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

استفاده از ماده دوبعدی مکسین برای بهبود عملکرد زیست‌حسگر 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 زیست‌حسگر بدون برچسب تشدید پلاسمون سطحی بر پایه ماده دوبعدی $Ti_3C_2T_x$ MXene پیشنهاد شده است. این زیست‌حسگر یک ساختار فضای آزاد است که برای تحریک پلاسمون‌های سطحی از پیکربندی کرچمان استفاده شده است. ساختار متشکل از منشور BK_7 ، فلز نقره (Ag)، دی‌سولفید تنگستن(WS_2)، گرافن، مکسین کاربید تیتانیوم (MXene $Ti_3C_2T_x$) و محیط حسگری است. برای بررسی عملکرد زیست‌حسگر تشدید پلاسمون سطحی از روش عددی تفاضل محدود در حوزه زمان (FDTD)، استفاده شده است. با توجه به نتایج عددی حساسیت ۱۸۶/۲۰ deg/RIU، ضریب شایستگی ۱/RIU ۴۳/۴۰ و دقت تشخیص ۱/deg ۰/۲۳۳ در طول‌موج ۶۳۳ نانومتر حاصل شده است.

کلید واژه- تشدید پلاسمون سطحی، حساسیت، زیست‌حسگر، 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 BK7 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 deg/ RIU, 43.40 RIU^{-1}, and 0.233 1/deg, respectively at 633 nm wavelength.

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

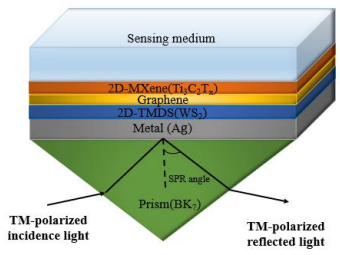
[Downloaded from www.opsi.ir on 2025-07-29]

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 نیترید 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 ماده دوبعدی $Ti_3C_2T_x$ MXene 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 BK_7 ، 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 BK_7 با ضریب شکست ۱/۵۱۵۱ در طول‌موج ۶۳۳ نانومتر قرار دارد. فلز نقره در لایه دوم به ضخامت ۵۰nm قرار گرفته است، ضریب شکست آن با

[Downloaded from www.opsi.ir on 2025-07-29]

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

$$n_m = \sqrt{\left[1-\frac{\lambda^2\lambda_C}{\lambda_P^2(\lambda_C+i\lambda)}\right]} \qquad (۱)$$

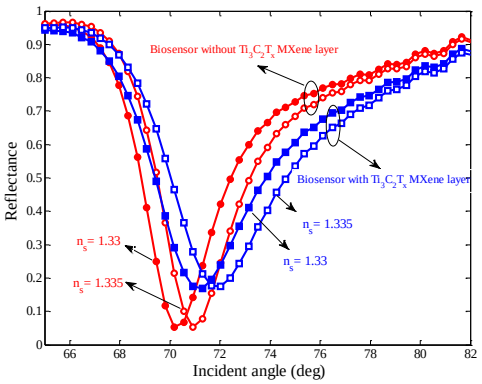
که λ_p طول‌موج پلاسما و λ_c طول‌موج برخورد است، برای فلز نقره λ_p =۱/۴۵۴۱ ×۱۰$^{-۷}$ m و λ_c =۱/۷۶۱۴ ×۱۰$^{-۵}$ m است. WS_2 با ضریب شکست n_{WS2} = ۴/۸۹ + ۰/۳۱۴ i و ضخامت تک‌لایه ۰/۸nm در لایه سوم می‌باشد. ضریب‌شکست گرافن در بازه‌ی مریی از $n = 3 + \frac{iC_1}{3}\lambda$ به دست می‌آید که $C_1 \approx$ ۵/۴۴۶μm$^{-۱}$، است بنابراین درλ= ۶۳۳nm ضریب شکست گرافن برابر $n_{Graphene}$ = ۳ + ۱/۱۴۸۷ i و ضخامت تک‌لایه آن ۰/۳۴ nm است. در لایه ششم $Ti_3C_2T_x$ MXene با ضریب شکست n_{MXene} = ۲/۳۸ + ۱/۳۳ i و ضخامت تک‌لایه ۰/۹۹۳nm مدل شده است. ضریب شکست محیط حسگری به صورت n_s =۱/۳۳ + Δn_s در نظر گرفته شده که Δn_s= ۰/۰۰۵ نشان‌دهنده تغییرات ضریب شکست در اثر جذب زیست‌مولکول‌ها بالای لایه $Ti_3C_2T_x$ MXene است. برای بررسی عملکرد ساختار پارامترهای حساسیت، دقت تشخیص و ضریب شایستگی از روابط زیر تعریف می‌شوند [۳ و ۴]:

$$S = \frac{\Delta\theta_{SPR}}{\Delta n_s}\left(\frac{deg}{RIU}\right), \quad FOM = \frac{S}{FWHM}(RIU^{-1}), \quad DA = \frac{1}{FWHM}\left(\frac{1}{\deg}\right). \qquad (۲)$$

که در آن $\Delta\theta_{SPR}$ جابجایی زاویه تشدید پلاسمون سطحی، Δn_s تغییرات ضریب شکست در محیط حسگری، FWHM عرض‌کامل 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 ۴۰ تا ۸۵ درجه 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 بدون‌لایه $Ti_3C_2T_x$ MXene و با حضور آن نشان می‌دهد. دیده می‌شود که کمینه بازتاب که معرف بیشترین تحریک پلاسمون‌های سطحی است برای ساختار بدون‌لایه $Ti_3C_2T_x$ MXene در ضریب شکست n_s =۱/۳۳ به ترتیب در زاویه تابشی حدود ۷۰/۱۰ درجه و برای ساختار با لایه $Ti_3C_2T_x$ MXene در ۷۱/۱۷ درجه رخ داده است.

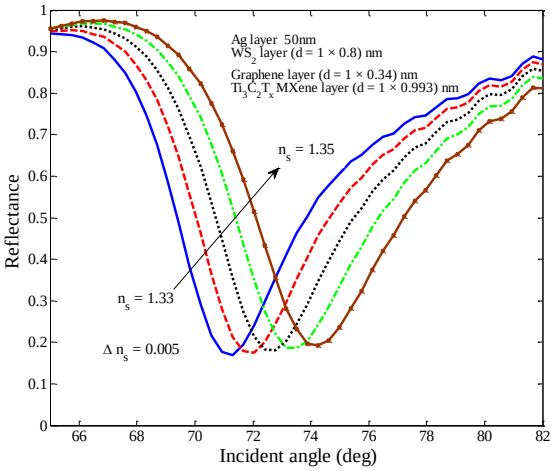


شکل۲: طیف بازتاب با تغییرات ضریب شکست محیط حسگری

از شکل ۲ حساسیت و ضریب شایستگی برای ساختار بدون‌لایه $Ti_3C_2T_x$ MXene به ترتیب ۱۷۲/۴ deg /RIU، ۴۸/۲۹ ۱/RIU و در ساختار با لایه $Ti_3C_2T_x$ MXene ۱۸۶/۲۰ deg /RIU، ۴۳/۴۰ ۱/RIU تعیین شده‌اند. ملاحظه می‌شود که استفاده از تک‌لایه $Ti_3C_2T_x$ MXene 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 $Ti_3C_2T_x$ MXene 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

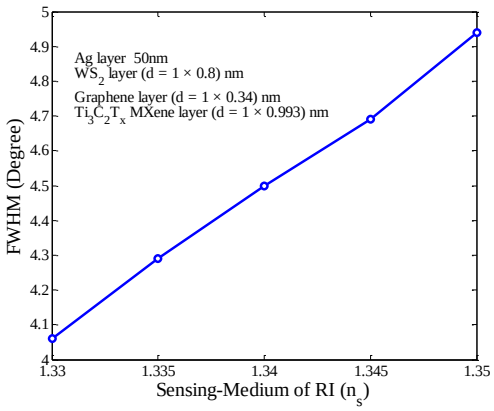
[Downloaded from www.opsi.ir on 2025-07-29]

محیط حسگری از ۱/۳۳ تا ۱/۳۵زاویه تشدید پلاسمونی به سمت مقادیر بزرگ‌تر جابجا شده است و همزمان پهنا نیز افزایش پیدا می‌کند، این افزایش در زاویه SPR نتیجه تغییر بردار موج پلاسمون سطحی است.

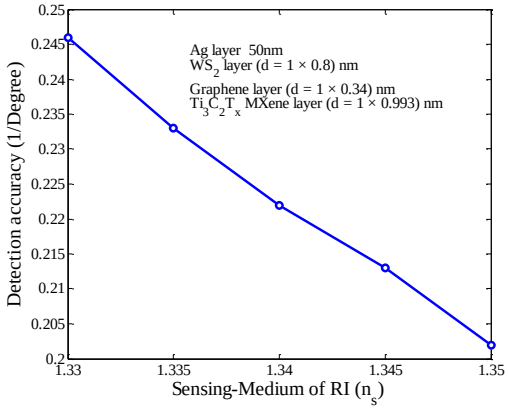


شکل۳: بازتاب برحسب زاویه نور فرودی با تغییر ضریب شکست محیط حسگری از ۱/۳۳ تا ۱/۳۵.

شکل ۴ و ۵ تغییرات FWHM و DA را با تغییر ضریب شکست محیط حسگری از ۱/۳۳ تا ۱/۳۵ نشان می‌دهد. دیده می‌شود با افزایش ضریب شکست از ۱/۳۳ تا ۱/۳۵، FWHM از ۴/۰۶ تا ۴/۹۴ درجه و DA از ۱/deg ۰/۲۴۶ تا ۱/deg ۰/۲۰۲ تغییرات داشته است. پیش‌بینی می‌شود که با بهینه‌سازی ساختار از جمله ضخامت نقره و تعداد لایه‌های $Ti_3C_2T_x$ MXene بالای لایه گرافن امکان بهبود پارامترهای عملکردی به ویژه حساسیت بالاتر فراهم شود.



شکل۴: FWHM برحسب تغییرات ضریب شکست



شکل۵: دقت تشخیص برحسب تغییرات ضریب شکست

نتیجه‌گیری

در این مقاله یک زیست‌حسگر تشدید پلاسمون سطحی مبتنی بر پیکربندی کرچمان با استفاده از روش FDTD ارزیابی شد. براساس نتایج حساسیت ۱۸۶/۲۰ deg/RIU با استفاده از فلز نقره به ضخامت ۵۰ نانومتر، تک‌لایه WS_2، تک‌لایه گرافن و تک‌لایه $Ti_3C_2T_x$ 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.

مرجع‌ها

[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.

[Downloaded from www.opsi.ir on 2025-07-29]

شماره مقاله: **A-10-2195-2**

عنوان مقاله: **استفاده از ماده دوبعدی مکسین برای بهبود عملکرد زیست‌حسگر بدون برچسب تشدید پلاسمون سطحی**

دبیرمحترم 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.

[Downloaded from www.opsi.ir on 2025-07-29]