

## طراحی و شبیه‌سازی یک نانوحسگر زیستی جدید مبتنی بر تشدید پلاسمون سطحی برای تشخیص پیوند DNA

حسین رسولی نوری<sup>۱</sup>، جواد خلیل‌زاده<sup>۲\*</sup>، یدالله شهامت<sup>۳</sup>، علی ریاحی<sup>۳</sup>

۱- دانشجوی کارشناسی ارشد، ۲- دانشیار، ۳- پژوهشگر، دانشگاه جامع امام حسین (ع)

(دریافت: ۹۸/۰۷/۰۱، پذیرش: ۹۸/۱۱/۱۲)

### چکیده

در این مقاله یک حسگر پلاسمونی جدید برای کاربردهای پزشکی نظیر تشخیص پیوند بین تک رشته‌های DNA پیشنهاد و به کمک روش ماتریس انتقال و تفاضل محدود در حوزه زمان (FDTD) شبیه‌سازی و تحلیل شده است. این حسگر جذب مولکول‌های DNA موجود در محلول حسگری (PBS) را از طریق تغییرات حاصل شده در نور انعکاسی ساختار تشخیص می‌دهد. چراکه ضریب شکست محیط سنجش با جذب غلظت‌های مختلف مولکول‌ها تغییر می‌کند. ساختار پیشنهادی متشکل از فلز (طلا/نقره)-اکسید قلع ایندیوم (ITO)-گرافن و محیط سنجش است. مشاهده شد که لایه اکسید فلزی ITO نقش مهمی در پارامترهای حسگر خواهد داشت. با بهینه‌سازی ضخامت فلزات (طلا و نقره)، اکسید فلزی و گرافن، حساسیت بیشینه 75 deg/RIU برای ساختار طلا-گرافن-آنالایت و بیشینه حد تشخیص 58.33 برای ساختار نقره-ITO-آنالایت بدست آمد. در مقایسه با ساختارهای قبلی انجام شده، ساختارهای پیشنهادی در این مقاله به نسبت کارایی بهتری دارند. بنابراین، زیست حسگر بهینه پیشنهادی قادر است پنجره جدیدی برای تشخیص مولکول‌های زیستی باز کند.

**کلیدواژه‌ها:** زیست حسگر، پلاسمون‌های سطحی، گرافن، DNA

## Design and Simulation of a Novel Surface Plasmon Based Bio-Nanosensor for Detection of DNA Hybridization

H. Rasouli Nouri, J. Khalilzadeh\*, Y. Shahamat, A. Riahi

Imam Hossein University

(Received: 23/09/2019; Accepted: 01/02/2020)

### Abstract

*This paper proposes a novel plasmonic sensor for biological applications such as single-stranded DNA detection that it is simulated and analyzed using the FDTD method. The sensor detects the adsorption of DNA molecules in the sensing solution (PBS) by changes in the reflectance of the structure. The mechanism of this sensor is based on the variation of refractive index with the absorption of different concentrations of molecules. The proposed structure consists of metal (gold/silver)-indium tin oxide (ITO)-graphene and an assay medium. The results showed that the ITO metal oxide layer plays an important role in the sensor parameters. By optimizing the thicknesses of metals (gold and silver), the metal oxide, and graphene, we obtained the maximum sensitivity of 75 deg/RIU for the gold-graphene-analyte structure and the maximum detection limit of 58.33 for the silver-ITO-analyte structure. The structures proposed in this paper outperform those presented in previous works. Thus, the proposed biosensor is able to open a new window for biomolecule detection.*

**Keywords:** biosensor, Surface Plasmon, ITO, Graphene, DNA.

## ۱. مقدمه

دیواره لایه سنجش، ضریب شکست آن ناحیه تغییر می‌کند. این اتفاق منجر به تغییر در مشخصه‌های طیف عبوری یا انعکاسی ساختار خواهد شد. این تغییرات می‌تواند شامل تغییر در طول موج تشدید یا تغییر در شدت آن ظاهر شود. تاکنون حسگرهای زیستی نوری متنوعی توسط محققان ارائه شده است. این حسگرها عبارت‌اند از: حسگرهای نوری مبتنی بر تداخل [۹]، حسگرهای مبتنی بر موجبرهای نوری [۱۰]، حسگرهای نوری فیبری [۱۱]، حسگرهای مبتنی بر حلقه‌های تشدیدگر [۱۲] و حسگرهای بلور فوتونی [۱۳].

علاوه بر این‌ها، در چند سال اخیر نشان داده شده است که پلاسمون پلاریتون‌های سطحی<sup>۲</sup> (SPP) از جمله بهترین گزینه‌ها برای ساخت حسگرها جهت دست‌یابی به حساسیت بسیار بالا می‌باشند. در یک تعریف کلی می‌توان گفت که SPP ها، نوسانات دسته‌جمعی الکترون‌های آزاد سطح فلز هستند که تحت تأثیر یک موج الکترومغناطیسی با زاویه فرود و فرکانس خاصی قرار گرفته‌اند [۱۴].

در صورتی که بین الکترون‌های آزاد فلز و موج فرودی تشدید رخ دهد، موج پلاسمونی در مرز مشترک فلز (به‌عنوان ماده‌ای با ثابت دی‌الکتریک حقیقی منفی) و دی‌الکتریک (به‌عنوان ماده‌ای با ثابت دی‌الکتریک مثبت) منتشر خواهد شد. اگر سطح فلز مورد نظر صاف باشد SPPها غیر تابشی بوده و کم‌کم به دلیل قسمت موهومی غیر صفر مربوط به ثابت دی‌الکتریک فلز، انرژی‌شان کاهش پیدا می‌کند؛ اما اگر سطح دارای ناصافی باشد، SPPها علاوه بر جذب توسط فلز، به خاطر پراکندگی ناشی از ناصافی‌ها نیز به فضای آزاد منعکس شده که این نیز منجر به کاهش طول انتشارشان خواهد شد.

امروزه با پیشرفت‌های حاصل‌شده در زمینه فناوری نانو، حسگرهای مبتنی بر پلاسمون‌های سطحی، در علوم مختلفی همچون شیمی، زیست‌شناسی و صنایع غذایی جهت تشخیص انواع مولکول‌های زیستی، بیماری‌ها و آلودگی‌های محیطی مورد استفاده قرار می‌گیرند. از مزایای حسگرهای پلاسمونی می‌توان به حساسیت بسیار بالای طول موج تشدید پلاسمون‌ها نسبت به تغییرات ضریب شکست محیط نمونه اشاره کرد که این ویژگی منجر به افزایش چشم‌گیر پارامترهای معرف کیفیت حسگرها، شامل حساسیت حسگر، حداقل بازتابندگی و نیم‌پهنای باریک طیف بازتابندگی، نسبت به دیگر حسگرهای نوری می‌شود. تاکنون حسگرهای زیستی پلاسمونی متنوعی توسط محققان طراحی و ساخته شده است [۱۵-۲۰].

در بین نانو ساختارهای پلاسمونی مختلف، ساختارهای

امروزه خطر تهدیدات زیستی به خاطر قابلیت بالای آن‌ها در ریشه‌کن کردن تدریجی یک نسل از طریق ایجاد اختلال در روند طبیعی تکثیر سلول‌های افراد یک جامعه، بسیار مورد توجه در بحث بیوتروریسم است. آشکارسازی به کمک حسگرهای زیستی اولین و مهم‌ترین مرحله از سلسله مراحل اقدامات دفاعی در برابر این تهدیدات است. یک حسگر زیستی از دو جزء شامل گیرنده و مبدل تشکیل می‌شود.

گیرنده مولکولی زیستی جهت شناسایی مولکول هدف و مبدل، ساختاری برای تبدیل رویداد تشخیص مولکول هدف به یک سیگنال قابل اندازه‌گیری است [۱ و ۲]. حسگرهای زیستی به خاطر ابعاد نانومتری که دارند قادر به ردیابی میکروارگانیسم‌ها، تشخیص باکتری‌ها، ویروس‌ها و شناسایی آفت‌کش‌ها در مواد غذایی، آب، خاک و هوا هستند. از دیگر کاربردهای این حسگرها می‌توان به کاربرد آن‌ها در جنگ‌های شیمیایی و زیستی برای تشخیص و جلوگیری از تماس و یا استشمام گازهای شیمیایی در منطقه عملیاتی و همچنین جلوگیری جهت انتشار بیماری‌های عفونی اشاره کرد [۳-۵].

در میان انواع حسگرهای زیستی که تا به حال ارائه شده‌اند، حسگرهای زیستی نوری به دلیل مزایایی همچون مصونیت در برابر اثرات الکترومغناطیسی، مقاومت بالا در برابر تغییرات دمایی محیط، دقت و سرعت پاسخ بالا و ... همواره مورد توجه محققان بوده‌اند [۶]. از مهم‌ترین مزیت‌های حسگرهای نوری نسبت به حسگرهای فلورسانسی این است که در روش حسگری به کمک نور دیگر نیازی به نشان‌دار کردن مولکول‌ها با مواد فلورسنت نظیر رنگ نیست<sup>۱</sup>.

اگرچه روش فلورسانسی از حساسیت بالایی برخوردار است اما این روش محدودیت‌هایی در فرایند برچسب گذاری دارد که می‌تواند منجر به تغییر خواص مولکول‌های هدف شود [۷ و ۸]. اما در روش بدون برچسب‌گذاری که در حسگرهای نوری رخ می‌دهد، نیازی به نشان‌دار مولکول‌ها با یک عامل فلورسانسی نیست. علاوه بر این‌ها، روش حسگری نوری نسبتاً آسان و ارزان است.

سازوکار اصلی در دستگاه‌های حسگری بدون برچسب‌گذاری، اندازه‌گیری تغییرات ضریب شکست ناشی از فعل و انفعالات مولکولی است. با اتصال مولکول‌های زیستی به

<sup>۱</sup> در شناسایی مبتنی بر فلورسانس، هر دو مولکول زیستی هدف و مولکول شناسایی زیستی با علامت فلورسنت مانند رنگ نشان‌گذاری یا به اصطلاح برچسب دار می‌شوند. در این روش شدت فلورسانس نشان‌دهنده حضور مولکول هدف است.

<sup>۲</sup> Surface Plasmon Polariton

حد تشخیص بالا ارائه کرده ایم. در ادامه نیز چون لایه های دوبعدی مورد استفاده جاذب مولکول های DNA بودند لذا نانوحسگر پیشنهاد شده می تواند در تشخیص مولکول های DNA مورد استفاده قرار گیرد. با پیوند مولکول های DNA مجهول با مولکول های DNA سنجشی، ضریب شکست محیط آنالایت تغییر کرده و در نتیجه زاویه تشدید جابه جا خواهد شد. از این طریق سنجش توسط حسگر انجام می گیرد. روشی که در این مقاله برای تحقق فرآیند سنجش به آن پرداخته می شود، استفاده از تحریک امواج سطحی و اندازه گیری طیف بازتاب داخلی کلی تضعیف شده در ساختار است.

## ۲. معرفی ساختار

سیستم حسگر طراحی شده در شکل (۱) نمایش داده شده است. این حسگر از زیر لایه ای از جنس SF11 با ضریب شکست ( $n_0$ ) تشکیل شده است که لایه از جنس BK7 به ضخامت  $d_1$  و ضریب شکست ( $n_1$ ) روی آن قرار دارد. به منظور اتصال فلز مورد نظر جهت تشدید SPP با سطح BK7، یک چسب تیتانیومی به ضخامت  $d_2$  و ضریب شکست ( $n_2$ ) بر روی BK7 قرار داده شده است.  $n_3$  ضریب شکست فلز و  $d_3$  ضخامت آن است. این فلز به منظور تحریک پلاسمون ها بر روی لایه اتصال دهنده نشانده می شود. لایه فلزی می تواند نقره یا طلا باشد. در ادامه، بر روی لایه فلزی، لایه ای از جنس ITO با ضریب شکست ( $n_4$ ) و ضخامت  $d_4$  قرار داده می شود. در انتها نیز لایه هایی از ماده دوبعدی (گرافن) بر روی سطح ITO قرار گرفته است. ضریب شکست و ضخامت گرافن به کار برده شده به ترتیب از  $n_5$  و  $d_5$  است.

در این حسگر، نور لیزر تحت زاویه  $\theta$  به سیستم تابیده و بعد از عبور از ساختار، به مرز فلز-ITO برخورد کرده و باعث تشدید SPP در مرز ITO با ماده زیستی هدف (آنالایت) می شود. تحریک موج سطحی منجر به ظهور یک افت شدید در طیف بازتابی حسگر بر حسب زاویه تشدید پلاسمونی امواج سطحی خواهد شد. با تغییر ضریب شکست ماده زیستی، ثابت انتشار موج پلاسمونی ( $\beta_{SPP}$ ) طبق رابطه (۱) تغییر خواهد کرد [۳۶]. با تغییر ثابت انتشار موج SPP زاویه تشدید نیز جابه جا خواهد شد. با شناسایی زاویه تشدید جدید و اندازه گیری میزان تغییرات آن، می توان تغییرات ایجاد شده در ضریب شکست ماده زیستی هدف را تعیین کرد.

$$\beta_{SPP} = \frac{2\pi}{\lambda_0} \sqrt{\frac{\epsilon_{metal} \times n_{analyte}^2}{\epsilon_{metal} + n_{analyte}^2}} \quad (1)$$

در این رابطه  $\epsilon_{metal}$  ثابت دی الکتریک فلز و  $n_{analyte}$  ضریب

پلاسمونی مبتنی بر فلزات نقره و طلا به دلیل خواص منحصربه فرد اپتیکی و الکترونیکی که مربوط به تشدید پلاسمون های سطحی است، بسیار مورد توجه بوده اند. برای نمونه، آلکا و همکارانش در سال ۲۰۱۵ یک ساختار حسگری مبتنی بر گرافن با حساسیت زاویه ای  $33/98 \text{deg}/\text{RIU}$  ارائه دادند [۲۱]. یک سال بعد، حسگر دیگری با حساسیت  $47/43 \text{deg}/\text{RIU}$  توسط مایریا پیشنهاد شد [۲۲]. سایفور و همکارانش در سال ۲۰۱۷ حسگری مبتنی بر گرافن و  $\text{MoS}_2$  طراحی و ارائه دادند [۲۳]. حساسیت حسگر آن ها  $87/8 \text{deg}/\text{RIU}$  بود. در همان سال شهامت و همکارش نیز یک ساختار موجبری جهت تشخیص  $\text{DNA}^1$  در باند تراهرتز ارائه دادند [۲۴]. حسگرهای دیگری در سال های بعد توسط محققان ارائه شد [۲۵-۲۷].

اخیراً نشان داده شده است که استفاده از برخی اکسیدهای فلزی می تواند در بهبود خواص پلاسمونی مؤثر باشند [۲۸ و ۲۹]. اکسید تیتانیوم<sup>۲</sup> از جمله این فلزات است که به دلیل ویژگی های منحصربه فردی همچون کنترل پذیر بودن ثابت دی الکتریکی آن، مقاومت الکتریکی کم و پایداری بالایی که دارد توانسته توجهات زیادی را به خود جلب کند. این فلز در ناحیه مرئی شفاف بوده و به همین جهت در سلول های خورشیدی، نمایشگرها، حسگرها و دیگر ادوات الکترواپتیکی بسیار مورد استفاده قرار می گیرد.

در سال ۲۰۱۳ گروه میسرا با به کار گیری اکسید فلزی ITO، یک نانو حسگر پلاسمونی جهت تشخیص PH خون ارائه دادند [۳۰]. آن ها نشان دادند که حساسیت حسگر به ضخامت لایه اکسید فلزی وابستگی زیادی دارد.

علاوه بر اکسیدهای فلزی که قادر به بهبود کارایی حسگرها هستند، اخیراً نیز نشان داده شده است که مواد دوبعدی نظیر گرافن، مولیبدوم و تنگستن دی سولفید نیز به خاطر سطح تماس بالایی که با مولکول های اطراف خود دارند می توانند باعث افزایش کارایی حسگرهای پلاسمونی شوند [۳۱-۳۳]. برای نمونه، در سال ۲۰۱۸ مایریا و همکارانش نشان دادند که استفاده از گرافن می تواند حسگرهای پلاسمونی را به طور قابل ملاحظه ای بهبود بخشد [۳۴]. وانگ نیز در همان سال نشان داد که با لایه شانی تنگستن دی سولفید ( $\text{WS}_2$ ) بر روی نقره می توان به حسگری با حساسیت بالا رسید [۳۵].

همان طور که در بالا اشاره شد به کار گیری ITO و مواد دوبعدی می توانند منجر به افزایش کارایی حسگرهای پلاسمونی گردند. بر همین اساس، در این مقاله با ترکیب فلزات نقره/طلا، ITO و مواد دوبعدی، یک حسگر پلاسمونی جدید با حساسیت و

<sup>1</sup> Deoxyribonucleic acid

<sup>2</sup> Indium Tin Oxide (Ito)

زمان<sup>۱</sup> (FDTD) با گام‌های مکانی ( $\Delta z = 1nm$ ) و گام‌های زمانی ( $\Delta t = \Delta z/2c$ ) استفاده شده است که در آن  $c$  سرعت انتشار نور در فضای آزاد هست [۴۳].

جدول ۱. ضرایب شکست مواد مختلف مورد استفاده در ساختار حسگری

ماده	ضریب شکست
Au	$0.181+3/0.68i$
Ag	$0.135+3/9.85i$
ITO	$1/858+2/924i$
چسب تیتانیوم	$2/1526+2/924i$
SF11	$1/7786$
BK7	$1/5151$
گرافن	$3+0/1487i$

در این مقاله، جهت یافتن بهترین حساسیت، حد تشخیص و فاکتور کیفیت، ساختارهای مختلف شامل: نقره-آنالایت، طلا-آنالایت، نقره-ITO-آنالایت، طلا-ITO-آنالایت و ساختارهای متشکل از لایه‌های طلا/نقره-ITO-گرافن-آنالایت مورد بررسی قرار گرفته‌اند. نتایج نشان دادند که ساختار سوم نسبت به بقیه ساختارها از حساسیت بهتری برخوردار است. حسگر پیشنهادی در این مقاله ضمن استفاده در تشخیص‌های زیستی، می‌تواند به‌عنوان ساختاری بهینه از لحاظ لایه‌شانی و استفاده در حسگرهای فیبری نیز به کار گرفته شود.

### ۳. ماتریس انتقال

به‌منظور تحلیل عددی ساختار، از روش ماتریس انتقال استفاده شد. با در نظر گرفتن محور  $x$  مماس بر سطح جدایی محورها و عمود بر محور  $z$  و با در نظر گرفتن شرایط مرزی برای میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی، میزان انعکاس نور از ساختار ( $R$ ) از مزدوج ضریب انعکاس ( $r_{TM}$ ) به‌دست می‌آید [۴۴]. این ضریب به‌صورت زیر محاسبه می‌شود.

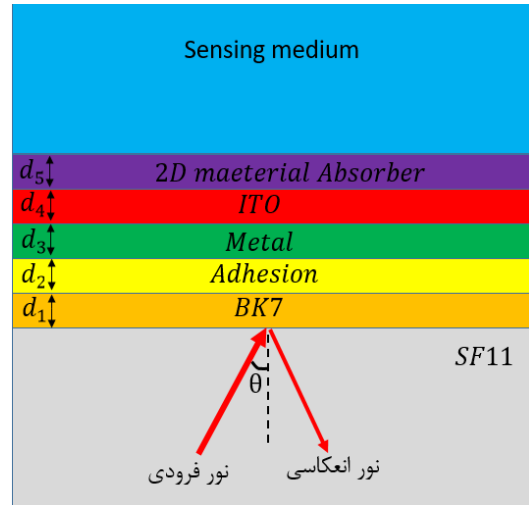
$$r_{TM} = \frac{(M_{11}+M_{12}qN)qN-(M_{21}+M_{22}qN)}{(M_{11}+M_{12}qN)qN+(M_{21}+M_{22}qN)} \quad (۸)$$

که در آن  $N$  معرف شماره محیط و ضرایب  $M_{ij}$  عناصر ماتریس انتقال است که به‌صورت زیر تعریف می‌شوند.

$$M_{ij} = \begin{bmatrix} \cos\beta_k & -i/q_k \sin\beta_k \\ -iq_k \sin\beta_k & \cos\beta_k \end{bmatrix}$$

که در آن داریم:

شکست محیط آنالایت (sensing medium) است.



شکل ۱. ساختار نانو زیست حسگر پلاسمونی پیشنهاد شده

ثابت دی‌الکتریک طلا (Au)، نقره (Ag) و ITO نیز بر اساس مدل درود طبق روابط (۳-۵) در نظر گرفته می‌شوند [۳۷-۳۹]:

$$\epsilon_{Au} = 1 - \frac{1394.43166}{\omega^2 + i0.70327\omega} \quad (۳)$$

$$\epsilon_{Ag} = 1 - \frac{1867.11236}{\omega^2 + i0.35671\omega} \quad (۴)$$

$$\epsilon_{ITO} = 3.8 - \frac{123.682492}{\omega^2 + i0.56046\omega} \quad (۵)$$

زیر لایه SF11 و لایه BK7 نیز به‌ترتیب دارای ضرایب شکست زیر می‌باشند [۴۰-۴۱].

$$n_{SF11} = \sqrt{1 + \frac{1.73759695\lambda^2}{\lambda^2 - 0.013188707}} \quad (۶)$$

$$\sqrt{1 + \frac{0.313747346\lambda^2}{\lambda^2 - 0.0623068142} + \frac{1.89878101\lambda^2}{\lambda^2 - 155.23629}}$$

$$n_{BK7} = \sqrt{1 + \frac{1.03961212\lambda^2}{\lambda^2 - 0.00600069867}} \quad (۷)$$

$$\sqrt{1 + \frac{0.231792344\lambda^2}{\lambda^2 - 0.0200179744} + \frac{1.01046945\lambda^2}{\lambda^2 - 103.560653}}$$

در این روابط  $\omega$  فرکانس زاویه‌ای برحسب ( $rad/sec$ ) و  $\lambda$  طول موج نور در فضای آزاد برحسب میکرومتر است. با جاگذاری طول موج لیزر ( $632.8 nm$ ) در روابط ۳-۷، ضریب شکست Au، Ag، ITO، چسب تیتانیوم، SF11، BK7 و گرافن محاسبه و در جدول (۱) ارائه شده است [۴۲].

به‌منظور تحریک ساختار از یک منبع نور لیزر هلیوم-نئون (He-Ne) با طول موج  $632.8 nm$  نانومتر استفاده کرده‌ایم که مطابق شکل (۱) از پایین‌بر ساختار تابانده می‌شود. همچنین برای آنالیز رفتار نوری حسگر و محاسبه پروفایل میدان‌های الکترومغناطیسی به‌ترتیب از ماتریس انتقال و روش عددی تفاضل محدود در حوزه

<sup>۱</sup> Finite Difrensial Time Domain

$$M = \begin{bmatrix} \cos(\beta_1) & \frac{-i}{q_1} \sin(\beta_1) \\ -iq_1 \sin(\beta_1) & \cos(\beta_1) \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} \cos(\beta_2) & \frac{-i}{q_2} \sin(\beta_2) \\ -iq_2 \sin(\beta_2) & \cos(\beta_2) \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} \cos(\beta_3) & \frac{-i}{q_3} \sin(\beta_3) \\ -iq_3 \sin(\beta_3) & \cos(\beta_3) \end{bmatrix} \quad (15)$$

که در آن برای مد TM داریم:

$$\beta_1 = \frac{2\pi}{\lambda_0} L_1 \sqrt{\varepsilon_1 - \varepsilon_1 \sin^2 \theta} \quad (16)$$

$$\beta_2 = \frac{2\pi}{\lambda_0} L_2 \sqrt{\varepsilon_2 - \varepsilon_0 \sin^2 \theta} \quad (17)$$

$$\beta_3 = \frac{2\pi}{\lambda_0} L_3 \sqrt{\varepsilon_3 - \varepsilon_0 \sin^2 \theta} \quad (18)$$

$$q_i = \frac{\sqrt{\varepsilon_i - \varepsilon_0 \sin^2 \theta}}{\varepsilon_i}, i = 0, 1, 2, 3, 4 \quad (19)$$

که در آن اندیس صفر مربوط به آنالایت، یک مربوط به فلز، اندیس ۲ مربوط به چسب، اندیس ۳ مربوط به BK7 و اندیس ۴ مربوط به ماده SF11 است. ضریب انعکاس از رابطه زیر به دست خواهد آمد:

$$\xi_r = \frac{A+B-C-D}{A+B+C+D} \quad (20)$$

که در آن داریم:

$$A = \cos \beta_1 \cos \beta_2 \cos \beta_3 q_0 - \frac{q_2 q_0}{q_1} \sin \beta_1 \sin \beta_2 \cos \beta_3 - \frac{q_3 q_0}{q_2} \sin \beta_3 \sin \beta_2 \cos \beta_1 - \frac{q_3 q_0}{q_1} \sin \beta_1 \sin \beta_3 \cos \beta_2 \quad (21)$$

$$B = -\frac{iq_0 q_4}{q_3} \cos \beta_1 \cos \beta_2 \sin \beta_3 + i \frac{q_2 q_0 q_4}{q_1 q_3} \sin \beta_1 \sin \beta_2 \sin \beta_3 - \frac{iq_0 q_4}{q_2} \cos \beta_1 \sin \beta_2 \cos \beta_3 - \frac{iq_0 q_4}{q_1} \cos \beta_2 \sin \beta_1 \cos \beta_3 \quad (22)$$

$$C = -iq_1 \cos \beta_3 \cos \beta_2 \sin \beta_1 - iq_2 \cos \beta_1 \sin \beta_2 \cos \beta_3 - iq_3 \cos \beta_1 \sin \beta_3 \cos \beta_2 + \frac{iq_1 q_3}{q_2} \sin \beta_2 \sin \beta_1 \sin \beta_3 \quad (23)$$

$$D = -\frac{q_1 q_4}{q_3} \sin \beta_3 \cos \beta_2 \sin \beta_1 - \frac{q_2 q_4}{q_3} \cos \beta_1 \sin \beta_2 \sin \beta_3 + q_4 \cos \beta_1 \cos \beta_2 \cos \beta_3 - \frac{q_1}{q_2} \sin \beta_2 \sin \beta_1 \cos \beta_3 \quad (24)$$

شکل (۲) طیف انعکاسی ساختار نقره-آنالایت را برای مدهای TE و TM برای دو حالت شبیه‌سازی و تئوری نشان می‌دهد. در کل

$$\beta_k = \frac{2\pi d_k}{\lambda_0} \sqrt{d_k - n_1^2 \sin^2 \theta} \quad (9)$$

ضریب  $q_k$  به ترتیب برای مدهای TE و TM به صورت زیر است:

$$q_k = \sqrt{\varepsilon_k - n_1^2 \sin^2 \theta} / \varepsilon_k \quad (TM \text{ Mode}) \quad (10)$$

$$q_k = \sqrt{\varepsilon_k - n_1^2 \sin^2 \theta} \quad (TE \text{ Mode}) \quad (11)$$

عمدتاً چهار روش برای مکانیزم حسگری یک حسگر تعریف می‌شود. ۱- روش شدتی، در این روش طول موج و زاویه تشدید ثابت بوده و با اندازه‌گیری میزان تغییرات در شدت نور بازتابشی فرآیند حسگری صورت می‌گیرد. ۲- روش جابه جایی زاویه‌ای، در این روش طول موج ثابت بوده و زاویه تشدید پلاسمونی تغییر خواهد کرد. ۳- روش طیفی، در این روش، زاویه نور فرودی ثابت بوده و با اندازه‌گیری میزان جابه‌جایی طول موج تشدید، ماده مجهول شناسایی می‌شود. ۴- روش فازی، در این روش با اندازه‌گیری اختلاف فاز میان مدهای TE و TM نور فرودی، برای یک طول موج و زاویه تشدید ثابت، فرآیند تشخیص ماده هدف صورت می‌گیرد. در این مقاله با توجه به نوع طراحی و ساختارهای ارائه شده، از روش جابه‌جایی زاویه‌ای استفاده می‌کنیم. حساسیت برای ساختار زاویه‌ای به صورت رابطه (۱۲) تعریف می‌شوند:

$$S_\theta = \frac{d\theta_{spp}}{dn_{Analyte}} \quad (12)$$

علاوه بر حساسیت، نسبت سیگنال به نویز حسگر، موسوم به حد تشخیص (DA) و فاکتور کیفیت (Qf) نیز برای یک حسگر به صورت زیر تعریف می‌شوند.

$$DA = \frac{d\theta_{spp}}{FWHM} \quad (13)$$

$$Qf = \frac{S}{FWHM} \quad (14)$$

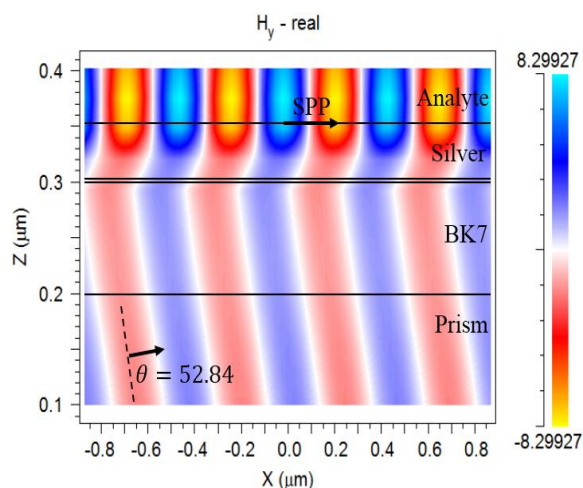
که در آن،  $FWHM$  پهنای طیف را نشان می‌دهد. هر چه حساسیت، حد تشخیص و فاکتور کیفیت حسگر بالاتر باشد، آن حسگر مناسب‌تر هست.

#### ۴. بررسی عملکرد ساختارهای مختلف حسگر

##### ۴-۱. ساختار فلز-آنالایت

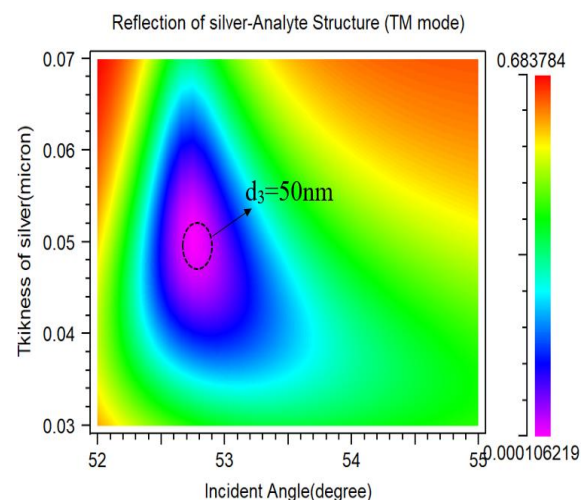
در این ساختار محیط آنالایت در تماس با فلز خواهد بود. به عبارت دیگر لایه‌های گرافن و ITO برداشته شده تا آنالایت به طور مستقیم در تماس با فلز قرار گیرد. برای چنین ساختاری، مطابق روابط (۹-۱۱)، ضریب انعکاس به صورت زیر است:

شکل (۳) پروفایل میدان مغناطیسی ساختار فوق را در زاویه تشدید ۵۲/۸۴ درجه برای مد TM نشان می‌دهد. همان‌طور که مشاهده می‌کنیم در این زاویه، موج SPP در مرز مشترک نقره و آنالایت تحریک شده و در سطح مشترک آن‌ها منتشر می‌شود. ضریب شکست محیط نمونه در این حالت ۱/۳۳۳ در نظر گرفته شده است.



شکل ۳. پروفایل میدان مغناطیسی در زاویه تشدید ۵۲/۸۴ درجه در ساختار نقره-آنالایت. ضخامت نقره ۵۰ نانومتر است.

در ادامه به منظور مشخص کردن ضخامت بهینه‌ای از نقره، مطابق شکل (۴)، طیف انعکاسی ساختار برای ضخامت‌های مختلف نقره بررسی شد. در شکل (۴)، محور افقی زاویه فرودی نور برحسب درجه (۵۲ تا ۵۵ درجه) و محور عمودی ضخامت لایه نقره برحسب میکرومتر (۰/۰۳ تا ۰/۰۷ میکرون) را نشان می‌دهند. مطابق شکل، ضخامت بهینه برای نقره حدود ۵۰ نانومتر است.



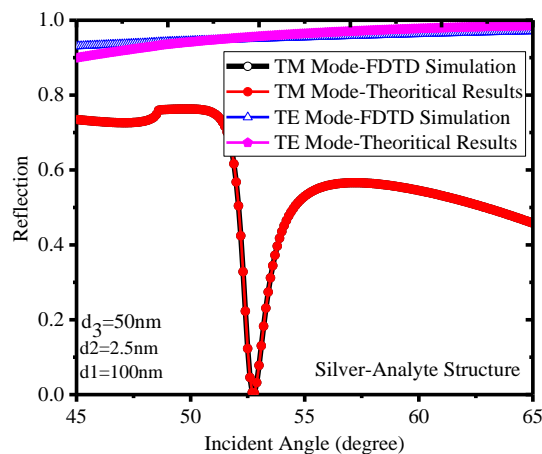
شکل ۴. میزان انعکاسی از ساختار نقره-آنالایت با ضخامت‌های مختلف نقره. ضریب شکست محیط آنالایت ۱/۳۳۳ است.

شکل (۵) طیف انعکاسی ساختار نقره-آنالایت را برای ضخامت بهینه ۵۰ نانومتر برای ضرایب مختلف آنالایت (۱/۳۳۳، ۱/۳۳۵،

این مقاله، ضخامت BK7 (d<sub>1</sub>) برابر ۱۰۰ نانومتر و چسب تیتانیومی (d<sub>2</sub>) ۲/۵ نانومتر در نظر گرفته می‌شوند. در شکل (۲) ضخامت نقره (d<sub>3</sub>) ۵۰ نانومتر می‌باشد. همان‌طور که مشاهده می‌شود تطابق بسیار خوبی میان نتایج حاصل از شبیه‌سازی FDTD و نتایج تئوری حاصل از ماتریس انتقال وجود دارد. مطابق شکل، برای مد TM دره‌ای تیز با پهنای ۱/۰۲ درجه در زاویه ۵۲/۸۴ درجه وجود دارد که معرف تشدید پلاسمون است. مطابق شکل، در این زاویه میزان انعکاس از ساختار نزدیک به صفر است؛ اما برای مد TE میزان انعکاس برای تمام زوایا نزدیک واحد است. به عبارت دیگر، برای این مد، هیچ پلاسمونی تحریک نمی‌شود. دلیل این اتفاق به شرط پیوستگی میدان‌های H<sub>y</sub> و E<sub>z</sub> در مرز مشترک فلز-آنالایت برمی‌گردد. این شرط برای مد TM به صورت:

$$\frac{\beta_{\text{فلز}}}{\beta_{\text{آنالایت}}} = -\frac{\epsilon_{\text{فلز}}}{\epsilon_{\text{آنالایت}}}$$

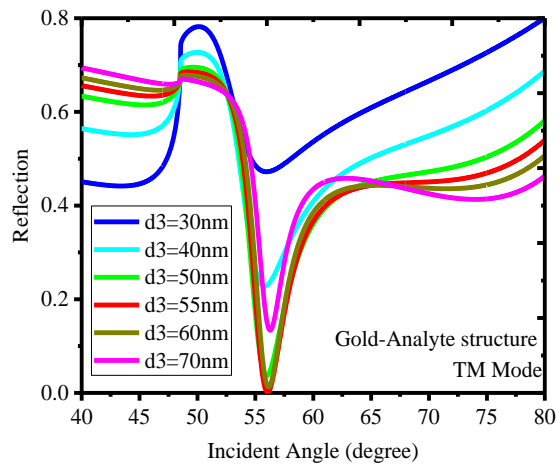
پلاسمونی در مرز مشترک است. با توجه به مثبت بودن آنالایت  $\epsilon$  و بخش حقیقی  $\beta_i$  ها و از طرفی چون قسمت موهومی فلزات (در اینجا طلا و نقره) در باند مرئی منفی است، شرط لازم برای تشدید این مد می‌تواند برقرار باشد. اما برای مد TE تحت هیچ شرایطی شرط پیوستگی میدان‌ها در مرز فلز-آنالایت به‌منظور تشدید پلاسمون‌ها محقق نخواهد شد. از نظر توصیفی نیز می‌توان اشاره کرد که چون در مد TE، میدان الکتریکی نور فرودی هیچ مولفه‌ای در امتداد سطح فلز ندارد لذا قادر به انتشار موج پلاسمونی در سطح فلز نخواهد بود. اما برای مد TM قضیه متفاوت است. برای این مد، میدان مغناطیسی عمود بر ساختار بوده (در امتداد محور yها) و لذا میدان الکتریکی نور فرودی دارای مؤلفه در امتداد سطح فلز است. این مؤلفه می‌تواند بر الکترون‌های آزاد سطح فلز نیرویی مماسی وارد کرده و از این‌رو، امکان وجود موج پلاسمونی در امتداد سطح فلز برای مد TM وجود خواهد داشت.



شکل ۲. طیف انعکاسی از ساختار نقره-آنالایت. ضخامت BK7 ۱۰۰ نانومتر، چسب تیتانیومی ۲/۵ نانومتر و ضخامت نقره ۵۰ نانومتر می‌باشد.



لایه‌ای ضد اکسید مانند گرافن بر آن نشانده شود که در بخش بعد اثرات این لایه ضد اکسید را مورد بررسی قرار داده‌ایم.



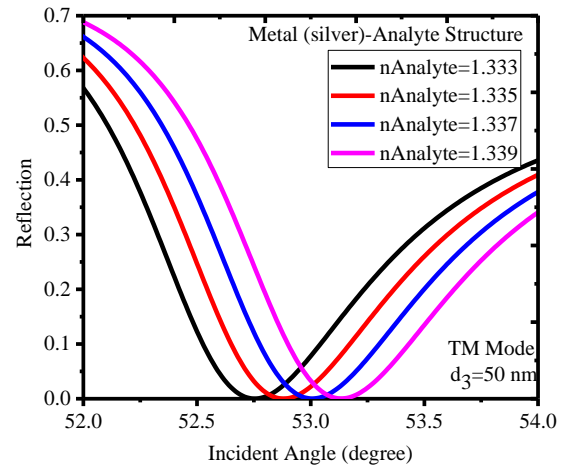
شکل ۶. طیف انعکاسی از ساختار طلا-آنالیت برای ضخامت‌های مختلف طلا.

#### ۲-۴. ساختار فلز-گرافن-آنالیت

در این بخش، اثر لایه‌ای از گرافن بر روی لایه فلزی مورد بررسی قرار گرفت. ساختار مورد بررسی در این بخش شامل لایه‌ای از گرافن به ضخامت  $LG = N_G \times 0.34 \text{ nm}$  است که در آن  $0.34 \text{ nm}$  ضخامت یک تک‌لایه از گرافن و  $N_G$  تعداد لایه‌های گرافن است. شکل (۷) طیف انعکاسی مد TM را برای تعداد لایه‌های مختلف گرافن نشان می‌دهد. همان‌طور که مشاهده می‌شود دو دره یکی در حوالی  $53^\circ$  درجه (مد اول) و دیگری در حوالی  $81^\circ$  درجه (مد دوم) رخ می‌دهد. هر کدام از این دره‌ها معرف مدهای مختلف SPP هستند. با افزایش تعداد لایه‌ها، دره اول رو به تضعیف می‌رود. همچنین زاویه تشدید مربوط به مد اول به خاطر تغییراتی که در ضریب انعکاس ساختار به خاطر اضافه شدن لایه گرافنی ایجاد شده تغییر می‌کند. در واقع با توجه به اینکه مجموع لایه‌های نقره و گرافن مانند یک کاواک فابری-پرو برای نور فرودی عمل می‌کنند لذا با افزایش ضخامت گرافن، طول موج تشدید کاواک نیز افزایش پیدا خواهد کرد که این نیز منجر به افزایش طول موج تشدید خواهد شد. این در صورتی است که مد دوم با افزایش تعداد لایه‌ها جابه‌جایی فراوانی ندارد. به‌طور خلاصه، انتخاب سه لایه گرافن ضمن حفظ لایه نقره از اکسید شدن، دره پلاسمونی تیز و عمیقی را نیز برای ساختار فراهم خواهد آورد.

به‌منظور درک بهتر رفتار نور در دره‌های پلاسمونیک مشاهده‌شده در شکل (۷)، پروفایل میدان مغناطیسی در زوایای تشدید مربوط به مد اول:  $53/241^\circ$  درجه و مد دوم:  $81/563^\circ$  درجه در شکل‌های (۸) و (۹) ارائه شده است. همان‌طور که

نشان می‌دهد. مطابق شکل، با افزایش ضریب شکست آنالیت از  $1/333$  به  $1/339$ ، زاویه تشدید از  $52/84^\circ$  به  $53/14^\circ$  درجه جابه‌جا می‌شود. حساسیت زاویه‌ای، فاکتور کیفیت و حد تشخیص<sup>۱</sup> این ساختار به ترتیب برابر با  $50 \text{ deg.RIU}^{-1}$ ،  $49/01$  و  $0/294$  به دست می‌آید.



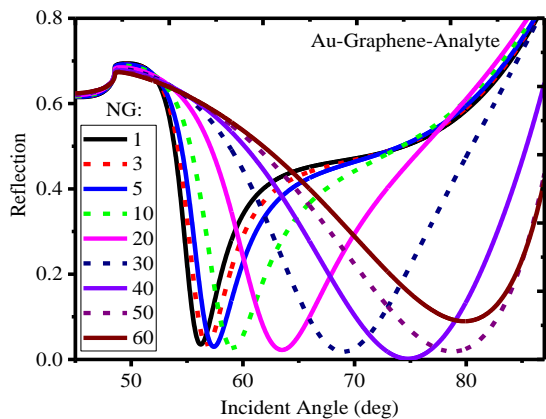
شکل ۵. طیف انعکاسی ساختار نقره-آنالیت برای مقادیر مختلف ضریب شکست آنالیت. ضخامت نقره  $50 \text{ nm}$  است.

در ادامه اثر طلا مورد بررسی قرار گرفت. شکل (۶) طیف انعکاسی را برای فلز طلا با ضخامت‌های مختلف  $30^\circ$ ،  $40^\circ$ ،  $50^\circ$ ،  $55^\circ$  و  $60^\circ$  و  $70^\circ$  نانومتر نشان می‌دهد. همان‌طور که مشاهده می‌کنیم با افزایش ضخامت طلا از  $30^\circ$  تا  $55^\circ$  نانومتر، تشدید پلاسمونی تقویت می‌شود (عمیق‌تر می‌شود)، اما برای ضخامت‌های بزرگ‌تر از  $55^\circ$  نانومتر این حالت رو به تضعیف می‌رود. این رفتار به خاطر افزایش تلفات نور در ضخامت‌های بالای طلا است، به‌طوری‌که نور نمی‌تواند خود را به‌طور مؤثری به مرز طلا-آنالیت رسانده و منجر به تحریک پلاسمون‌ها گردد. مطابق نتیجه به دست آمده، ضخامت بهینه طلا برای ساختار طلا-آنالیت حدود  $55 \text{ nm}$  خواهد بود. برای این ساختار، زاویه تشدید و پهنای طیف به ترتیب برابر با  $55/96^\circ$  و  $3/1$  درجه هستند.

همچنین با افزایش ضریب شکست آنالیت در این ساختار از  $1/333$  به  $1/339$ ، زاویه تشدید از  $55/96^\circ$  به  $56/40^\circ$  درجه جابه‌جا می‌شود. حساسیت زاویه‌ای، فاکتور کیفیت و حد تشخیص (برای این مقدار تغییر ضریب شکست، یعنی:  $0/006$ ) ساختار طلا-آنالیت به ترتیب برابر با  $73/33 \text{ deg.RIU}^{-1}$ ،  $23/65$  و  $0/142$  به دست آمد. لازم به ذکر است که اگرچه حسگر مبتنی بر نقره از حد تشخیص بالاتری برخوردار است اما این فلز به سرعت در مقابل هوا اکسید می‌شود. این اتفاق می‌تواند تأثیر زیادی بر عملکرد حسگر داشته باشد. به همین دلیل لازم است

<sup>۱</sup> حد تشخیص برای میزان تغییر ضریب شکست  $0/006$  است.

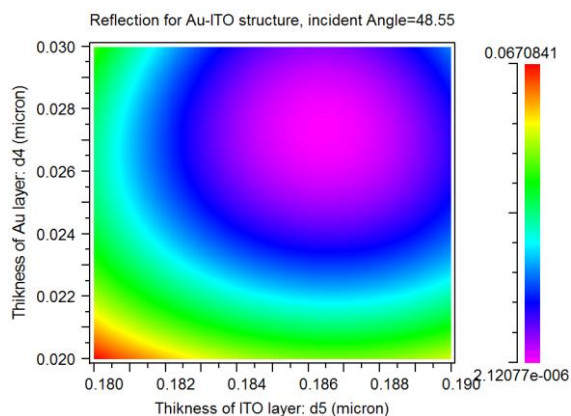
شکل (۱۰) نیز طیف انعکاسی ساختار فوق را برای فلز طلا نشان می‌دهد. همان‌طور که مشاهده می‌کنیم با افزایش ضخامت گرافن، زاویه تشدید پلاسمونیک به سمت مقادیر بزرگ‌تر پیش می‌رود هم‌زمان پهنا نیز افزایش پیدا می‌کند. حساسیت زاویه‌ای، حد تشخیص (برای تغییر ضریب شکست برابر با ۰/۰۰۶) و فاکتور کیفیت ساختار طلا-گرافن-آنالایت به ترتیب برابر با  $1 \text{ deg.RIU}^{-1}$  و  $۰/۱۲۵$ ،  $۷۵$  و  $۲۰/۸۳ \text{ RIU}^{-1}$  به دست آمد.



شکل ۱۰. طیف انعکاسی از ساختار طلا-گرافن-آنالایت برای تعداد لایه‌های مختلف گرافن.

### ۳-۴. ساختار فلز-ITO-آنالایت

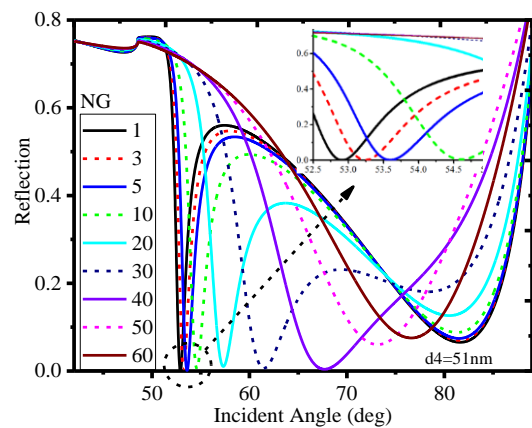
نتیجه شبیه‌سازی عملکرد حسگر بعدی که در آن به جای لایه‌های گرافن از اکسید فلزی ITO استفاده می‌کند در شکل (۱۱) ارائه شده است. مطابق این شکل، ضخامت بهینه برای طلا و ITO به ترتیب برابر با ۱۸۶ و ۲۷ نانومتر خواهند بود.



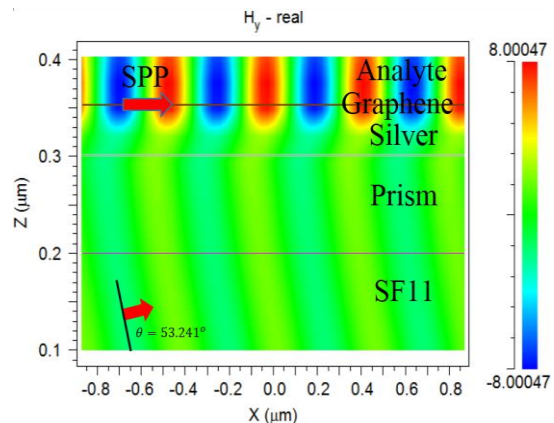
شکل ۱۱. میزان انعکاس از ساختار طلا-ITO-آنالایت با ضخامت‌های مختلف طلا و ITO. زاویه نور فرودی ۴۸/۵۵ درجه می‌باشد.

شکل (۱۲) طیف انعکاسی ساختار را برای ضخامت‌های بهینه فوق برای ضرایب شکست مختلف آنالایت نشان می‌دهد. میزان تغییر جابه‌جایی زاویه تشدید برای هنگامی که ضریب شکست آنالایت از ۱/۳۳۳ به ۱/۳۳۷ افزایش پیدا می‌کند، ۰/۱۹۲ درجه است.

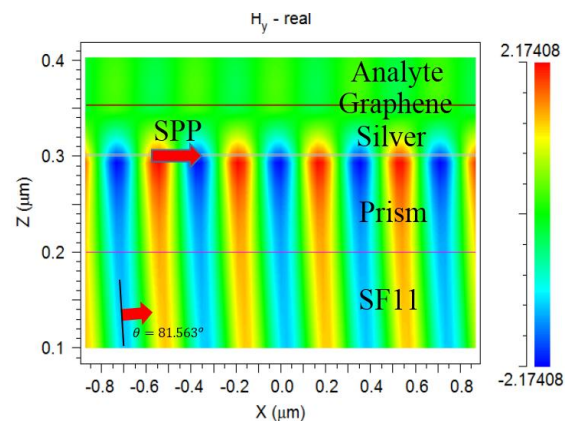
مشاهده می‌شود دره اول مربوط به حالتی است که پلاسمونیک در مرز بین گرافن و آنالایت تشکیل می‌شود. ولی برای دره دوم، پلاسمونیک در مرز مشترک نقره با لایه دی‌الکتریک زیرین خود شکل می‌گیرد. حساسیت زاویه‌ای، حد تشخیص و فاکتور کیفیت ساختار نقره-گرافن-آنالایت برای سه لایه گرافن به ترتیب برابر با  $۰/۳۴۶$ ،  $۶۶ \text{ deg.RIU}^{-1}$  و  $۵۷/۷۴ \text{ RIU}^{-1}$  به دست آمد.



شکل ۷. طیف انعکاسی از ساختار نقره-گرافن-آنالایت برای تعداد لایه‌های مختلف گرافن.

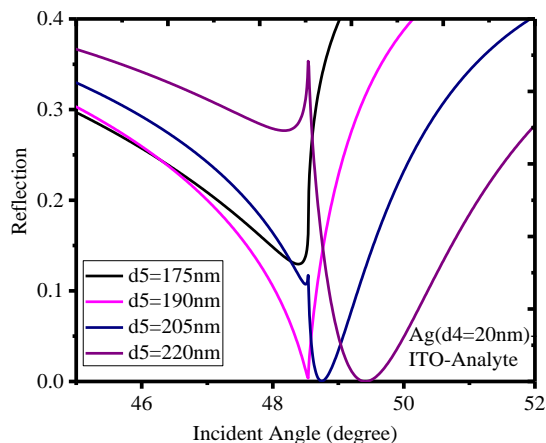


شکل ۸. پروفایل میدان مغناطیسی در زاویه فرود ۵۳/۲۴۱ درجه در ساختار نقره-گرافن-آنالایت.



شکل ۹. پروفایل میدان مغناطیسی در زاویه فرود ۸۱/۵۶۳ درجه در ساختار نقره-گرافن-آنالایت.

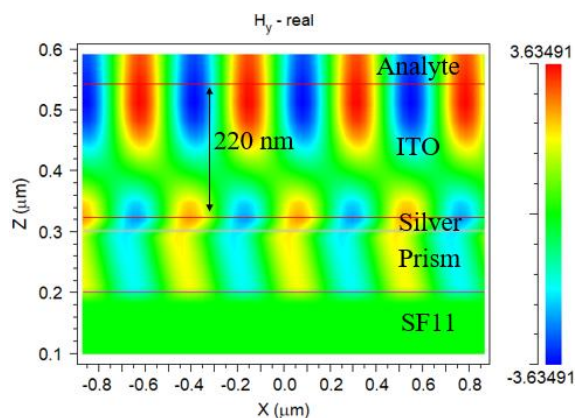




شکل ۱۳. طیف انعکاسی از ساختار نقره-ITO-آنالایت برای ضخامت‌های مختلف ITO.

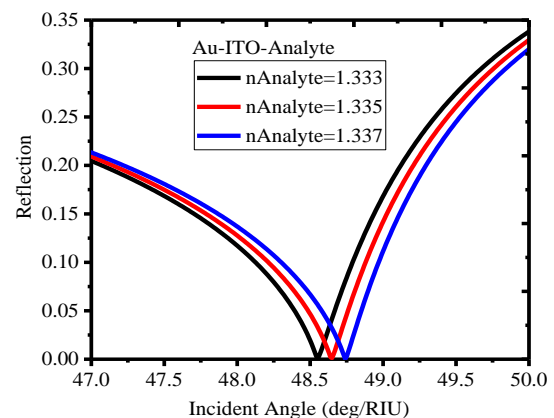
به‌منظور درک بهتر منشأ دره و قله حاصل شده در طیف زاویه‌ای، پروفایل میدان در زوایای مربوط به این تشدیدها مورد بررسی قرار گرفت. شکل (۱۴) پروفایل میدان را برای زاویه فرود  $49/41$  درجه، متناظر با دره ظاهرشده در شکل (۱۳)، برای ضخامت  $220$  نانومتر نشان می‌دهد. همان‌طور که مشاهده می‌شود در این زاویه، به‌طور موثری، مد پلاسمونی در مرز ITO با آنالایت تشدید شده است.

شکل (۱۵) نیز پروفایل میدان را در زاویه  $48/54$  درجه متناظر با قله ظاهرشده برای ضخامت  $220$  نانومتر نشان می‌دهد. همان‌طور که مشاهده می‌شود در این زاویه، بر خلاف حالت قبل، در هر دو طرف ITO امواج تحریک شده‌اند.



شکل ۱۴. پروفایل میدان مغناطیسی در زاویه فرود  $49/41$  درجه در ساختار فلز-ITO-آنالایت.

شکل (۱۶) طیف انعکاسی ساختار نقره-ITO-آنالایت را برای ضخامت‌های بهینه فوق‌الذکر برای ضرایب مختلف آنالایت نشان می‌دهد. همان‌طور که مشاهده می‌کنیم با افزایش ضریب شکست آنالایت، زاویه تشدید نیز به سمت مقادیر بیشتر جابه‌جا می‌شود. مطابق شکل (۱۷)، با افزایش ضریب شکست آنالایت از  $1/333$  به



شکل ۱۲. طیف انعکاسی از ساختار طلا-ITO-آنالایت برای مقادیر مختلف ضریب شکست آنالایت.

حساسیت زاویه‌ای، فاکتور کیفیت و حد تشخیص برای ساختار طلا-ITO-آنالایت به ترتیب برابر با  $48 \text{ deg.RIU}^{-1}$ ،  $28/4$  و  $0/17$  به دست آمد. لازم به ذکر است که طبق رابطه (۱۳)، حد تشخیص به مقدار جابه‌جایی زاویه تشدید وابسته است. پرواضح است که هر چه تغییر ضریب شکست بیشتر باشد، تغییرات زاویه تشدید نیز بیشتر خواهد بود. بر همین اساس در محاسبه حد تشخیص اشاره به اینکه این مقدار حد تشخیص برای چه میزان تغییر در ضریب شکست است ضروری می‌باشد. در این مقاله با توجه به ساختار طیفی خاصی که به خاطر ساختار بهینه حاصل شده، نمودارهای خروجی برای تغییر ضریب شکست  $0/06$  هستند. اما همان‌طور که در انتهای مقاله خواهیم دید، مقالات قبلی حد تشخیص را برای تغییر ضریب شکست  $0/07$  گزارش داده‌اند. به همین منظور و به جهت مقایسه نتایج این مقاله با مقالات دیگر، ما حد تشخیص را برای  $\Delta n = 0.07$  نیز خواهیم آورد. برای ساختار طلا-ITO-آنالایت حد تشخیص برای این میزان تغییر در ضریب شکست  $2/06$  به دست آمد. لازم به ذکر است که با توجه به خطی بودن تغییر زاویه تشدید نسبت به تغییرات ضریب شکست، پارامترهای حساسیت و فاکتور کیفیت تقریباً ثابت بوده و مستقل از  $\Delta n$  هستند.

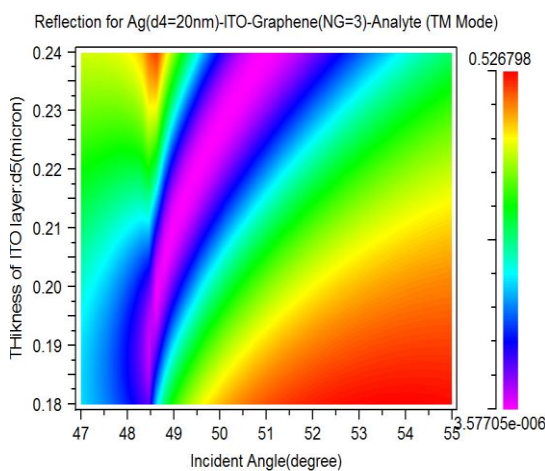
شکل (۱۳) طیف انعکاسی را برای نقره در ضخامت‌های مختلف ITO نشان می‌دهد. مطابق این شکل با افزایش ضخامت لایه ITO، زاویه تشدید به سمت جلو جابه‌جا می‌شود. همچنین برای ضخامت‌های بزرگ‌تر از  $200$  نانومتر، قله‌ای تیز در حوالی زاویه تشدید اولیه به وجود می‌آید. پهنای قله حاصل شده برای ضخامت  $220$  نانومتر از ITO برابر با  $0/06$  درجه است. با توجه به تیز بودن این قله، در ادامه از آن به‌عنوان مرجعی برای حسگری استفاده خواهد شد.

۴-۴. ساختار فلز-ITO-گرافن-آنالایت

در این بخش اثر گرافن را بر رفتار ساختار فلز-ITO-آنالایت مورد بررسی قرار می‌دهیم. برای این منظور سه لایه گرافن بر روی ITO می‌نشانیم. شکل (۱۸) طیف انعکاسی ساختار را برای مد TM برای فلز نقره نشان می‌دهند. مطابق شکل، با افزایش ضخامت ITO از ۱۸۰ تا ۲۴۰ نانومتر، زاویه تشدید از ۴۸/۴۵۳ به ۵۰/۸۵۴ درجه تغییر می‌کند.

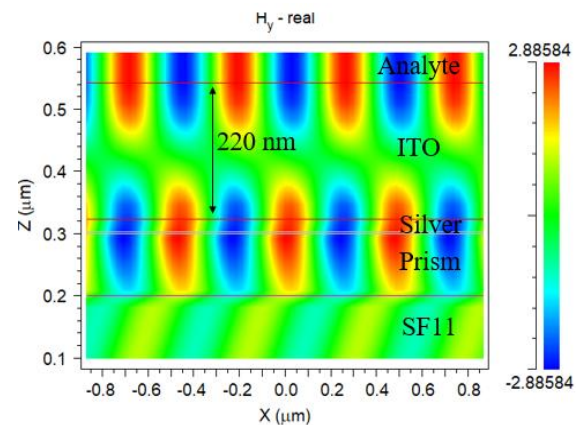
شکل (۱۹) نیز طیف انعکاسی ساختار را برای ضخامت‌های مختلف نقره و ITO هنگامی که نور فرودی تحت زاویه ۴۹.۸۸ درجه بر ساختار تابانده می‌شود نشان می‌دهد. مطابق شکل، ضخامت بهینه برای نقره و ITO به ترتیب ۱۹.۸ و ۲۲۵ نانومتر است.

شکل (۲۰) طیف انعکاسی ساختار نقره-ITO-گرافن-آنالایت را با سه لایه گرافن برای ضخامت‌های بهینه فوق‌الذکر برای ضرایب مختلف آنالایت (۱/۳۳۳، ۱/۳۳۴، ۱/۳۳۵، ۱/۳۳۶ و ۱/۳۳۷) نشان می‌دهد. برای ساختار فوق، بیشینه حساسیت زاویه‌ای و فاکتور کیفیت به ترتیب برابر با  $47 \text{ deg.RIU}^{-1}$  و  $1 \text{ RIU}^{-1}$  برابر با  $783/33$  به دست آمد. تاکنون، در کلیه ساختارها، حد تشخیص‌های گزارش شده برای تغییرات ضریب شکست برابر با  $0.06$  بوده است. در ادامه، به منظور مقایسه کارایی ساختارهای حسگری پیشنهادی با دیگر ساختارها و با توجه به اینکه مقالات مورد ارزیابی حد تشخیص ساختارهایشان را برای  $\Delta n = 0.07$  گزارش کرده‌اند، لذا، ما نیز برای این میزان  $\Delta n$  مقدار حساسیت ساختارها را حساب کردیم. جدول (۲) خلاصه حساسیت، حد تشخیص و فاکتور کیفیت ساختارهای مختلف را در معیار سنجشی یکسان ( $\Delta n = 0.07$ ) نمایش می‌دهد.

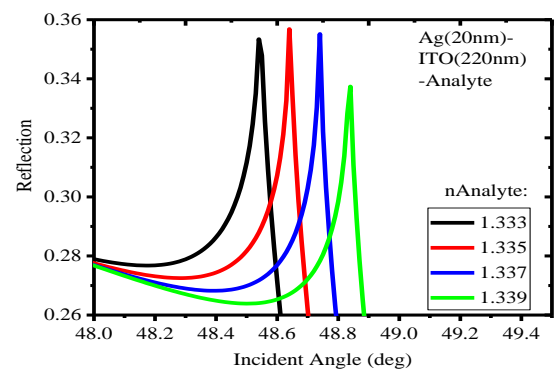


شکل ۱۸. میزان انعکاس از ساختار نقره-ITO-گرافن-آنالایت برای سه لایه گرافن و با ضخامت‌های مختلف ITO. ضریب شکست محیط آنالایت  $1/333$  هست.

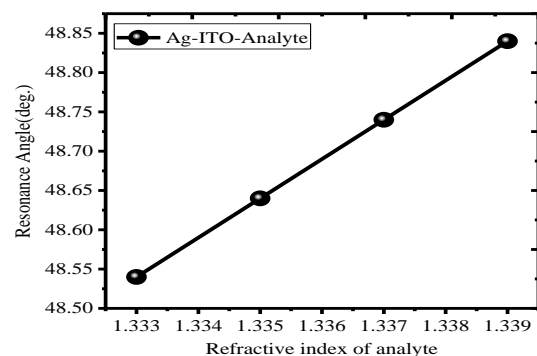
زاویه تشدید از  $48/54$  به صورت تقریباً خطی به مقدار  $48/84$  افزایش پیدا می‌کند. به عبارت دیگر داریم  $\Delta n = 0.006$ . با توجه به نیم پهنای طیفی معادل  $0/06$  درجه برای این ساختار، بیشینه حساسیت زاویه‌ای، فاکتور کیفیت و حد تشخیص (برای تغییر ضریب شکست  $0/06$ ) به ترتیب برابر با  $50 \text{ deg.RIU}^{-1}$ ،  $1 \text{ RIU}^{-1}$  و  $833/33$  و  $5$  به دست خواهد آمد. همچنین با افزایش ضریب شکست از  $1/333$  به  $1/403$  ( $\Delta n = 0.07$ )، زاویه تشدید از  $48/54$  به مقدار  $52/04$  افزایش پیدا کرد. بنابراین حد تشخیص برای  $\Delta n = 0.07$  برابر خواهد بود با  $58/33$ .



شکل ۱۵. پروفایل میدان مغناطیسی در زاویه فرود  $48/54$  درجه در ساختار فلز-ITO-آنالایت.



شکل ۱۶. طیف انعکاسی ساختار نقره-ITO-آنالایت برای مقادیر مختلف ضریب شکست آنالایت.



شکل ۱۷. زاویه تشدید پاسمون برای ساختار طلا-ITO-آنالایت برای مقادیر مختلف ضریب شکست آنالایت.

مشاهده می‌کنیم ساختار پیشنهادی نسبت به دیگر ساختارها از کارایی بالاتری برخوردار است. جدول‌های (۴) و (۵) میزان تغییرات حساسیت، حد تشخیص و فاکتور کیفیت را به ترتیب برای ساختارهای (نقره-ITO-آنالایت) و (نقره-ITO-گرافن سه لایه‌ای-آنالایت) در مقایسه با مراجع [۲۱-۲۳] به صورت درصدی نشان می‌دهند.

**جدول ۳.** مقایسه حساسیت، فاکتور کیفیت و حد تشخیص (برای تغییر ضریب شکست ۰/۰۷) ساختارهای مختلف با ساختارهای ارائه شده در این مقاله

مرجع	سال	حساسیت	فاکتور کیفیت	حد تشخیص
[۲۱]	۲۰۱۵	۳۳/۹۸	۲/۷۸۰۱۹	۰/۲۹۸۷
[۲۲]	۲۰۱۶	۴۷/۴۳	۳۹۵/۲۵	۲۷/۶۷
[۲۳]	۲۰۱۷	۸۷/۸	۱۷/۵۶	۱/۲۸
ساختار نقره-ITO-آنالایت	*	۵۰	۸۳۳/۳۳	۵۸/۳۳
ساختار نقره-ITO-گرافن-آنالایت	*	۴۷	۷۸۳/۳	۵۴/۸۳

**جدول ۴.** مقایسه درصد تغییرات حساسیت، فاکتور کیفیت و حد تشخیص (برای تغییر ضریب شکست ۰/۰۷) برای ساختار نقره-ITO-آنالایت با ساختارهای ارائه شده در مراجع [۲۱]، [۲۲] و [۲۳]

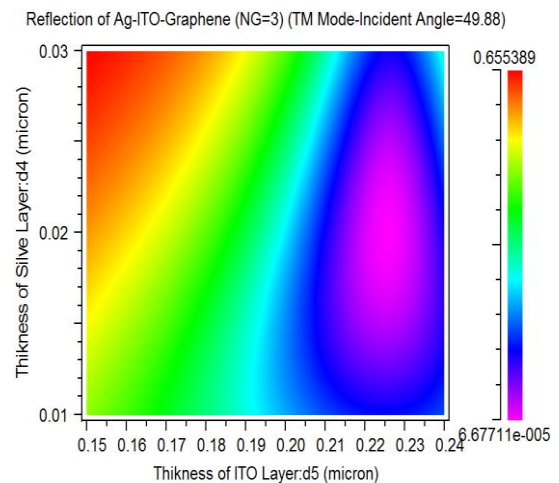
مرجع	درصد تغییرات در حساسیت	درصد تغییرات در فاکتور کیفیت	درصد تغییرات در حد تشخیص
[۲۱]	+۴۷٪/۱۴٪	+۲۹۸۷۳٪/۸۵٪	+۱۹۴۲۷٪/۹۵٪
[۲۲]	+۵/۴۱٪	+۱۱۰/۸۴٪	+۱۱۰/۸۱٪
[۲۳]	-۴۳/۱٪	+۴۶۴۵/۶۲٪	+۴۴۵۷/۰۳

**جدول ۵.** مقایسه درصد تغییرات حساسیت، فاکتور کیفیت و حد تشخیص (برای تغییر ضریب شکست ۰/۰۷) برای ساختار نقره-ITO-گرافن سه لایه ای-آنالایت با ساختارهای ارائه شده در مراجع [۲۱]، [۲۲] و [۲۳].

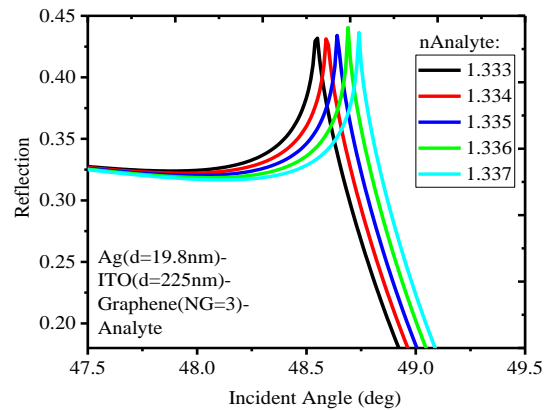
مرجع	درصد تغییرات در حساسیت	درصد تغییرات در فاکتور کیفیت	درصد تغییرات در حد تشخیص
[۲۱]	+۳۸٪/۳۲٪	+۲۸۰۷۴/۳۳٪	+۱۸۲۵۶/۲۱٪
[۲۲]	-۰/٪/۹۱٪	+۹۸/۲٪	+۹۸/۱۶٪
[۲۳]	+۴۶٪/۴۷٪	+۴۳۶۰/۷۱٪	+۴۱۸۳/۵۹٪

### ۵. شناسایی DNA

امروزه مشخص شده است که تشخیص پیوندهای میان رشته‌های DNA در تشخیص پیشگیری از بیماری‌ها بسیار کارآمد هست



**شکل ۱۹.** میزان انعکاس از ساختار نقره-ITO-آنالایت برای با ضخامت‌های مختلف نقره و ITO در زاویه تشدید ۴۹/۸۸ درجه.

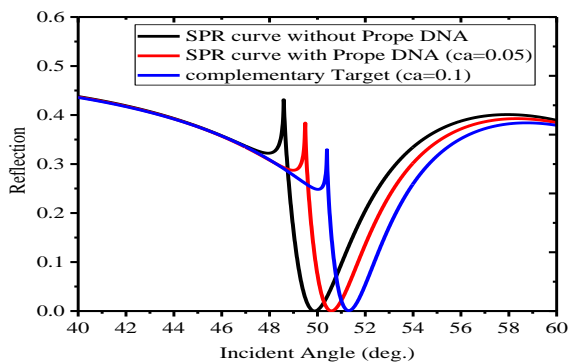


**شکل ۲۰.** طیف انعکاسی از ساختار نقره-ITO-گرافن-آنالایت برای مقادیر مختلف ضریب شکست آنالایت.

**جدول ۲.** حساسیت، حد تشخیص و فاکتور کیفیت ساختارهای مختلف

ساختار	S (nm/RIU)	D.A ( $\Delta n = 0.07$ )	QF (1/RIU)
نقره-آنالایت	۶۶/۵۷	۴/۵۶۸	۶۵/۲۶
طلا-آنالایت	۷۴/۸۵	۱/۶۹	۲۴/۱۴
نقره-گرافن (سه لایه)-آنالایت	۶۷/۱	۴/۱۱	۵۸/۷۴
طلا-گرافن (سه لایه)-آنالایت	۸۱/۴	۱/۵۸	۲۲/۶۱
نقره-ITO-آنالایت	۵۰	۵۸/۳۳	۸۳۳/۳۳
طلا-ITO-آنالایت	۴۹/۸۵	۲/۰۶	۲۹/۵
نقره-ITO-گرافن (سه لایه)-آنالایت	۴۷	۵۴/۸۳	۷۸۳/۳۳

جدول (۳) نیز حساسیت، حد تشخیص و فاکتور کیفیت ساختارهای مختلف ارائه شده در چند سال اخیر را به همراه نتایج حاصل شده از حسگر پیشنهادی مقایسه می‌کند. همان‌طور که



شکل ۲۲. طیف انعکاسی از ساختار نقره-ITO-گرافن-آنالایت در حالت بدون DNA و به همراه آن.

## ۶. نتیجه‌گیری

هدف از این تحقیق بررسی عملکرد بهینه حسگرهای زیستی مبتنی بر نور است. به همین منظور اثر لایه‌های مختلف فلزی بر روی موج‌بر نوری بررسی و شبیه‌سازی شدند. مطالعه نظری بر اساس ماتریس ردیابی نور در این ساختار انجام شده و در حل معادلات از روش FDTD استفاده شد. بهترین ساختار نسبی به منظور دستیابی به بیشترین حساسیت، حد تشخیص و فاکتور کیفیت انتخاب شد. نتایج نشان دادند که نقره-ITO-آنالایت تقریباً بهترین عملکرد حسگری را برای آشکارسازی نسبت به بقیه ساختارهای ارائه شده دارا هست. با توجه به ضرایب شکست مختلف آنالایتهای حسگر پیشنهادی قابلیت استفاده در کاربردهای مختلف دفاعی نظیر آشکارسازی عوامل بیولوژیک، آنزیم‌ها، عوامل شیمیایی و مواد منفجره را دارد.

## ۷. مراجع ها

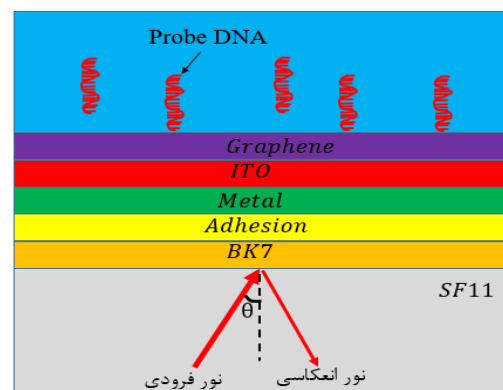
- [1] Bohunicky, B.; Mousa, S. A. "Biosensors: The New Wave in Cancer Diagnosis"; Nanotech. Sci. Appl. 2011, 4, 1.
- [2] Najafi, M.; Monzavi, M.; Taghizadeh, M. J. "Sensing Properties Investigation of Graphene Oxide Reduced by Various Agents for Detection of DMMP"; Adv. Defence Sci. Technol. 2016, 10, 269-276.
- [3] Cheng, F. Y.; Chen, C. T.; Yeh, C. S. "Comparative Efficiencies of Photothermal Destruction of Malignant Cells Using Antibody-Coated Silica@Au Nanoshells, Hollow Au/Ag Nanospheres and Au Nanorods"; Nanotechnology 2009, 20, 425104.
- [4] Bahabady, A. M.; Olyae, S. "Two-Curve-Shaped Biosensor for Detecting Glucose Concentration and Salinity of Seawater Based on Photonic Crystal Nano-Ring Resonator"; Sensor Lett. 2015, 13, 774-777.
- [5] Minaei, M. E.; Saadati, M.; Najafi, M.; Honari, H. "Immobilization and Hybridization of DNA/DNA of the rfbE Gene Escherichia Coli O157:H7 on Gold Electrode Surface for the Detection of Specific Sequences by Electrochemical Impedance Spectroscopy Method"; Adv. Defence Sci. Technol. 2014, 4, 279-283.

[۴۵ و ۴۶]. لذا در این بخش، از ساختار بهینه نقره-ITO-گرافن-آنالایت برای تشخیص مولکول‌های DNA هدف<sup>۱</sup> استفاده می‌کنیم. برای این منظور، مطابق آنچه در شکل (۲۱) نشان داده شده است، محیط سنجش محتوی مولکول‌های DNA هدف، مایع PBS<sup>۲</sup> با ضریب شکست ۱/۳۳۳ به‌عنوان محیط حسگری<sup>۳</sup> است. با تشکیل پیوند میان دو مولکول DNA تک‌رشته‌ای<sup>۴</sup> (ss-DNA)، یعنی مولکول تک‌رشته‌ای DNA کشف‌کننده هدف که روی سطح گرافن ثابت هستند و مولکول DNA هدف (مجهول) که در مایع PBS قرار دارند و قرار است شناسایی شوند، ساختار دو رشته‌ای (ds-DNA) تشکیل می‌گردد. تشکیل چنین پیوندهایی منجر به تغییر غلظت مولاری محلول PBS خواهد شد و از این طریق ضریب شکست اپتیکی آن نیز تغییر خواهد کرد. ضریب شکست محیط آنالایت ( $n_s^a$ ) بعد از جذب مولکول‌های DNA هدف مطابق رابطه (۲۵) به‌دست می‌آید [۴۷ و ۴۸]،

$$n_s^a = n_s + c_a \frac{dn}{dc} \quad (25)$$

که در آن،  $c_a$  غلظت مولکول‌های جذب‌شده،  $n_s$  ضریب شکست محیط آنالایت قبل از ایجاد پیوند و  $dn/dc$  نرخ افزایش ضریب شکست محیط آنالایت بعد از جذب هست که برای محیط PBS برابر با  $0.182 \text{ gm}^{-3}$  است.

شکل (۲۲) طیف انعکاسی ساختار نقره-ITO-گرافن-PBS را قبل از اضافه کردن مولکول‌های DNA جستجوگر و بعد از اضافه کردن آن نشان می‌دهد. در این شکل منظور از پیوند کامل<sup>۵</sup> معرف زمانی است که دو تک رشته از DNA (ss-DNA) یکی به‌عنوان جستجوگر و دیگری به‌عنوان هدف پیوند برقرار کرده و یک ساختار دو رشته‌ای هلیکس<sup>۶</sup> (ds-DNA) تشکیل می‌دهند. این اتفاق زمانی رخ می‌دهد که دو تک رشته مشابه هم باشند.



شکل ۲۱. ساختار نانو زیست حسگر پلاسمونی پیشنهاد شده برای آشکارسازی DNA.

- <sup>۱</sup> Target Dna
- <sup>۲</sup> Phosphate Buffer Saline
- <sup>۳</sup> Sensing Medium
- <sup>۴</sup> Single Strand Target Dna (Ss-Dna)
- <sup>۵</sup> Complementary Target
- <sup>۶</sup> Double-Stranded (Dsdna) Helixstructure



- [23] Saifur Rahman, M.; Shamim Anower, Md.; Rabiul Hasan, Md.; Biplob Hossain, Md.; Ismail Haque, Md. "Design and Numerical Analysis of Highly Sensitive Au-MoS<sub>2</sub>-Graphene Based Hybrid Surface Plasmon Resonance Biosensor"; *Opt. Commun.* 2015, 357, 106-112.
- [24] Shahamat, Y.; Vahedi, M. "Terahertz Plasmon-Induced Transparency Based on Asymmetric Dual-Disk Resonators Coupled to a Semiconductor InSb Waveguide and its Biosensor Application"; *Opt. Eng.* 2017, 56, 067109.
- [25] Kumar, N. J.; Maharana, P. K.; Jha, R. "Dielectric Over-layer Assisted Graphene, its Oxide and MoS<sub>2</sub>-Based Fibre Optic Sensor with High Field Enhancement"; *J. Phy. D.* 2017, 405112.
- [26] Zdeněk, F.; Juřík, T.; Kovář, D.; Trnková, L.; Skládal, P. "Nanoparticle-Based Immunochemical Biosensors and Assays: Recent Advances and Challenges"; *Chem. Rev.* 117, 2017, 9973-10042.
- [27] Shushama, K. N.; Rana, M. M.; Inum, R.; Hossain, M. B. "Graphene Coated Fiber Optic Surface Plasmon Resonance Biosensor for the DNA Hybridization Detection: Simulation Analysis"; *Opt. Commun.* 2017, 383, 186-90.
- [28] Szunerits, S.; Castel, X.; Boukherroub, R. "Surface Plasmon Resonance Investigation of Silver and Gold Films Coated with Thin Indium Tin Oxide Layers: Influence on Stability and Sensitivity"; *J. Phys. Chem. C.* 2008, 112, 15813-15817.
- [29] Han, L.; He, X.; Ge, L.; Huang, T.; Ding, H.; Wu, C. "Comprehensive Study of SPR Biosensor Performance Based on Metal-ITO-Graphene/TMDC Hybrid Multilayer"; *Plasmonics* 2019, 14, 2021-2030.
- [30] Mishra, S. K.; Gupta, B. D. "Surface Plasmon Resonance Based Fiber Optic PH Sensor Utilizing Ag/ITO/Al/Hydrogel Layers"; *Analyst* 2013, 138, 2640-2646.
- [31] Chow, E.; Grot, A.; Mirkarimi, L. W.; Sigalas, M.; Girolami, G. "Ultracompact Biochemical Sensor Built with Two-Dimensional Photonic Crystal Microcavity"; *Opt. Lett.* 2004, 29, 1093-1098.
- [32] Lopez-Sanchez, O.; Lembke, D.; Kayci, M.; Radenovic, A.; Kis, A. "Ultrasensitive Photodetectors Based on Monolayer MoS<sub>2</sub>"; *Nat. Nanotechnol.* 2013, 8, 497.
- [33] Ouyang, Q.; Zeng, S.; Dinh, X. Q.; Coquet, P.; Yong, K. T. "Sensitivity Enhancement of MoS<sub>2</sub> Nanosheet Based Surface Plasmon Resonance Biosensor"; *Proc. Eng.* 2016, 140, 134-139.
- [34] Maurya, J.; François, A.; Prajapati, Y. "Two-Dimensional Layered Nanomaterial-Based One-Dimensional Photonic Crystal Refractive Index Sensor"; *Sensors* 2018, 18, 857.
- [35] Wang, H.; Zhang, H.; Dong, J.; Hu, S.; Zhu, W.; Qiu, W.; Lu, H.; Yu, J.; Guan, H.; Gao, S.; Li, Z. "Sensitivity-Enhanced Surface Plasmon Resonance Sensor Utilizing a Tungsten Disulfide (WS<sub>2</sub>) Nanosheets Overlayer"; *Photonics Res.* 2018, 6, 485-91.
- [36] Shahamat, Y.; Vahedi, M. "Plasmon-Induced Transparency in a Rectangle Cavity and an H-shaped Structure for Sensing and Switching Applications"; *J. Nanophotonic* 2017, 11, 046012.
- [37] Mishra, A. K.; Mishra, S. K.; Gupta, B. D. "SPR Based Fiber Optic Sensor for Refractive Index Sensing with Enhanced Detection Accuracy and Figure of Merit in Visible Region"; *Opt. Commun.* 2015, 344, 86-91.
- [38] Wu, L.; Ling, Z.; Jiang, L.; Guo, J.; Dai, X.; Xiang, Y.; Fan, D. "Long-Range Surface Plasmon with Graphene for Enhancing the Sensitivity and Detection Accuracy of Biosensor"; *IEEE Photonic J.* 2016, 8, 1-9.
- [6] Shushama, K. N.; Rana, M. M.; Inum, R.; Hossain, M. B. "Graphene Coated Fiber Optic Surface Plasmon Resonance Biosensor for the DNA Hybridization Detection: Simulation Analysis"; *Opt. Commun.* 2017, 383, 186-190.
- [7] Basabe-Desmonts, L.; Reinhoudt, D. N.; Crego-Calama, M. "Design of Fluorescent Materials for Chemical Sensing"; *Chem. Soc Rev.* 2007, 36, 993-1017.
- [8] Stich, M. I.; Fischer, L. H.; Wolfbeis, O. S. "Multiple Fluorescent Chemical Sensing and Imaging"; *Chem. Soc. Rev.* 2010, 39, 3102-3114.
- [9] Luo, Y.; Fan, R.; Zhang, Y.; Wu, Q.; Ren, Z.; Peng, B. "Novel Optical Fiber Refractive Sensor Fabricated with an Alcohol-Filled Photonic Crystal Fiber Based on a Mach-Zehnder Interferometer"; *Opt. Fiber Technol.* 2019, 48, 278-282.
- [10] Shahamat, Y.; Vahedi, M. "Mid-Infrared Plasmonically Induced Absorption and Transparency in a Si-Based Structure for Temperature Sensing and Switching Applications"; *Opt. Commun.* 2019, 430, 227-233.
- [11] Caucheteur, C.; Guo, T.; Albert, J. "Review of Plasmonic Fiber Optic Biochemical Sensors: Improving the Limit of Detection"; *Anal. Bioanal. Chem.* 2015, 407, 3883-3897.
- [12] Ksendzov, A.; Lin, Y. "Integrated Optics Ring-Resonator Sensors for Protein Detection"; *Opt. Lett.* 2005, 30, 3344-3346.
- [13] Chow, E.; Grot, A.; Mirkarimi, L. W.; Sigalas, M.; Girolami, G. "Ultracompact Biochemical Sensor Built with Two-Dimensional Photonic Crystal Microcavity"; *Opt. Lett.* 2004, 29, 1093-1095.
- [14] Shahamat, Y.; Vahedi, M. "Pump-Tuned Plasmon-Induced Transparency for Sensing and Switching Applications"; *Opt. Commun.* 2017, 401, 40-5.
- [15] Rodrigo, D.; Limaj, O.; Janner, D.; Etezadi, D.; De Abajo, F. J.; Pruneri, V.; Altug, H. "Mid-Infrared Plasmonic Biosensing with Graphene"; *Science* 2015, 349, 165-168.
- [16] Fan, X.; White, I. M.; Shopova, S. I.; Zhu, H.; Suter, J. D.; Sun, Y. "Sensitive Optical Biosensors for Unlabeled Targets"; *Anal. Chem. Acta.* 2008, 620, 8-26.
- [17] Farokhnezhad, M.; Esmaeilzadeh, M. "Optical and Photothermal Properties of Graphene Coated Au-Ag Hollow Nanoshells: A Modeling for Efficient Photothermal Therapy"; *J. Phys. Chem. C.* 123, 2019, 28907-28918.
- [18] Shahamat, Y.; Ghaffarinejad, A.; Vahedi, M. "Plasmon Induced Transparency and Refractive Index Sensing in Two Nanocavities and Double Nanodisk Resonators"; *Optiks* 2020, 202, 163618.
- [19] Yen, Y. C.; Chiu, N. F. "Plasmonic Biosensor Detected Human Chorionic Gonadotropin with Naked Eye in Optical Sensors"; *Int. Soc. Opt. Photon.* 2019, 11028, 1102823.
- [20] Shahamat, Yadollah, and Mohammad Vahedi. "Plasmon-induced transparency in a rectangle cavity and an H-shaped structure for sensing and switching applications"; *J. Nanophoton.* 2017, 11, 046012.
- [21] Verma, A.; Prakash, A.; Tripathi, R. "Performance analysis of graphene based surface plasmon resonance Biosensors for Detection of Pseudomonas-Like Bacteria"; *Opt. Quant. electron.* 2015, 47, 1197-1205.
- [22] Maurya, J. B.; Prajapati, Y. K.; Singh, V.; Saini, J. P.; Tripathi, R. "Improved Performance of the Surface Plasmon Resonance Biosensor Based on Graphene or MoS<sub>2</sub> Using Silicon"; *Opt. Commun.* 2016, 359, 426-34.

- [44] Huang, T.; Zeng, S.; Zhao, X.; Cheng, Z.; Shum, P. "Fano Resonance Enhanced Surface Plasmon Resonance Sensors Operating in Near-Infrared"; *Photonics* 2018, 5, 23.
- [45] Tamersit, K.; Djeflal, F. "Double-Gate Graphene Nanoribbon Field-Effect Transistor for DNA and Gas Sensing Applications: Simulation Study and Sensitivity Analysis"; *IEEE Sensors* 2016, 16, 4180-4191.
- [46] Hossain, M.; Rana, M. "Graphene Coated High Sensitive Surface Plasmon Resonance Biosensor for Sensing DNA Hybridization"; *Sensor. Lett.* 2016, 14, 145-152.
- [47] Diéguez, L.; Darwish, N.; Mir, M.; Martínez, E.; Moreno, M.; Samitier, J. "Effect of the Refractive Index of Buffer Solutions in Evanescent Optical Biosensors"; *Sensor Lett.* 2009, 7, 851-855.
- [48] Shushama, K. N.; Rana, M. M.; Inum, R.; Hossain, M. B. "Graphene Coated Fiber Optic Surface Plasmon Resonance Biosensor for the DNA Hybridization Detection: Simulation Analysis"; *Opt. Commun.* 2017, 383, 186.
- [39] Franzen, S. "Surface Plasmon Polaritons and Screened Plasma Absorption in Indium Tin Oxide Compared to Silver and Gold"; *J. Phys. Chem C.* 2008, 112, 6027-6032.
- [40] Hori, Y.; Hirai, A.; Minoshima, K.; Matsumoto, H. "High-Accuracy Interferometer with a Prism Pair for Measurement of the Absolute Refractive Index of Glass"; *Appl. Optics* 2009, 48, 2045-2050.
- [41] Wijaya, E.; Lenaerts, C.; Maricot, S.; Hastanin, J.; Habraken, S.; Vilcot, J. P.; Boukherroub, R.; Szunerits, S. "Surface Plasmon Resonance-Based Biosensors: from the Development of Different SPR Structures to Novel Surface Functionalization Strategies"; *Curr. Opin. Solid ST M.* 2011, 15, 208-24.
- [42] Han, L.; Zhao, X.; Huang, T.; Ding, H.; Wu, C. "Comprehensive Study of Phase-Sensitive SPR Sensor Based on Metal-ITO Hybrid Multilayer"; *Plasmonic* 2019, 1-8.
- [43] Taflove, A.; Oskooi, A.; Johnson, S. G.; editors. "Advances in FDTD Computational Electrodynamics: Photonics and Nanotechnology"; Artech House, 2013.