



بیست و هشتمین کنفرانس اپتیک و فوتونیک ایران و چهاردهمین کنفرانس مهندسی و فناوری فوتونیک ایران، دانشگاه شهید چمران اهواز، خوزستان، ایران.  
۱۴-۱۲ بهمن ۱۴۰۰



## استفاده از ماده دوبعدی مکسین برای بهبود عملکرد زیست حسگر بدون برچسب تشدید پلاسمون سطحی

مریم قدرتی، علی میر و علی فرمانی

دانشگاه لرستان، دانشکده فنی و مهندسی، گروه الکترونیک

ghodrati.ma@fe.lu.ac.ir, mir.a@lu.ac.ir, farmani.a@lu.ac.ir

چکیده: در این مقاله یک زیست حسگر بدون برچسب تشدید پلاسمون سطحی بر پایه ماده دوبعدی  $Ti_3C_2T_x$  MXene پیشنهاد شده است. این زیست حسگر یک ساختار فضای آزاد است که برای تحریک پلاسمون های سطحی از پیکربندی کرچمان استفاده شده است. ساختار متشکل از منشور  $BK_7$ ، فلز نقره (Ag)، دی سولفید تنگستن ( $WS_2$ )، گرافن، مکسین کاربید تیتانیوم (MXene) و محیط حسگری است. برای بررسی عملکرد زیست حسگر تشدید پلاسمون سطحی از روش عددی تفاضل محدود در حوزه زمان (FDTD)، استفاده شده است. با توجه به نتایج عددی حساسیت  $186.20 \text{ deg/RIU}$ ، ضریب شایستگی  $43.40 \text{ RIU}^{-1}$  و دقت تشخیص  $0.233 \text{ 1/deg}$  در طول موج  $633 \text{ nm}$  نانومتر حاصل شده است.

کلید واژه- تشدید پلاسمون سطحی، حساسیت، زیست حسگر، مواد دوبعدی.

## Using of 2D Material MXene to improve the performance of label-free Surface Plasmon Resonance biosensor

Maryam Ghodrati, Ali Mir and Ali Farmani

Faculty Engineering, Lorestan University, Khoramabad

ghodrati.ma@fe.lu.ac.ir, mir.a@lu.ac.ir, farmani.a@lu.ac.ir

**Abstract-** In this paper, we propose a surface plasmon resonance (SPR) biosensor based on the two-dimensional (2D) material  $Ti_3C_2T_x$  MXene. The proposed biosensor is a free space structure using the Kretschmann configuration. This structure consists of  $BK_7$  prism, silver (Ag), tungsten disulfide ( $WS_2$ ), graphene,  $Ti_3C_2T_x$  MXene, and the sensing medium. The proposed biosensor is investigated using the numerical method of finite-difference time-domain (FDTD). The numerical results indicate that the sensitivity, the figure of merit (FOM), and detection accuracy (DA) are  $186.20 \text{ deg/RIU}$ ,  $43.40 \text{ RIU}^{-1}$ , and  $0.233 \text{ 1/deg}$ , respectively at  $633 \text{ nm}$  wavelength.

Keywords: Surface plasmon resonance, sensitivity, biosensor, 2D material.

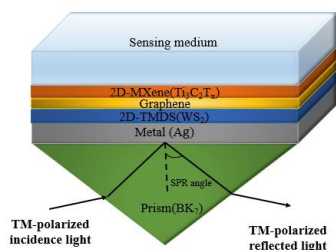
## مقدمه

در سال‌های اخیر توسعه و پیشرفت زیست‌حسگر با حساسیت بالا جهت تشخیص در حوزه پزشکی و سلامت همواره کانون توجه محققان و پژوهشگران بوده است. زیست‌حسگرهای تشدید پلاسمون سطحی با حساسیت قابل ملاحظه، می‌توانند در تشخیص مولکول‌های زیستی از قبیل آنزیم‌ها، ویروس‌ها، مولکول DNA، انواع پروتئین‌ها، سلول‌های سرطانی و غیره مورد استفاده واقع شوند [۱] و [۲]. از مزایای این نوع حسگرها می‌توان به دقت و سرعت پاسخ بالا، تشخیص بدون برچسب و امکان تشخیص مولکول‌های زیستی با غلظت و حجم کم اشاره نمود [۳]. پلاسمون‌های سطحی تحریک‌های الکترومغناطیسی هستند که به الکترون‌های آزاد جمع‌شونده و نوسان‌کننده سطحی در فلزات تزویج می‌شوند تا بتوانند به صورت طولی در فصل مشترک فلز-دی‌الکتریک انتشار یابند، که از این خاصیت برای ساخت افزاره‌های مختلفی همچون زیست‌حسگر استفاده می‌شود [۱] و [۴]. تاکنون زیست‌حسگرهای متنوعی با استفاده از مواد دوبعدی به دلیل خواص ویژه نوری، شیمیایی، حرارتی، مغناطیسی و الکتریکی توسط محققان طراحی و ساخته شده است که می‌توان به پژوهش‌های انجام شده در [۱، ۲ و ۴] اشاره نمود. اخیراً دسته‌ای از مواد دوبعدی شامل کاربید و نیتريد فلزات واسطه تحت عنوان مکسین (MXenes)، مورد توجه محققان قرار گرفته است. این مواد با فرمول عمومی  $M_{n+1}X_nT_x$  معرفی می‌شوند که در آن M فلز واسطه، X کربن و یا نیتروژن،  $T_x$  گروه‌های عاملی سطحی همچون هیدروکسیل، اکسیژن و فلورین و زیرنویس n عددی

صحیح بین ۱ تا ۳ را نشان می‌دهد [۲ و ۴]. MXene با داشتن خواص ویژه‌ای همچون رسانایی حرارتی و الکتریکی بالا، انعطاف‌پذیری، جذب سطحی بالا، امکان تنظیم‌پذیری تابع کار و شکاف نوار انرژی گزینه بسیار مناسبی برای کاربردهای پلاسمونی به ویژه در ساخت حسگرها محسوب می‌شود [۳]. در همین راستا ما در این مقاله یک زیست‌حسگر بدون برچسب تشدید پلاسمون سطحی را با استفاده از ماده دوبعدی MXene  $Ti_3C_2T_x$  با پیکربندی کرچمان پیشنهاد نموده‌ایم. عملکرد زیست‌حسگر با استفاده از سازوکار جابه‌جایی زاویه‌ای و به روش عددی تفاضل محدود در حوزه زمان (FDTD)، مورد بررسی و تحلیل قرار گرفته است.

## تئوری و مدل ساختار زیست‌حسگر

طرح ساختار پیشنهادی بر اساس پیکربندی کرچمان در شکل ۱ نشان داده شده است. پیکربندی ساختار شامل چندلایه است که به ترتیب منشور BK7، فلز نقره (Ag)، دی‌سولفید تنگستن ( $WS_2$ )، گرافن، مکسین کاربید تیتانیوم ( $Ti_3C_2T_x$  MXene) و محیط حسگری است.



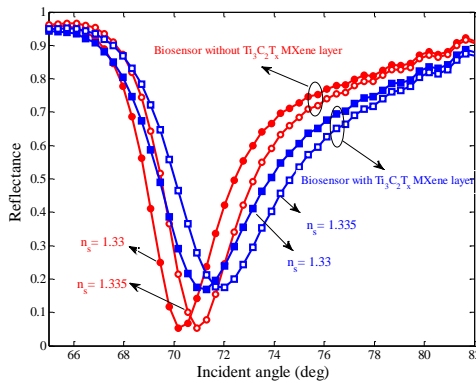
شکل ۱: ساختار زیست‌حسگر تشدید پلاسمون سطحی پیشنهاد شده

در لایه اول منشور BK7 با ضریب شکست ۱/۵۱۵۱ در طول موج ۶۳۳ نانومتر قرار دارد. فلز نقره در لایه دوم به ضخامت ۵۰nm قرار گرفته است، ضریب شکست آن با

تغییر کرده است. همچنین برای اینکه انرژی الکترومغناطیسی تابیده شده به مرز جذب شود و بازتاب مرز کاهش یابد، از شرایط مرزی PML استفاده شده است.

### بحث و نتایج

شکل ۲ طیف بازتاب را برحسب زاویه‌های مختلف نور فرودی بدون لایه MXene  $Ti_3C_2T_x$  و با حضور آن نشان می‌دهد. دیده می‌شود که کمینه بازتاب که معرف بیشترین تحریک پلاسمون‌های سطحی است برای ساختار بدون لایه MXene  $Ti_3C_2T_x$  در ضریب شکست  $n_s = 1/33$  به ترتیب در زاویه تابشی حدود  $70/10$  درجه و برای ساختار با لایه MXene  $Ti_3C_2T_x$  در  $71/17$  درجه رخ داده است.



شکل ۲: طیف بازتاب با تغییرات ضریب شکست محیط حسگری

از شکل ۲ حساسیت و ضریب شایستگی برای ساختار بدون لایه MXene  $Ti_3C_2T_x$  به ترتیب  $172/4 \text{ deg}/RIU$ ،  $1/RIU$   $48/29$  و در ساختار با لایه MXene  $Ti_3C_2T_x$   $1/RIU$   $43/40$  تعیین شده‌اند. ملاحظه می‌شود که استفاده از تک‌لایه MXene  $Ti_3C_2T_x$  در ساختار باعث افزایش حساسیت شده است. این امر به دلیل محصورشدگی بهتر حامل‌های بار و افزایش برهم کنش نور و ماده است که با هیبرید MXene  $Ti_3C_2T_x$  با گرافن و  $WS_2$  حاصل شده است. در شکل ۳ طیف بازتاب برای مقادیر مختلف ضریب شکست مولکول زیستی نشان داده شده است. دیده می‌شود که با تغییر ضریب شکست

استفاده از مدل درود-لورنتز با رابطه (۱) تعیین می‌گردد [۳ و ۴]:

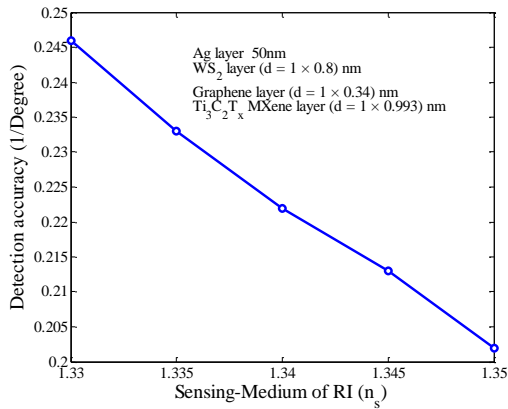
$$n_m = \sqrt{\left[1 - \frac{\lambda^2 \lambda_c}{\lambda_p^2 (\lambda_c + i\lambda)}\right]} \quad (1)$$

که  $\lambda_p$  طول موج پلازما و  $\lambda_c$  طول موج برخورد است، برای فلز نقره  $\lambda_p = 1/4541 \times 10^{-7} \text{ m}$  و  $\lambda_c = 1/7614 \times 10^{-5} \text{ m}$  است.  $WS_2$  با ضریب شکست  $i + 4/89 + 0/314$  و ضخامت تک‌لایه  $0/8 \text{ nm}$  در لایه سوم می‌باشد. ضریب شکست گرافن در بازه‌ی مرئی از  $n = 3 + \frac{iC_1}{3} \lambda$  دست می‌آید که  $C_1 \approx 5/446 \mu\text{m}^{-1}$  است بنابراین در  $\lambda = 633 \text{ nm}$  ضریب شکست گرافن برابر  $i + 1/1487 + 3$  و  $n_{\text{Graphene}} = 0/34 \text{ nm}$  ضخامت تک‌لایه آن است. در لایه ششم MXene  $Ti_3C_2T_x$  با ضریب شکست  $i + 1/33 + 2/38$   $n_{\text{MXene}}$  و ضخامت تک‌لایه  $0/993 \text{ nm}$  مدل شده است. ضریب شکست محیط حسگری به صورت  $\Delta n_s = 1/33$  در نظر گرفته شده که  $\Delta n_s = 0/05$  نشان‌دهنده تغییرات ضریب شکست در اثر جذب زیست‌مولکول‌ها بالای لایه MXene  $Ti_3C_2T_x$  است. برای بررسی عملکرد ساختار پارامترهای حساسیت، دقت تشخیص و ضریب شایستگی از روابط زیر تعریف می‌شوند [۳ و ۴]:

$$S = \frac{\Delta \theta_{\text{SPR}}}{\Delta n_s} \left( \frac{\text{deg}}{RIU} \right), \quad FOM = \frac{S}{FWHM} (RIU^{-1}), \quad (2)$$

$$DA = \frac{1}{FWHM} \left( \frac{1}{\text{deg}} \right).$$

که در آن  $\Delta \theta_{\text{SPR}}$  جابجایی زاویه تشدید پلاسمون سطحی،  $\Delta n_s$  تغییرات ضریب شکست در محیط حسگری، FWHM عرض کامل در نصف مقدار بیشینه است. لازم به ذکر است که SPR با نور قطبش یافته TM به وجود می‌آید. برای مدل‌سازی زیست‌حسگر پیشنهادی و حل معادلات ماکسول از روش عددی FDTD استفاده شده است. زاویه منبع نور ورودی در محدوده  $40$  تا  $85$  درجه



شکل ۵: دقت تشخیص برحسب تغییرات ضریب شکست

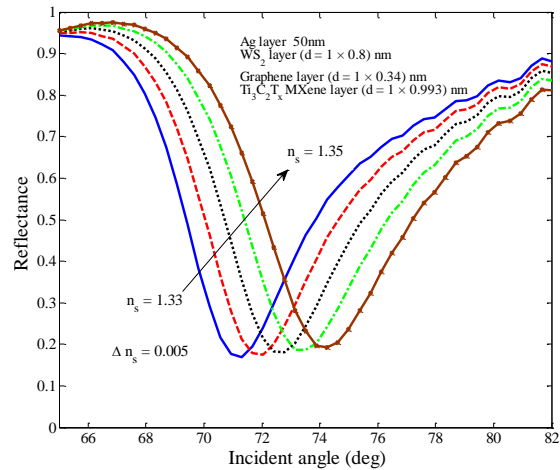
### نتیجه گیری

در این مقاله یک زیست حسگر تشدید پلاسمون سطحی مبتنی بر پیکربندی کرچمان با استفاده از روش FDTD ارزیابی شد. براساس نتایج حساسیت  $186/20 \text{ deg/RIU}$  با استفاده از فلز نقره به ضخامت  $50 \text{ نانومتر}$ ، تک لایه  $WS_2$ ، تک لایه گرافن و تک لایه  $Ti_3C_2T_x$  MXene قابل دستیابی است. استفاده از ماده دوبعدی  $Ti_3C_2T_x$  MXene به دلیل جذب سطحی بالای آن موجب تغییرات بیشتر زاویه تحریک شده است و حساسیت ساختار افزایش یافته است.

### مرجع ها

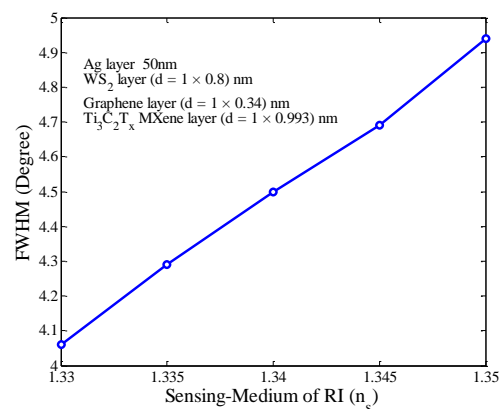
- [1] L. Wu et al., "Few-layer  $Ti_3C_2T_x$  MXene: A promising surface plasmon resonance biosensing material to enhance the sensitivity", *Sensors and Actuators B Chemical*, 2018.
- [2] M. Ghodrati, A. Mir, and A. Farmani, Non-destructive label-free biomaterials detection using tunneling carbon nanotube based biosensor, *IEEE Sensors J.*, vol. 21, pp. 8847 – 8854, 2021.
- [3] Q. Ouyang et al., Sensitivity enhancement of transition metal dichalcogenides/silicon nanostructure-based surface plasmon resonance biosensor, *Sci. Rep.* 6, 28190, 2016.
- [4] S. Pal et al., "Sensitivity enhancement using silicon-black phosphorus-TDMC coated surface plasmon resonance biosensor", *IET Optoelectron.*, vol. 13, pp. 196–201, 2019.

محیط حسگری از  $1/33$  تا  $1/35$  زاویه تشدید پلاسمونی به سمت مقادیر بزرگتر جابجا شده است و همزمان پهنا نیز افزایش پیدا می کند، این افزایش در زاویه SPR نتیجه تغییر بردار موج پلاسمون سطحی است.



شکل ۳: بازتاب برحسب زاویه نور فرودی با تغییر ضریب شکست محیط حسگری از  $1/33$  تا  $1/35$ .

شکل ۴ و ۵ تغییرات FWHM و DA را با تغییر ضریب شکست محیط حسگری از  $1/33$  تا  $1/35$  نشان می دهد. دیده می شود با افزایش ضریب شکست از  $1/33$  تا  $1/35$ ، FWHM از  $4/06$  تا  $4/94$  درجه و DA از  $1/246$  تا  $1/202$   $1/deg$  تغییرات داشته است. پیش بینی می شود که با بهینه سازی ساختار از جمله ضخامت نقره و تعداد لایه های  $Ti_3C_2T_x$  MXene بالای لایه گرافن امکان بهبود پارامترهای عملکردی به ویژه حساسیت بالاتر فراهم شود.



شکل ۴: FWHM برحسب تغییرات ضریب شکست



بیست و هشتمین کنفرانس اپتیک و  
فوتونیک ایران و چهاردهمین کنفرانس  
مهندسی و فناوری فوتونیک ایران،  
دانشگاه شهید چمران اهواز،  
خوزستان، ایران.  
۱۴-۱۲ بهمن ۱۴۰۰



شماره مقاله: A-10-2195-2

عنوان مقاله: استفاده از ماده دوبعدی مکسین برای بهبود عملکرد زیست حسگر بدون برچسب تشدید

پلاسمون سطحی

دبیر محترم علمی کنفرانس

با سلام و احترام

ضمن تشکر از نظریات ارزشمند داوران محترم، در ادامه پاسخ به نظریات مطرح شده توسط داورها، ارائه شده است.

سوالات داورها:

کلمه "دو- بعدی"، چه در عنوان و چه در متن، تبدیل به "دوبعدی" شود.

پاسخ داوری: نکات مرتب با مقاله بررسی گردید کلمه دوبعدی در عنوان و متن مقاله بررسی و اصلاح گردید.