capitoli seguenti. I risultati sono in accordo con la teoria analitica: utilizzando le relazioni di dispersione e tenendo conto che, per il Si, si ha

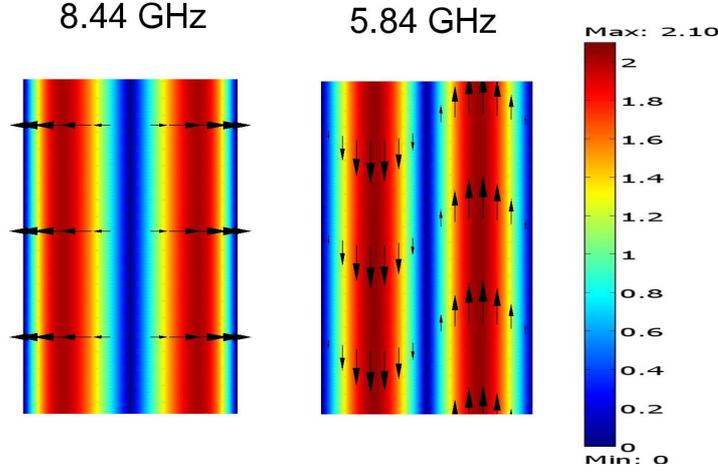


FIGURA 1.2: Esempi di onde Bulk in un cristallo di Si infinitamente esteso. La direzione di propagazione, vettore d'onda \mathbf{k} , è presa lungo la direzione Si(100), qui posta lungo l'asse x, ragion per cui $\mathbf{k}=k_x\mathbf{i}$. Le soluzioni sono qui calcolate per $k = (2\pi \cdot 10^6)m^{-1}$. Per l'onda L si trova $\nu_L=8.44\text{GHz}$ (figura di sinistra), mentre per l'onda T_1 si trova $\nu_T=5.84\text{GHz}$ (figura di destra). Le frecce indicano il campo del displacement, mentre la scala dei colori ne indica il modulo.

$c_{xxxx}=1.66 \times 10^{11} \text{ Nm}^{-2}$, $c_{xyxy}=0.796 \times 10^{11} \text{ Nm}^{-2}$ e $\rho = 2330 \text{ kg/m}^3$ [6], si ha

$$\nu_L = \frac{v_L k_x}{2\pi} = \left(\frac{c_{xxxx}}{\rho}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{k_x}{2\pi} = 8.44 \text{ GHz} \quad (1.3)$$

$$\nu_T = \frac{v_T k_x}{2\pi} = \left(\frac{c_{xyxy}}{\rho}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{k_x}{2\pi} = 5.84 \text{ GHz} \quad (1.4)$$

Consideriamo ora il caso di un cristallo semi-infinito. Le soluzioni dell'equazione agli autovalori sono di due tipi: le onde di volume, del genere di quelle calcolate per un cristallo infinitamente esteso e dette onde di *Bulk*, e le onde di superficie, *Surface Acoustic Waves (SAW)* [2, 7], che rimangono confinate sulla superficie del mezzo. Questa seconda categoria di onde emerge come possibile soluzione dell'Eq. 1.2 con condizioni stress-free sulla superficie del cristallo, ciò si verifica a causa della rottura di simmetria introdotta dall'interfaccia cristallo-vuoto. Per mostrare la differenza fra le due tipologie d'onda confrontiamo i displacement calcolati per le onde di tipo SAW, che propagano lungo la direzione Si(100) di un cristallo di Silicio semi-infinito per $k = (2\pi \cdot 10^6)m^{-1}$, con le onde *Bulk* mostrate in Fig. 1.2.

Per le SAW troviamo un autofrequenza $\nu_{SAW}=4.920$ GHz due volte degenerare e i relativi automodi, una a simmetria sinusoidale e l'altro a simmetria cosinusoidale. In un'onda di tipo SAW il displacement è grande nei pressi della superficie e decresce esponenzialmente con lunghezza di decadimento pari alla lunghezza d'onda λ dell'onda stessa allontanandosi dalla superficie. Diversamente, un'onda di tipo Bulk ha un displacement finito in tutto il volume del cristallo semi-infinito. Il campo del displacement ha natura mista non essendo né longitudinale né trasversale, ciò in contrasto con le soluzioni di tipo Bulk, si veda Fig. 1.3.

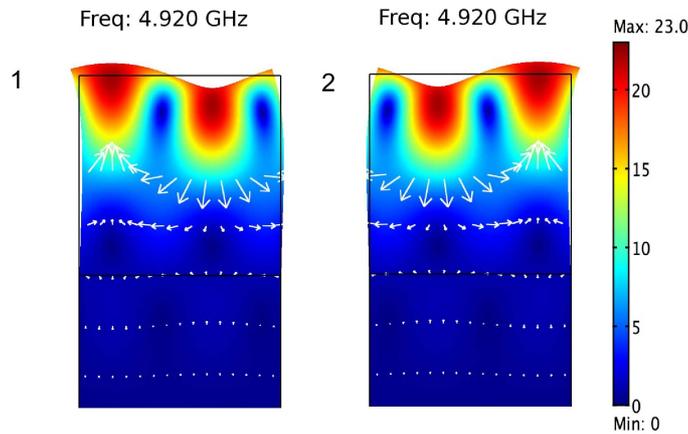


FIGURA 1.3: Esempi di onda di superficie a simmetria cosinusoidale (1) e a simmetria sinusoidale (2). Le frecce bianche indicano il displacement, indicato anche nella scala dei colori a destra. I parametri di simulazione sono gli stessi utilizzati per calcolare i displacements in Fig.1.2 .

1.1.2 Rilevanza applicativa delle SAW

Da ciò che abbiamo visto nella sezione precedente, le onde di superficie sono evanescenti, in quanto si smorzano esponenzialmente lungo la direzione normale alla superficie del materiale con un coefficiente di smorzamento pari alla lunghezza d'onda con cui si propaga l'onda stessa. Un aumento di massa sulla superficie provoca un aumento dell'accoppiamento tra onde di superficie ed onde Bulk, portando

ad una diminuzione in frequenza dei modi pseudo-SAW; proprio per il fatto che l'onda SAW rimane confinata sulla superficie del mezzo, questa risulta molto più sensibile, rispetto a un'onda Bulk, a un eventuale aumento di massa posizionata sulla superficie. La sensibilità ad una massa depositata sulla superficie del cristallo risulta accentuata in onde SAW con una lunghezza d'onda piccola in quanto sono maggiormente confinate sulla superficie e per questo maggiormente sensibili a qualunque perturbazione che interessi la superficie stessa. Dunque, minore è la lunghezza d'onda, maggiore è la sensibilità dell'onda a un aumento di massa, ma in un'onda lunghezza d'onda e frequenza sono inversamente proporzionali: esemplificando, un'onda SAW che ha una frequenza dell'ordine dei GHz subirà uno spostamento in frequenza dovuto a un'aggiunta di massa maggiore di quello subito da un'onda SAW che ha una frequenza dell'ordine dei MHz. Per quanto appena esposto si ha che (a) le onde di superficie possono essere utilizzate in dispositivi atti a misurare variazioni di massa, (b) minore è la λ_{SAW} maggiore ci si aspetta che sia la sensibilità del dispositivo. Il concetto di sensibilità, qui introdotto intuitivamente, verrà formalizzato nei capitoli successivi.

1.2 Metodi di rilevamento delle SAW

1.2.1 I sensori Elettro-Acustici

I sensori elettro-acustici sono utilizzati per la realizzazione di dispositivi atti a misurare la massa depositata sulla superficie dei dispositivi stessi. La misura della massa avviene registrando lo spostamento in frequenza di un'onda SAW. In figura 1.4 è schematizzato un sensore di massa elettro-acustico. Come si vede in figura, tale dispositivo si compone di quattro parti:

- (1) un generatore di onde SAW basato su di un *InterDigital Transducer* (IDT);
 - (2) un rilevatore di onde SAW, anch'esso basato su di un IDT.
-

- (3) un substrato piezoelettrico, solitamente quarzo o litio niobato;
- (4) una zona, detta di mass loading, dove viene depositata la massa da misurarsi.

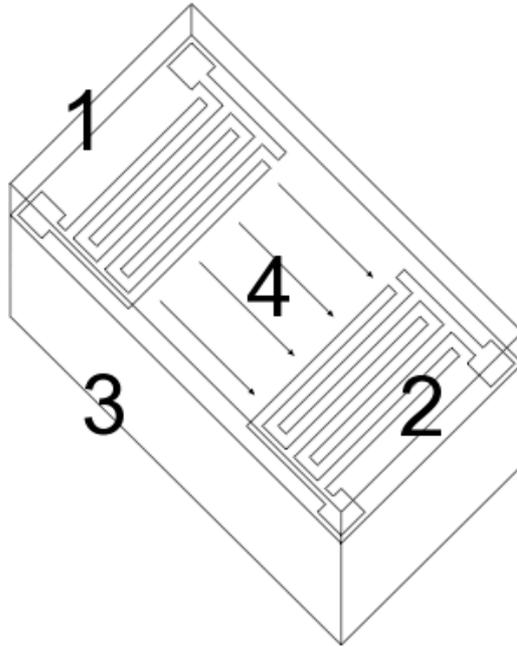


FIGURA 1.4: Rappresentazione stilizzata di un sensore di massa basato su generazione/rilevazione di SAW. In figura sono visibili il generatore di onde SAW: IDT (1), il rilevatore di onde SAW: IDT (2), il substrato piezoelettrico (3), la zona di mass loading (4) [8].

In figura 1.5 è presentato un generatore di onde SAW basato su tecnologia IDT. Esso è formato da due elettrodi a forma di pettine disposti in modo tale da alternare anodo e catodo, così da creare una differenza di potenziale tra i due elettrodi. Un materiale piezoelettrico è un cristallo che ha la proprietà di generare una differenza di potenziale quando è soggetto a deformazione meccanica, e viceversa. La differenza di potenziale tra gli elettrodi del generatore di onde SAW deforma il materiale e crea un'onda di superficie di lunghezza d'onda λ pari alla distanza P fra gli elettrodi. La SAW si propaga sulla superficie del substrato, attraverso la zona di mass loading, in direzione del rilevatore, anch'esso costruito

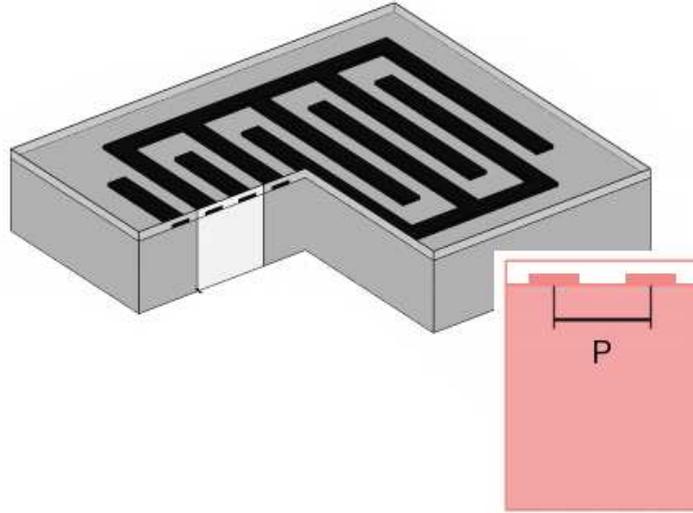


FIGURA 1.5: Rappresentazione schematica di un generatore/rilevatore di onde SAW basato su tecnologia IDT. In figura sono visibili i due elettrodi disposti a pettine, in modo da alternare catodo e anodo. In rosso è posto l'ingrandimento della zona grigia. La distanza tra l'anodo e il catodo è pari a P , cioè pari a mezza lunghezza d'onda dell'onda SAW. Nel dispositivo che proporremo, invece, la periodicità P sarà pari alla lunghezza d'onda dell'onda SAW.

nello stesso modo. Quando sulla zona di mass loading viene posta della massa (configurazione di dispositivo carico), transitando nella zona di mass loading la SAW subisce uno spostamento in frequenza rispetto al caso in cui nessuna massa è presente sulla superficie del dispositivo (configurazione di dispositivo scarico); quando l'onda arriva al rilevatore, attraverso la differenza di potenziale che si crea fra gli elettrodi si può conoscere la deformazione del substrato e risalire alla nuova frequenza dell'onda di superficie. Infine, confrontando tale frequenza con la frequenza registrata a dispositivo scarico, si può ricavare il valore della massa depositata sulla zona di mass loading.

1.2.2 I Sensori Opto-Acustici

Presentiamo un nuovo schema per un dispositivo che permetta di misurare lo spostamento in frequenza di un'onda pseudo-SAW, e, quindi, di quantificare la massa depositata sulla superficie dello stesso. Tale sensore viene detto *Sensore Opto-Acustico*. Il dispositivo è basato sulla generazione e conseguente rilevazione acusto-ottica di un'onda pseudo-SAW utilizzando una tecnica ottica di pump e probe.

Un'onda pseudo-SAW è un particolare tipo di onda che si crea nei cristalli fononici. La principale caratteristica di una pseudo-SAW è quella di essere confinata prevalentemente sulla superficie del dispositivo, come un'onda SAW, e, tuttavia, di avere displacement finito in tutto il volume del cristallo, come un'onda di tipo Bulk.

La struttura del dispositivo è un cristallo fononico, ottenuto ponendo strisce di alluminio a mutua distanza P su un substrato di silicio, vedi figura 1.6. Un impulso laser dell'ordine dei fs, che chiameremo impulso di *pump*, scalda impulsivamente le strisce di alluminio, lasciando inalterata la temperatura del substrato. Ciò è possibile grazie alla differenza nelle costanti ottiche di Si e Al [9]. L'espansione termica che ne segue genera nel substrato un'onda localizzata prevalentemente sulla superficie di lunghezza d'onda P . Tale onda regola l'oscillazione delle strisce, in questo modo si può seguire la dinamica dell'onda misurando il segnale diffratto di un impulso laser, chiamato impulso di *probe*, che incide sul cristallo con un ritardo fissato rispetto all'impulso di pump e, da questa, la frequenza ν_0 di oscillazione della pseudo-SAW del dispositivo scarico. Posizionando poi la massa da misurarsi sul dispositivo è possibile, con la stessa tecnica, misurare la frequenza ν della pseudo-SAW a dispositivo carico. Dalla differenza $\Delta\nu = \nu - \nu_0$ è possibile determinare la massa depositata sul dispositivo stesso. Sottolineiamo il fatto che nel dispositivo presente la zona di generazione coincide con la zona di rilevazione, a differenza dei dispositivi elettro-acustici.

Nel presente lavoro di tesi verranno studiate due configurazioni di carico. In

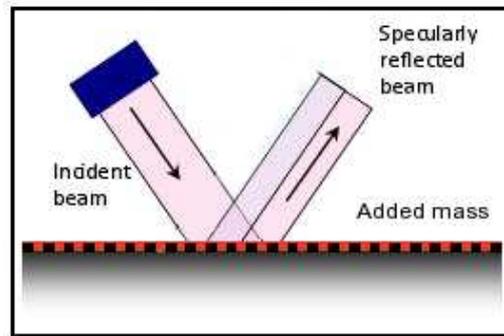


FIGURA 1.6: Struttura di un sensore di massa basato su generazione/rilevazione opto-acustica di onde pseudo-SAW. Su un cristallo fononico (in grigio e nero in figura) viene posizionata la sostanza di cui vogliamo conoscere la massa (in rosso).

una configurazione la massa da misurarsi verrà posta solo sulle strisce (Configurazione A), nell'altra configurazione la massa verrà invece distribuita su tutta la superficie del dispositivo (Configurazione B).

In figura 1.7 viene riportato il set-up sperimentale presente nel laboratorio F: un fascio laser impulsato viene diviso in due, il fascio di *pump* e il fascio di *probe*. Il fascio di *pump* viene modulato a 100 kHz attraverso un modulatore fotoelastico (PEM) posizionato tra due polarizzatori incrociati. Il fascio di *probe*, una volta diffratto dalle strisce periodiche di alluminio, viene focalizzato e rilevato da un fotodiodo. Davanti al fotodiodo viene posto un polarizzatore, in modo da schermare la luce proveniente dal fascio di *pump* diffratto. Per studiare le dinamiche di rilassamento delle strisce di alluminio nel dominio del tempo, si è utilizzato un traslatore a lungo raggio per variare il cammino ottico del fascio di *pump*. Attualmente la linea di ritardo presente nel laboratorio F permette di coprire un intervallo temporale massimo di 12 ns; ciò pone un limite sulla risoluzione in frequenza ~ 0.1 GHz [9].

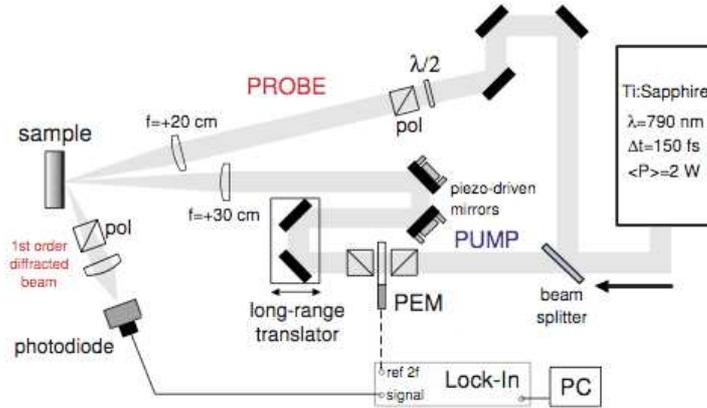


FIGURA 1.7: Rappresentazione schematica del set-up ottico risolto in tempo per la generazione e rilevazione di onde SAW attualmente presente nel laboratorio F. La risoluzione in frequenza dell'attuale set-up è limitata a 0.1 GHz. La variazione d'intensità del fascio diffratto di probe è misurata attraverso un amplificatore lock-in [9].

1.2.3 Confronto tra sensori elettro- ed opto-acustici

Per misurare la massa di una sostanza, sfruttando le proprietà delle onde di superficie, i sensori odierni utilizzano dispositivi elettro-acustici basati su IDT. Nonostante l'ottima performance oggi raggiunta, la generazione/rilevazione elettro-acustica presenta un inconveniente che ne limita gli sviluppi futuri. L'elettronica è performante fino a frequenze dell'ordine delle centinaia di MHz, l'approccio piezoelettrico non è quindi perseguibile a frequenze superiori ai GHz.

Per ovviare a questo problema proponiamo, in questo lavoro di tesi, di ricorrere a sensori acusto-ottici, la generazione/rilevazione opto-acustica essendo più rapida della controparte elettro-ottica. L'idea si basa su una tecnica messa a punto nel laboratorio F [9]. Il set-up attualmente in funzione non è tecnologicamente performante a causa di dettagli tecnici sormontabili, tuttavia verrà mostrata l'attuabilità di un sensore di massa basato su questa tecnica e possibili strategie di ottimizzazione. La sensibilità del dispositivo, $S = \partial\Delta\nu / \partial m_s$ con m_s densità super-

ficiale di massa depositata sulla zona di mass loading, è migliorabile aumentando la frequenza ν (diminuendo la λ_{SAW}) delle pseudo-SAW generate e aumentando la lunghezza della linea di ritardo tra fascio di pump e fascio di probe. Sottolineamo che (a) la risoluzione $\Delta\nu \sim 0.1$ GHz è legata alla sola lunghezza della linea di ritardo (b) la periodicità P del cristallo fononico può essere ulteriormente ridotta, diminuendo quindi la λ_{SAW} e aumentando la sensibilità S .

Capitolo 2

Modelli

2.1 Cristallo fononico

In questa sezione presenteremo gli automodi di superficie in un cristallo fononico. Il cristallo fononico in oggetto è formato da un substrato di silicio spesso $100\ \mu\text{m}$ su cui sono state depositate strisce di alluminio con periodicità P pari a $1\ \mu\text{m}$. La terza dimensione, z in figura 2.1, è considerata infinita, essendo la geometria del dispositivo bidimensionale. In Fig. 2.1 viene mostrato uno schema tridimensionale del cristallo fononico. L'orientazione del substrato cristallino è tenuta in conto tramite il tensore elastico c_{ijmn} e, nel presente lavoro, l'asse x è preso lungo la direzione cristallina Si(100). Il vettore d'onda \mathbf{k} è preso lungo la stessa direzione.

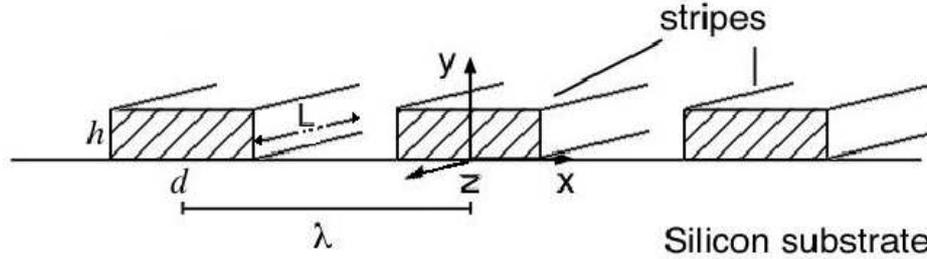


FIGURA 2.1: Diagramma schematico di un cristallo fononico di superficie. Sulla superficie sono depositate strisce di alluminio di larghezza d , spessore h . In questo lavoro l'estensione L è considerata infinita. Il materiale è il silicio cristallino e l'asse x è presa lungo la direzione del silicio cristallino Si(100).

Per effettuare la nostra trattazione utilizziamo la teoria sviluppata da Nardi et al. [4]: introduciamo un parametro, detto *filling factor* (ff) = $\frac{d}{P}$, tramite il quale in seguito massimizzeremo la sensibilità del nostro sistema a una variazione di massa provocata dal posizionamento di uno strato di proteine. Per una prima trattazione del problema, fissiamo il filling factor ff a 0.5.

Trattiamo il problema bidimensionalmente e prendiamo in considerazione la cella unitaria di larghezza $P = \lambda = 1 \mu\text{m}$ (pari cioè alla periodicità del sistema). Sottolineiamo fin da ora che $\lambda = P$ e che quindi potremo scambiare le due notazioni. Per tenere conto della periodicità del sistema i displacements calcolati sui lati 1 e 2 della cella di simulazione sono legati dal teorema di Bloch: $\mathbf{u}_1 = \mathbf{u}_2 \exp(ik_x \lambda)$, con k_x vettore d'onda di Bloch. Nel presente lavoro consideriamo solo $k_x = 2\pi/\lambda$, cioè il vettore d'onda eccitato sperimentalmente [1]. Il displacement è fissato a zero sul fondo della cella. Si veda Nardi et al. [4] per i dettagli. Consideriamo, per illustrare il concetto di pseudo-SAW, due casi: nel primo la lamina di alluminio è spessa 5 nm, nel secondo 50 nm.

Come già osservato nel capitolo 1.2.2, la presenza di strisce periodiche di alluminio (in rosso nella figura) altera le proprietà delle onde di superficie. Esistono tuttavia frequenze tali da irradiare solo una piccola percentuale di energia all'interno del materiale; con queste frequenze, che chiameremo frequenze pseudo-SAW,

l'onda rimane sostanzialmente confinata sulla superficie entro una profondità pari alla periodicità del sistema (indicata in figura come zona B: zona di penetrazione di una SAW pura di lunghezza d'onda $\lambda = P = 1 \mu\text{m}$)

Per poter individuare queste frequenze abbiamo introdotto, seguendo Nardi et al [4] un coefficiente, chiamato coefficiente SAW-Likeness, che ci permette di discriminare gli automodi pseudo-SAW tra tutti gli automodi del sistema. Il principio è semplice: siccome l'onda pseudo-SAW resta confinata perlopiù in superficie, sommiamo l'energia meccanica presente nella striscia di alluminio (vedi fig. 2.2, zona A) e l'energia meccanica presente nel primo micron del silicio (vedi fig. 2.2, zona B) e la dividiamo per l'energia presente in tutta la cella unitaria. In formule:

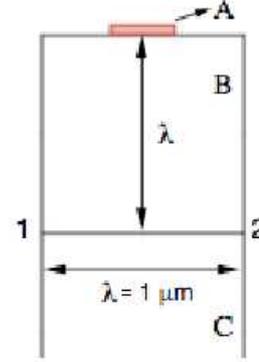


FIGURA 2.2:
Cella unitaria del cristallo fononico di superficie.

$$\alpha(\nu) \doteq \frac{\langle E_A(\nu) \rangle + \langle E_B(\nu) \rangle}{\langle E_{tot}(\nu) \rangle}, \quad (2.1)$$

cioè, scritto per esteso:

$$\alpha(\nu) = \frac{\int_A \rho(\mathbf{r}) \mathbf{u}^2(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} + \int_B \rho(\mathbf{r}) \mathbf{u}^2(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r}}{\int_{tot} \rho(\mathbf{r}) \mathbf{u}^2(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r}}. \quad (2.2)$$

Più un'onda è confinata sulla superficie, più il coefficiente $\alpha(\nu)$ tende a 1, viceversa un'onda Bulk avrà $\alpha(\nu)$ tendente a 0.

Di seguito riportiamo un grafico in cui si possono comparare l'andamento del coefficiente SAW-Likeness al variare della frequenza per un sistema privo di strisce di alluminio, per un sistema con strisce di alluminio spesse 5 nm e per un sistema con strisce di alluminio spesse 50 nm.

Come si vede dal grafico, lamine spesse 5 nm rappresentano una perturbazione piccola del sistema: infatti lo spostamento, rispetto alla frequenza del silicio privo di strisce, dei picchi delle frequenze pseudo-SAW è di circa 0.02 GHz, contro uno spostamento di almeno 0.12 GHz nel caso di strisce spesse 50 nm. Dal grafico

si può notare la modulazione periodica introdotta dalle strisce di alluminio. La modulazione rimuove la degenerazione tra i set di soluzioni altrimenti degeneri e i picchi delle soluzioni a simmetria sinusoidale (simmetria dispari) e cosinusoidale (simmetria pari) si separano in frequenza. Le pseudo-SAW che maggiormente si discostano dalle SAW sono caratterizzate da una larghezza di riga maggiore. Questo fatto può essere letto, nel quadro di una teoria perturbativa o di scattering, come una minore vita media della soluzione SAW maggiormente perturbata dall'aggiunta del reticolo periodico.

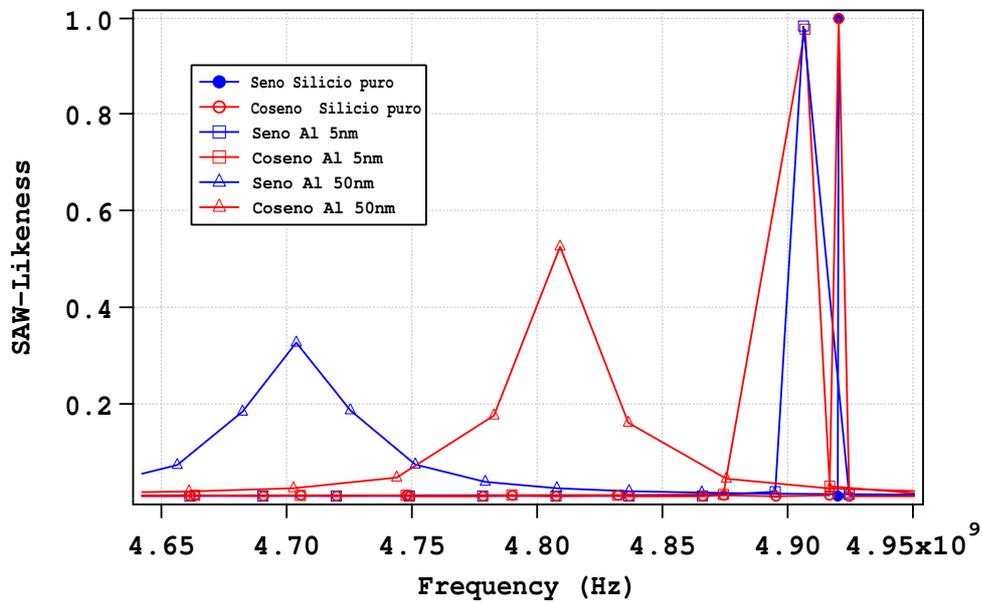


FIGURA 2.3: Andamento del coefficiente SAW-Likeness al variare della frequenza per un sistema privo di strisce di alluminio (cerchi), per un sistema con strisce di alluminio spesse 5 nm (quadrati) e per un sistema con strisce di alluminio spesse 50 nm (triangoli). In blu sono indicate le soluzioni sinusoidali, in rosso le soluzioni cosinusoidali.

2.2 I modelli proteici

In questa sezione modelleremo il comportamento del cristallo fononico quando ad esso viene applicato uno strato di proteine. La proteina da noi utilizzata come riferimento è la *FGF2* (*Fibroblast Growth Factor 2*). Tale proteina ha una massa m_p pari a $8.3 \cdot 10^{-23}$ Kg, una densità superficiale n_{2D} di circa 10^{15} - 10^{16} proteine/m² e può essere trattata come una sfera di circa 2 nm di diametro. Rappresentiamo gli strati proteici depositati come un blocco di metallo di costanti elastiche pari a quelle dell'alluminio e di massa per cella M_b pari alla massa totale M_p dello strato di proteine depositato su una singola cella. Nello studio che segue dobbiamo tenere conto dei seguenti fattori:

- la sensibilità massima delle misure di laboratorio ($\Delta\nu_{min} \sim 0.1$ GHz @ 5 GHz);
- l'impossibilità di effettuare col nostro apparato sperimentale misure dei modi sinusoidali. L'apparato di generazione acusto-ottico eccita solo modi cosinusoidali;
- la modalità di posizionamento delle proteine (solo sulle strisce di alluminio o anche sul silicio) sul dispositivo;
- l'influenza, sugli automodi del sistema, dello spessore del blocco di metallo equivalente allo strato proteico.

Proponiamo di seguito due modelli: il modello a *strato equivalente*, in cui si varia lo spessore del blocco di metallo che simula lo strato proteico mantenendo costante la densità volumetrica, e il modello a *densità equivalente*, nel quale si fissa la geometria del blocco metallico che simula lo strato proteico e si varia la densità volumetrica.

2.2.1 Modello a Strato Equivalente

Nel resto del capitolo, e salvo diversamente specificato, si assume $ff = 0.5$. Lo spessore delle lamine di Al che costituiscono il cristallo fononico è $h = 5$ nm. Il Modello a Strato Equivalente si propone di modellizzare un aumento di massa sul cristallo fononico posando sul cristallo stesso un blocco del medesimo materiale usato per formare il reticolo (in questo caso l'alluminio) e di spessore X , detto *spessore equivalente*, scelto in modo che la massa del blocco di metallo M_b , depositato su una cella, sia pari alla massa delle proteine depositate sulla singola cella, M_p . Tale modello ha il vantaggio di non introdurre discontinuità elastiche almeno quando lo strato equivalente viene posizionato solo sopra la striscia di alluminio. Nel nostro caso, detta $\rho_{met,3D}$ la densità volumetrica del blocco di metallo e N il numero di strati di proteina posti sul cristallo fononico, risulta

$$X = N \frac{m_p n_{2D}}{\rho_{met,3D}} = \frac{M_p / L \lambda}{\rho_{met,3D}} = \frac{m_s}{\rho_{met,3D}} \quad (2.3)$$

dove $m_s \doteq M_p / L \lambda$ è la massa di proteine depositata su di una cella unitaria normalizzata sulla superficie della cella unitaria stessa e le dimensioni L e λ sono illustrate in Fig. 2.1.

Cerchiamo lo spessore equivalente minimo X_{min} tale che lo spostamento del picco delle frequenze pseudo-SAW del coseno sia di circa 0.1 GHz (l'apparato sperimentale del laboratorio non è infatti in grado di misurare variazioni $\Delta\nu$ nel picco delle frequenze pseudo-SAW minori di 0.1 GHz).

In Fig. 2.4 è schematizzato il modello qui trattato. Sulla striscia di alluminio è stato posto il blocco di metallo (in rosso) che simula l'effetto dello strato proteico sul sistema. Lo spessore del blocco è $X = 50$ nm; tale spessore provoca uno spostamento del picco delle frequenze pseudo-SAW cosinusoidali pari a 0.12 GHz, come si vede in figura 2.5.

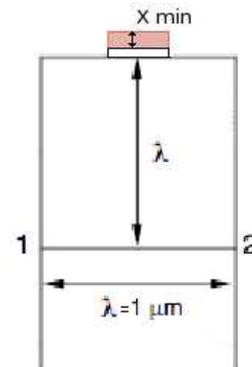


FIGURA 2.4: Modello Strato Equivalente

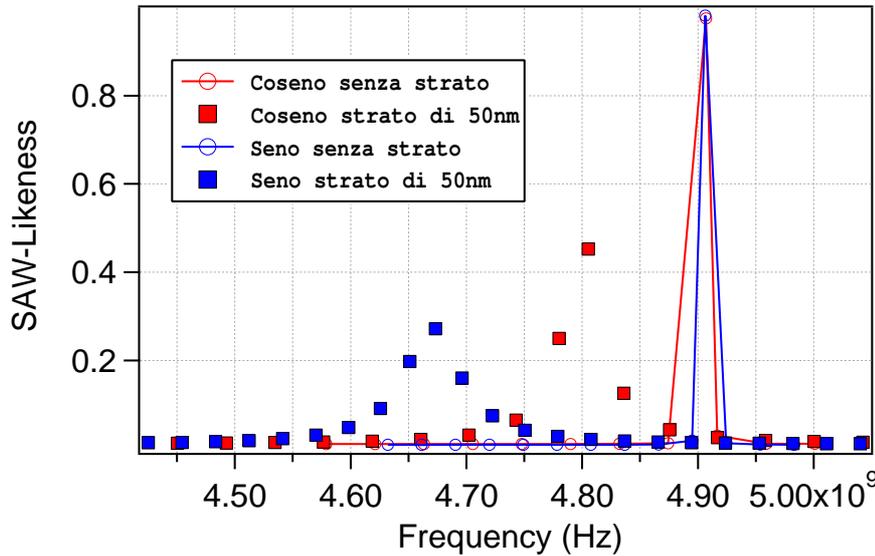


FIGURA 2.5: Andamento del coefficiente SAW-Likeness al variare della frequenza per il cristallo fononico (cerchi) e per il cristallo fononico sulle cui strisce di alluminio è stato posto uno strato di proteine simulato da un blocco di alluminio spesso 50 nm (quadrati). In blu sono indicate le soluzioni sinusoidali (non accessibili sperimentalmente), in rosso le soluzioni cosinusoidali.

Lo strato proteico può essere posizionato o solo sulle strisce di metallo o sia sulle strisce sia direttamente sul silicio. È lecito chiedersi come reagirà il sistema a questo aumento di massa, dato che per ricoprire tutto il dispositivo con un blocco di materiale spesso $X_{min} = 50$ nm bisogna utilizzare, nel caso di filling factor pari a 0.5, il doppio della massa posta solo sulla striscia. Se vogliamo che la massa del blocco posto solo sulla striscia di alluminio venga ridistribuita su tutta la cella, dobbiamo dimezzare lo spessore equivalente X_{min} . Il nuovo spessore equivalente sarà allora $X' = 25$ nm.

In figura 2.6 sono riportate le diverse situazioni. Come si vede dal grafico 2.7, non vi è una sostanziale differenza fra un sistema con un blocco di metallo spesso X_{min} posto solo sulla striscia di alluminio e un sistema con un blocco di metallo spesso X_{min} posto su tutta la struttura, infatti i loro picchi sono distanti uno dall'altro solo 0.01 GHz. Se proviamo a conservare la massa tra una configurazione

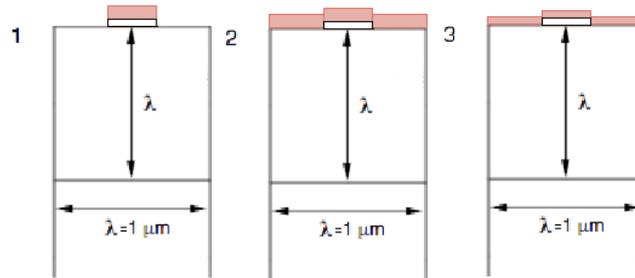


FIGURA 2.6: Schema di posizionamento dello strato proteico. In figura 1 viene modellizzato uno strato di proteine posto solo sulla striscia di alluminio e spesso $X_{min} = 50$ nm. In figura 2 viene modellizzato uno strato di proteine posto sia sull'alluminio sia sul silicio di spessore pari a $X_{min} = 50$ nm. In questa configurazione la massa di proteine per cella unitaria è doppia rispetto a figura 1. In figura 3 viene modellizzato uno strato di proteine posto sia sul silicio sia sulla striscia di alluminio di spessore $X' = 25$ nm, in modo da avere sul dispositivo la stessa massa presente in figura 1.

e l'altra, il picco si sposta di 0.05 GHz. Lo spostamento in frequenza dipende, utilizzando il Modello a Strato Equivalente, maggiormente dalla geometria che dalla massa.

Il Modello a Strato Equivalente presenta, oltre a quello appena delineato, un secondo inconveniente: se lo spessore equivalente è molto maggiore dello spessore delle strisce di alluminio, il sistema reagisce come se sopra il silicio vi fosse posto un altro strato di alluminio di spessore uniforme, falsando la fisica del problema. Infatti in tale configurazione si ripristina la degenerazione iniziale, rotta dalla presenza delle strisce di alluminio, e i picchi delle frequenze pseudo-SAW relativi alle soluzioni sinusoidali e cosinusoidali tornano a coincidere.

2.2.2 Modello a Densità Equivalente

Il Modello a Densità Equivalente viene proposto per ovviare ai problemi del precedente modello, dovuti alla sensibilità del modello alla geometria del sistema.

Nel Modello a Densità Equivalente sulla striscia di alluminio spessa 5 nm viene

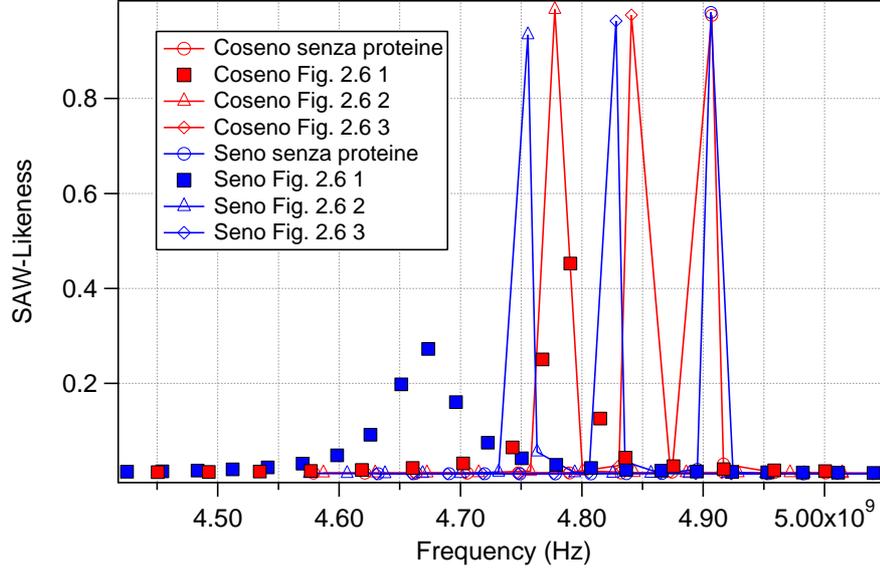


FIGURA 2.7: Andamento del coefficiente SAW-Likeness al variare della frequenza nelle situazioni indicate in figura 2.6 e nel caso in cui non sia stato posizionato lo strato proteico (cerchi). In blu sono indicate le soluzioni sinusoidali, in rosso le soluzioni cosinusoidali.

posto uno strato di materiale spesso 2 nm, pari cioè all'altezza h_p della proteina *FGF2*. A tale materiale vengono associate le costanti elastiche dell'alluminio e una densità, che chiameremo densità equivalente, pari a

$$\rho_{3D,eq} = N \frac{n_{2D} m_p}{h_p} = \frac{M_p / L \lambda}{h_p} = \frac{m_s}{h_p} \quad (2.4)$$

dove, come prima, N è il numero di strati proteici posti sul dispositivo, n_{2D} la densità superficiale della proteina, m_p la massa della proteina, $m_s \doteq M_p / L \lambda$ è la massa di proteine depositata su di una cella unitaria normalizzata sulla superficie della cella unitaria del dispositivo e le dimensioni L e λ sono illustrate in Fig. 2.1. In questo modo la massa modellizzata posta sopra la cella unitaria, M_b , sarà pari alla massa dello strato di proteine posto sopra la cella unitaria, M_p .

In prima battuta, poniamo lo strato di materiale solo sopra le strisce di alluminio e cerchiamo la densità equivalente minima che ci garantisce uno spostamento del picco delle soluzioni cosinusoidali delle frequenze pseudo-SAW ~ 0.1 GHz. Tale

densità è $\rho_{3D,eq,min} = 27000 \text{ Kg/m}^3$, pari cioè a dieci volte la densità volumetrica dell'alluminio.

Nel grafico 2.8 si confrontano i picchi delle frequenze pseudo-SAW quando lo strato proteico è posto solo sulle strisce di alluminio e quando il dispositivo è privo di strato proteico.

Nel grafico 2.10 ai due casi appena menzionati sono aggiunti i picchi delle frequenze pseudo-SAW nel caso in cui lo strato proteico ricopra il dispositivo. In un caso abbiamo ipotizzato di coprire il dispositivo con uno strato di materiale di densità $\rho = 27000 \text{ kg/m}^3$ (vedi figura 2.9.2), nel secondo caso abbiamo ipotizzato di ricoprirlo con uno strato di materiale di densità $\rho = 13500 \text{ kg/m}^3$ (vedi figura 2.9.3) in modo che la massa di tale strato fosse pari alla massa dello strato di densità $\rho = 27000 \text{ kg/m}^3$ posta solo sulle strisce di alluminio, si veda la prima configurazione riportata in Fig. 2.9.

Non vi è una sostanziale differenza fra un sistema con uno strato di materiale di densità $\rho_{3D,eq,min}$ posto solo sulla striscia di alluminio e un sistema con uno strato di materiale $\rho_{3D,eq} = 13500 \text{ Kg/m}^3$ posto su tutta la struttura, infatti i loro picchi sono distanti uno dall'altro solo 0.02 GHz. Se proviamo a mantenere inalterata la densità dello strato di materiale tra una configurazione e l'altra, raddoppiando cioè la massa di proteine depositata, il picco si sposta di ben 0.08 GHz. Ciò conferma che il modello a Densità Equivalente è maggiormente sensibile alla massa dello strato proteico che alla geometria. In quanto segue utilizzeremo il modello a Densità Equivalente.

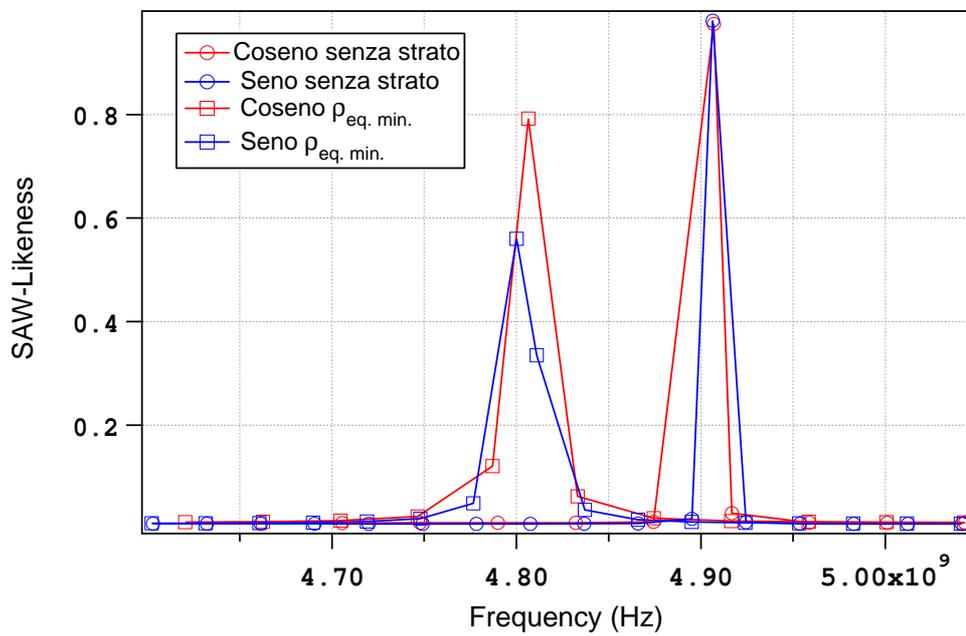


FIGURA 2.8: Andamento del coefficiente SAW-Likeness al variare della frequenza nel caso di cristallo fononico privo di strato proteico, (cerchi) e nel caso di strato proteico di densità $\rho_{3D,eq,min} = 27000 \text{ kg/m}^3$ posto sulle strisce di Al del cristallo fononico (quadrati).

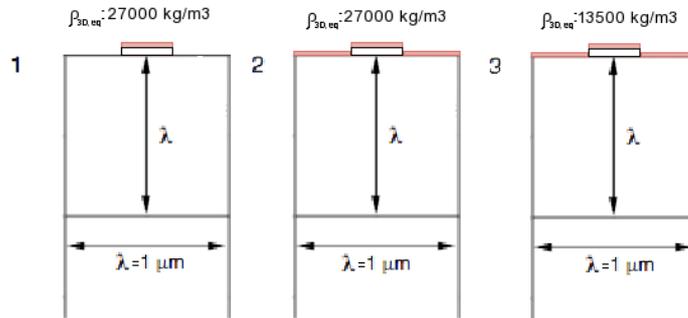


FIGURA 2.9: Schema di posizionamento dello strato proteico. In figura 1 viene modellizzato uno strato di proteine di densità $\rho_{3D,eq,min} = 27000 \text{ kg/m}^3$ posto solo sulla striscia di alluminio. In figura 2 viene modellizzato uno strato di proteine posto sia sull' alluminio sia sul silicio di densità pari a $\rho_{3D,eq,min} = 27000 \text{ kg/m}^3$. In questa configurazione la massa presente sulla cella unitaria è doppia rispetto alla configurazione riportata in figura 1. In figura 3 viene modellizzato uno strato di proteine posto sia sul silicio sia sulla striscia di alluminio di densità $\rho_{3D,eq} = 13500 \text{ kg/m}^3$, in modo da avere sulla cella unitaria del dispositivo la stessa massa presente in figura 1.

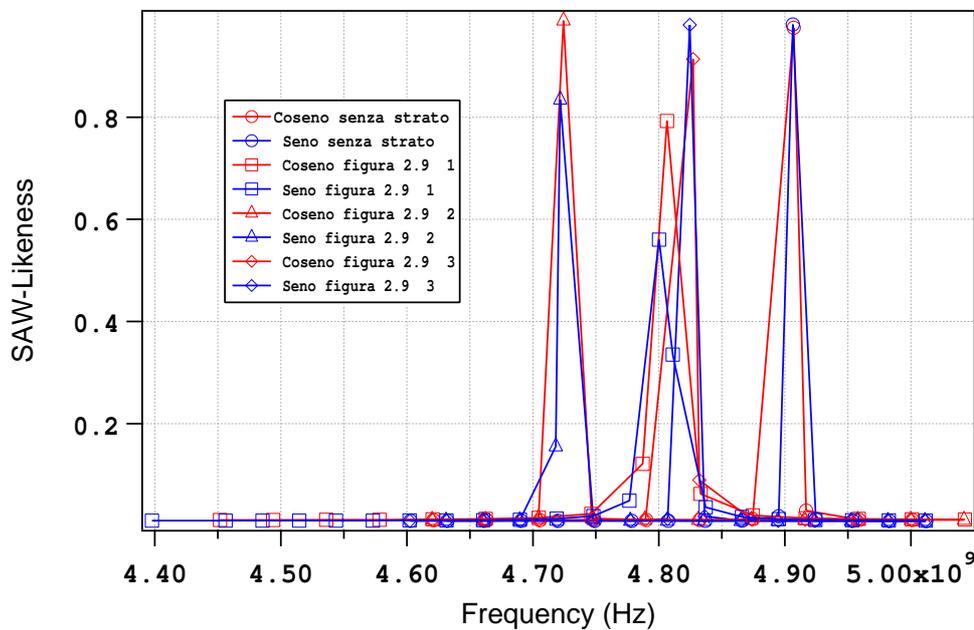


FIGURA 2.10: Andamento del coefficiente SAW-Likeness al variare della frequenza nel caso privo di strato proteico (cerchi) e nei casi di figura 2.9.

Capitolo 3

Ottimizzazione del dispositivo

In questo capitolo ci occuperemo di ottimizzare il dispositivo cercando le condizioni che rendono più sensibile il sistema a una variazione di massa. Utilizzeremo, come suggerito dai risultati del capitolo precedente, il modello proteico a Densità Equivalente.

Nel caso presente la definizione di *Sensibilità* è:

$$S = \frac{\partial \Delta \nu_{cos}}{\partial m_s} \quad (3.1)$$

dove $\Delta \nu_{cos} = \nu_0 - \nu_{cos}$, ν_0 è la frequenza della pseudo-SAW del cristallo fononico scarico, ν_{cos} quella della pseudo-SAW di simmetria pari calcolata per il cristallo fononico con depositate le proteine, ed m_s la massa proteica depositata sulla cella unitaria normalizzata sulla superficie della cella stessa. Lo spostamento in frequenza $\Delta \nu_{cos}$ dipende da due fattori:

- Il filling factor ff ,
- La modalità di posizionamento delle proteine sulla cella unitaria.

Analizzeremo prima il caso in cui le proteine vengono poste solo sulle strisce di alluminio (*Configurazione A*), poi quello in cui vengono poste su tutta la cella unitaria (*Configurazione B*). Per il caso in cui $ff = 0.5$ la *Configurazione A* è esemplificata nella prima immagine in Fig. 2.9, la *Configurazione B* nella terza immagine

in Fig. 2.9. Si noti come fissare la massa per cella unitaria nelle due configurazioni si traduca nella seguente equazione: $ff \cdot \rho_{3D,eq}(\text{Config.A}) = \rho_{3D,eq}(\text{Config.B})$. Calcoleremo, per entrambe le configurazioni, $\Delta\nu_{cos}$, sia fissando m_s e variando ff , sia fissando ff e aumentando m_s . Così facendo otterremo un diagramma di fase $\Delta\nu_{cos} = \Delta\nu_{cos}(ff, m_s)$ con il quale potremo ottimizzare i parametri del dispositivo al fine di massimizzare S .

3.1 Configurazione A

Ipotizziamo di disporre una massa proteica normalizzata sulla superficie della cella pari a $m_s = 3.52 \cdot 10^{-5} \text{ kg/m}^2$ sul dispositivo. Tale valore è stato scelto perchè dà un $\Delta\nu_{cos} \sim 0.1 \text{ GHz}$. Disponiamo m_s solo sulle strisce di alluminio, come indicato nella prima immagine di figura 2.9, quindi calcoliamo $\Delta\nu_{cos}$ al variare del filling factor ff per ogni massa proteica normalizzata m_s presa in considerazione. Successivamente variamo m_s e ripetiamo l'operazione. Così facendo otteniamo il grafico di figura 3.1, costruito variando sia il filling factor ff sia m_s . Dal grafico si vede che $\Delta\nu_{cos}$ aumenta, per ogni m_s , maggiormente per $ff = 0.2$ rispetto ad altri valori di ff .

Restringiamoci allora al caso $ff = 0.2$ e aumentiamo il numero delle masse m_s per avere maggior precisione nel calcolare la sensibilità S .

Osservando il grafico 3.2 notiamo che l'andamento di $\Delta\nu_{cos}$ in funzione di m_s è una funzione monotona crescente; a tratti in cui la funzione cresce lentamente si alternano tratti in cui la funzione varia rapidamente: il massimo della sensibilità S è quindi in tali tratti, mentre negli altri la sensibilità è inferiore. Nel grafico 3.3 è riportato l'andamento della sensibilità S al variare della massa normalizzata sulla superficie della cella. Come già accennato, S è massima per $m_s = 36 \cdot 10^{-6} \text{ kg/m}^2$, $m_s = 43 \cdot 10^{-6} \text{ kg/m}^2$ e $m_s = 52 \cdot 10^{-6} \text{ kg/m}^2$ ed ha, in tali punti, valori $12000 \text{ GHz m}^2 \text{ kg}^{-1}$, $13000 \text{ GHz m}^2 \text{ kg}^{-1}$ e $16000 \text{ GHz m}^2 \text{ kg}^{-1}$ rispettivamente. Nei tratti restanti si mantiene al di sotto dei $3000 \text{ GHz m}^2 \text{ kg}^{-1}$.

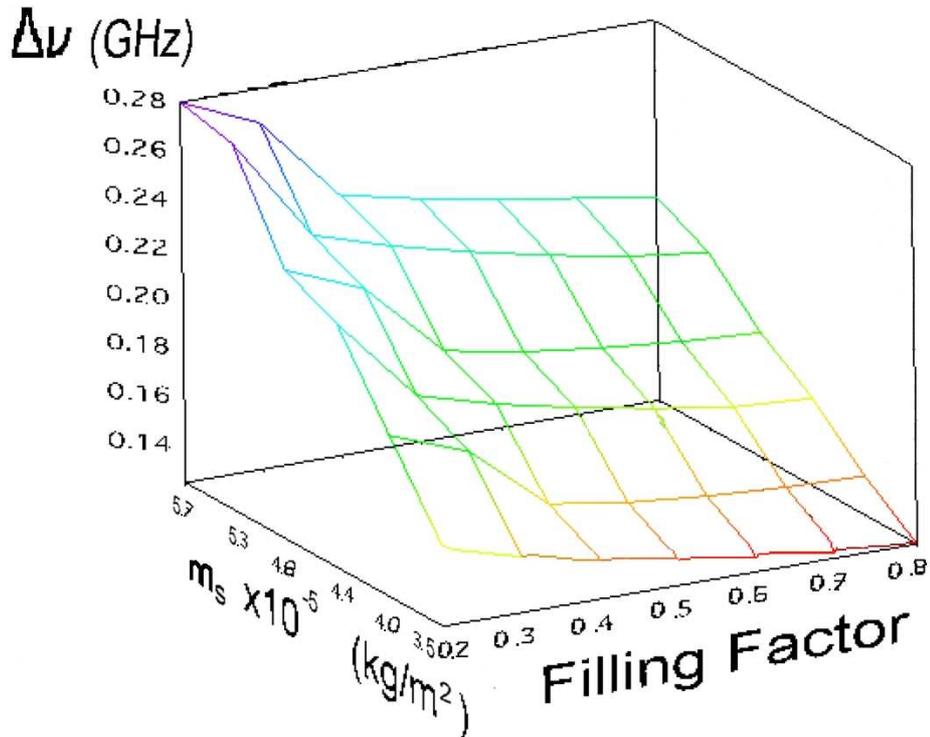


FIGURA 3.1: Spostamento in frequenza $\Delta\nu_{cos}$ al variare del filling factor ff e della massa di proteine depositata sulla cella unitaria e normalizzata sulla superficie della cella stessa m_s . Configurazione A.

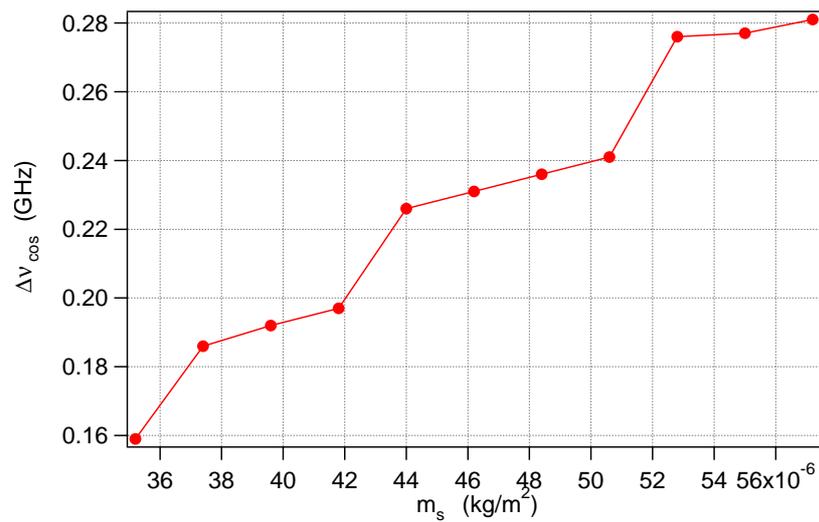


FIGURA 3.2: Spostamento $\Delta\nu_{cos}$ al variare di m_s con ff fissato pari a 0.2 .

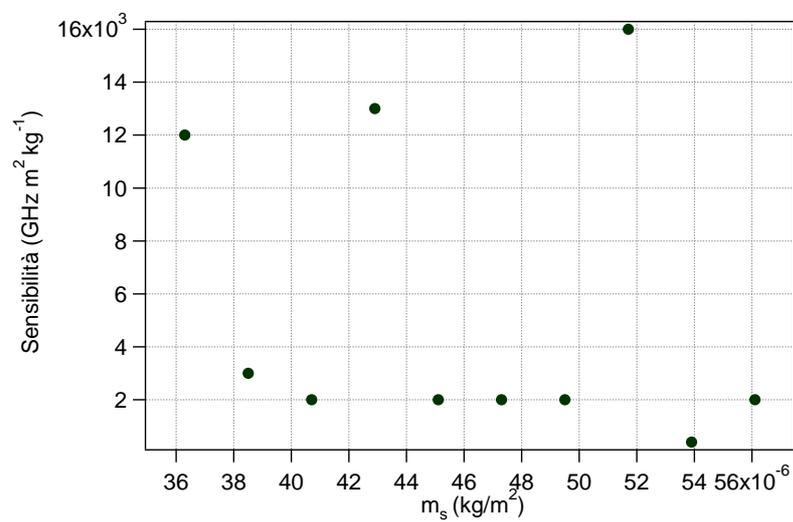


FIGURA 3.3: Sensibilità del sistema in funzione della massa proteica normalizzata sulla superficie della cella m_s a filling factor fissato pari a 0.2 .

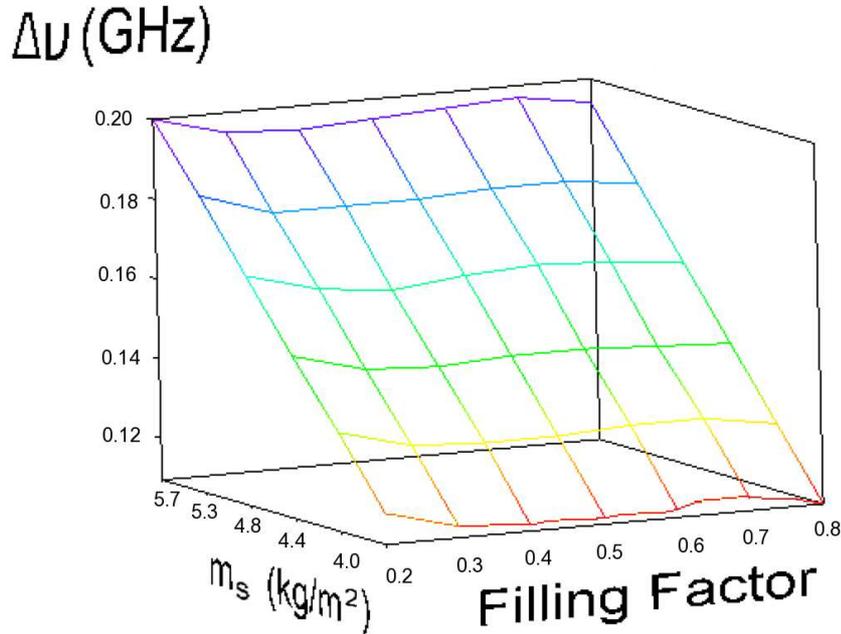


FIGURA 3.4: Spostamento $\Delta\nu_{cos}$ al variare del filling factor e della massa di proteine depositata sulla cella unitaria e normalizzata sulla superficie della cella stessa m_s . Configurazione B.

3.2 Configurazione B

Consideriamo, come abbiamo fatto per la configurazione A, il valore della massa proteica normalizzata sulla cella $m_s = 3.52 \cdot 10^{-5} \text{ kg/m}^2$ e ipotizziamo di disporla su tutta la cella unitaria, come nella terza immagine di figura 2.9. Costruiamo il grafico 3D riportato in figura 3.4 variando il filling factor a m_s fissato e ripetendo l'operazione per tutte gli m_s già considerati nel trattare la configurazione A. Dal grafico si vede chiaramente l'andamento lineare del $\Delta\nu_{cos}$ in funzione della massa proteica normalizzata sulla cella m_s a filling factor fissato. Questo significa che la sensibilità S del sistema si mantiene costante ed è $\sim 7600 \text{ GHz m}^2 \text{ kg}^{-1}$. È interessante notare che, in questa configurazione, S non dipende dal filling factor: infatti, come si vede in tabella 3.1, S non varia sensibilmente al variare di quest'ultimo.

ff	$S \cdot 10^3 [\text{GHz m}^2 \text{ kg}^{-1}]$
0.2	7.6
0.3	7.6
0.4	7.6
0.5	7.7
0.6	7.7
0.7	7.7
0.8	7.7

TABELLA 3.1: Sensibilità del sistema per ogni filling factor considerato; m_s non è specificata perchè S non dipende dalla massa.

Confrontando i risultati emersi nello studio delle due configurazioni, ne è emerso una maggiore spendibilità della configurazione B rispetto alla configurazione A: se infatti la configurazione A ha il vantaggio di avere a tratti una sensibilità maggiore di quella della configurazione B, la configurazione B ha una sensibilità indipendente sia dalla massa m_s sia dalla geometria.

3.3 Competitività del sensore opto-acustico

Per confrontare la performance del dispositivo da noi proposto e studiato rispetto a dispositivi affini già presenti sul mercato, calcoliamo la *Sensibilità* massima del nostro dispositivo e la confrontiamo con quella di dispositivi affini. La sensibilità Σ è definita come

$$\Sigma = \frac{S}{\nu_0} \quad (3.2)$$

dove S è la sensibilità del dispositivo e ν_0 la frequenza dell'onda di superficie a dispositivo scarico. Per il nostro dispositivo la sensibilità massima $S_{max} = 16000 \text{ GHz m}^2 \text{ kg}^{-1}$ e $\nu_0 = 4.9 \text{ GHz}$, perciò $\Sigma_{max} = 3.2 \cdot 10^{-2} \text{ cm}^2/\mu\text{m}$. In tabel-

la 3.2 vengono riportati alcuni esempi di sensitività per diversi modi acustici. A confronto con i valori in tabella, la nostra sensitività è molto bassa e il nostro dispositivo, allo stato attuale, non è competitivo. Se però confrontiamo le sensibilità dei dispositivi, vediamo che la nostra sensibilità rientra tra i valori inferiori della tabella. Inoltre, nella nostra trattazione, ci siamo basati sull'apparato sperimentale del laboratorio F, il quale ha una risoluzione $\Delta\nu_{min} \sim 0.1$ GHz; la nostra sensitività risulta legata alla sensibilità dell'apparato sperimentale usato.

Modo acustico	Esempi per Σ [$\text{cm}^2/\mu\text{g}$]	Sensibilità S [$\text{MHz cm}^2/\mu\text{g}$]
BAW	15 (10 MHz)	150
SH_0	23 (< 19 MHz)	437
SH_m	45 (> 19 MHz)	855
SAW	370 (200 MHz)	74000
STW	180 (250 MHz)	45000
Love wave	3945 (250 MHz)	~ 990000
pseudo-SAW	0.032 (5 GHz)	160

TABELLA 3.2: Esempi di sensitività Σ per diversi modi acustici, calcolati tramite formule teoriche semplici [10]. Nell'ultima riga sono riportate la sensitività e la sensibilità del nostro apparato.

Capitolo 4

Conclusioni

I sensori di massa odierni, che sfruttano le proprietà di onde pseudo-SAW, si basano prevalentemente su dispositivi elettro-acustici noti come IDT. Questi dispositivi sono adatti a lavorare con frequenze dell'ordine delle centinaia di MHz, ma hanno il grosso limite di non poter lavorare a frequenze maggiori. L'elettronica limita l'utilizzo di un IDT al GHz, mentre la generazione/rilevazione di un'onda di superficie a mezzo di un generatore/rilevatore di un sensore acusto-ottico non è affetto, in linea di principio, da tale limitazione in frequenza.

Queste considerazioni ci hanno spinto a progettare un sensore di massa acusto-ottico per impieghi biologici. Partendo dai risultati ottenuti nel laboratorio F [9] abbiamo proposto uno schema per un sensore opto-acustico di massa. Tale sensore sfrutta le proprietà termiche ed elastiche di un cristallo fononico ottenuto ponendo su un substrato di silicio alcune strisce di alluminio poste a mutua distanza P .

Abbiamo in seguito proposto due modelli per studiare tale perturbazione, il modello a *Strato Equivalente* e il modello a *Densità Equivalente*. Il modello a Strato Equivalente si propone di modellizzare l'aumento di massa provocato dal posizionamento dello strato proteico inserendo sul cristallo stesso un blocco dello stesso materiale usato per formare il reticolo (in questo caso l'alluminio) e di altezza X , detta altezza equivalente, scelta in modo che la massa del blocco di metallo

M_b depositato su una cella unitaria sia pari alla massa proteica M_p depositata sulla stessa cella. Il modello a Densità Equivalente invece si propone di modellizzare tale aumento di massa fissando l'altezza del blocco di materiale che rappresenta lo strato proteico a $h_p = 2$ nm e variandone la densità, detta densità equivalente, in modo che la massa M_b sia pari a M_p . In entrambi i casi si è valutata la reazione del modello alle due possibili modalità di posizionamento dello strato proteico:

- Configurazione A: lo strato proteico viene posto esclusivamente sulle strisce di alluminio;
- Configurazione B: lo strato proteico viene posto indistintamente su tutta la superficie della cella unitaria.

Da tale trattazione è risultato che il modello a Strato Equivalente dipende maggiormente dalla geometria del sistema che dalla massa M_b . Tale modello è inoltre inadatto a rappresentare masse elevate perchè, se l'altezza equivalente è molto maggiore dell'altezza delle strisce di alluminio, il sistema reagisce come se sopra il silicio vi fosse posto uno spesso strato di alluminio di spessore uniforme, falsando la fisica del problema. Per questo motivo abbiamo ritenuto più adatto a rappresentare lo strato proteico il modello a Densità Equivalente.

Successivamente abbiamo determinato le condizioni geometriche che massimizzano la sensibilità del sistema a una variazione di massa sulla cella unitaria normalizzata sulla superficie della cella stessa. Abbiamo trovato che la sensibilità S del sistema dipende sia dalle modalità di posizionamento della proteina sia dal filling factor ff . Inoltre lo spostamento in frequenza $\Delta\nu_{cos}$ maggiore si ha per $ff = 0.2$ per entrambe le modalità di posizionamento.

Nel caso in cui la proteina viene posta solo sulle strisce di alluminio (*Configurazione A*), la sensibilità S ha un andamento irregolare, in cui zone di minor sensibilità ($S < 3000$ GHz m² kg⁻¹) sono intervallate da punti in cui la sensibilità quadruplica ($S > 12000$ GHz m² kg⁻¹). Nel caso in cui la proteina viene posta su tutta la

cella unitaria (*Configurazione B*) invece la sensibilità del sistema diviene costante ($S = 7600 \text{ GHz m}^2 \text{ kg}^{-1}$) e completamente indipendente dal filling factor.

4.1 Sviluppi Futuri

Al concetto di sensibilità è strettamente legato il concetto di *Sensitività*. La sensitività, definita come

$$\Sigma = \frac{S}{\nu_0} \quad (4.1)$$

viene usata in letteratura per misurare la bontà di un sensore. Il sensore di massa da noi studiato non ha una buona sensitività. Ciò è dovuto alla breve corsa della slitta che introduce il ritardo temporale tra fascio di pump e probe presente nel laboratorio F. Sarebbe necessario, per aumentare la performance, in termini di sensitività, del dispositivo da noi proposto, diminuire il valore di $\Delta\nu_{min}$ dell'apparato di rilevazione delle onde acustiche, ciò essendo possibile aumentando il ritardo temporale massimo tra fasci di pump e probe. Un'altra strategia, non complementare alla precedente, per aumentare la sensitività consiste nel diminuire la periodicità P del cristallo fononico: infatti, dato che $\lambda_{SAW} = P$ e che l'onda di superficie si smorza esponenzialmente lungo la direzione normale alla superficie con un coefficiente di smorzamento pari a λ_{SAW} , minore è la periodicità, maggiore è il confinamento, e l'onda di superficie diviene più sensibile alla presenza di una massa sulla superficie. Diminuire la λ_{SAW} comporta, a parità di massa depositata sul dispositivo, una diminuzione del tempo di vita dell'onda; pertanto è necessario progettare una linea di ritardo in grado di rilevare la frequenza dell'onda pseudo-SAW prima che il displacement di questa si smorzi del tutto.

Simboli

c_{ijmn} tensore degli sforzi

d larghezza delle strisce di alluminio

ff filling factor

h altezza delle strisce di alluminio

h_p altezza della proteina e dello strato proteico considerato nel modello a densità equivalente

\mathbf{k} vettore d'onda lungo la direzione Si(100)

L spessore della cella unitaria, nel modello considerata ∞

M_b massa per cella del blocco di alluminio che simula lo strato proteico

M_p massa per cella dello strato di proteine depositato sulla cella unitaria

m_p massa della proteina *FGF0*

m_s massa di proteine depositata su di una cella unitaria normalizzata sulla superficie della cella stessa

N numero di strati di proteine

n_{2D} numero di proteine per unità di superficie

P periodicità del reticolo di alluminio

-
- S sensibilità
- T_1, T_2 onde trasversali
- $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$ displacement
- v_L velocità dell'onda longitudinale
- v_{T_1}, v_{T_2} velocità delle onde trasversali propaganti lungo la direzione Si(100)
- X altezza equivalente, usata nel modello a strato equivalente
- X_{min} altezza equivalente minima che deve avere il blocco di metallo posizionato solo sulle strisce di alluminio affinché $\Delta\nu$ sia rilevabile sperimentalmente
- X' altezza equivalente minima che deve avere il blocco di metallo posizionato su tutta la cella affinché $\Delta\nu$ sia rilevabile sperimentalmente
- $\alpha(\nu)$ coefficiente SAW-Likeness
- $\Delta\nu$ spostamento della frequenza dell'onda pseudo-SAW quando si carica il dispositivo
- $\Delta\nu_{min}$ risoluzione in frequenza dell'apparato sperimentale del laboratorio F
- $\Delta\nu_{cos}$ variazione in frequenza dei picchi delle soluzioni cosinusoidali
- λ lunghezza d'onda della pseudo-SAW
- ν frequenza di oscillazione dell'onda pseudo-SAW a dispositivo carico
- ν_0 frequenza di oscillazione dell'onda pseudo-SAW a dispositivo scarico
- $\rho(\mathbf{r})$ densità volumetrica di massa
- $\rho_{3D,eq}$ densità equivalente, usata nel modello a densità equivalente
- $\rho_{3D,eq,min}$ densità equivalente minima che deve avere il blocco di metallo posto solo sulle strisce d'alluminio affinché $\Delta\nu$ sia rilevabile sperimentalmente
-

$\rho_{met,3D}$ densità volumetrica del blocco di metallo posto sulla cella unitaria, in questo caso l'alluminio

Σ sensitività

Bibliografia

- [1] C. Giannetti, F. Banfi, D. Nardi, G. Ferrini, and F. Parmigiani, *IEEE Photonics Journal* **1**, 21 (2009).
- [2] B. Auld, *Acoustic Fields and Waves in Solids, Vol.II* (Krieger Publ., Malabar, FL, 1990).
- [3] H.-N. Lin, H. J. Maris, L. B. Freund, K. Y. Lee, H. Luhn, and D. P. Kern, *J. Appl. Phys.* **73**, 37 (1993).
- [4] D. Nardi, F. Banfi, C. Giannetti, B. Revaz, G. Ferrini, and F. Parmigiani, accepted for publications on *Phys. Rev. B* .
- [5] COMSOL Multiphysics finite element software, Version 3.5.0.608, COMSOL AB, Sweden.
- [6] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics* (Wiley, New York, 1996).
- [7] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Theory of Elasticity* (Butterworth-Heinemann, Oxford, 1986).
- [8] D. Powell, K. Kalantar-zadeh, and W. Wlodarski, *Sensors and Actuators A* **115**, 456 (2004).
- [9] C. Giannetti *et al.*, *Phys. Rev. B* **76**, 125413 (2007).
- [10] J. D. N. Cheeke and Z. Wang, *Sensors and Actuators B* **59**, 146 (1999).