Semnan University

Journal of Modeling in Engineering

Journal homepage: https://modelling.semnan.ac.ir/

ISSN: 2783-2538



Research Article

enhancement of figure of merit and spectral sensitivity in a hyperbolic metamaterial optical biosensor utilizing a graphene nanograting

Heidar Faraji[a] **,Saeed Haji-Nasiri**[a,*] **, Shabnam Andalibi Miandoab**[b]

[a] Department of Electrical Engineering, Qa.C., Islamic Azad University, Qazvin, Iran
[b] Department of Electrical Engineering, Ta.C., Islamic Azad University, Tabriz, Iran

UNCORRECTED PROOF

PAPER INFO

Paper history:

Received:
Revised:
Accepted:

Keywords:

Optical biosensor;
Graphene;
Hyperbolic etamaterials;
FDTD;
Surface plasmon.

ABSTRACT

In this study, a novel plasmonic biosensor structure based on a graphene microstrip grating and a hyperbolic metamaterial (HMM) composed of alternating layers of graphene and Al_2O_3 is proposed. In this design, the graphene microstrip grating serves as the main substrate for coupling electromagnetic waves and generating a strong plasmonic field. The placement of the hyperbolic metamaterial on top of the graphene further enhances the optical fields with large wave vectors and improves field confinement, resulting in a significant increase in the sensor's sensitivity (S) and figure of merit (FOM). The effective medium theory is employed to determine the constitutive parameters of the metamaterial. Using the finite-difference time-domain (FDTD) method, the reflection spectra and resonance damping characteristics are investigated under variations of structural parameters and graphene Fermi energy levels. The simulation results demonstrate that the proposed biosensor achieves a sensitivity of 3412 nm·RIU^{-1} and a figure of merit (FOM) of 29.66 RIU^{-1}, confirming its strong potential for selective and ultra-sensitive biomolecular detection.

*** Corresponding author.**
E-mail address: s.hajinasiri@iau.ac.ir

How to cite this article:

مقاله پژوهشی

بهبود ضریب شایستگی و حساسیت طیفی در زیست حسگر نوری فراماده ای هذلولی با بهره گیری از نانوگریتینگ گرافنی

حیدر فرجی[۱]، سعید حاجی‌نصیری[۱،*]، شبنم عندلیبی‌میاندوآب[۲]

اطلاعات مقاله

دریافت مقاله:
بازنگری مقاله:
پذیرش مقاله:

واژگان کلیدی:
زیست‌حسگر نوری،
گرافن،
فراماده هذلولی،
FDTD،
پلاسمون سطحی.

چکیده

در این پژوهش، یک ساختار نوین زیست‌حسگر پلاسمونیک بر پایه‌ی گریتینگ میکرونوارهای گرافنی و فراماده هذلولی (HMM) متشکل از لایه های متناوب گرافن و Al_2O_3 ارائه شده است. در این طرح، گریتینگ میکرونوارهای گرافنی به‌عنوان بستر اصلی برای جفت‌کردن امواج الکترومغناطیسی عمل کرده و میدان پلاسمونی قوی ایجاد می‌کند. قرارگیری فراماده هذلولی بر روی گرافن سبب تقویت بیشتر میدان‌های نوری با عدد موج بزرگ و بهبود محصورسازی می‌گردد، که این امر منجر به افزایش قابل توجه حساسیت (S) و ضریب شایستگی (FOM) حسگر می‌شود. برای تعیین خواص تشکیل دهنده فراماده از تئوری محیط موثر استفاده شده است. با استفاده از روش تفاضل محدود در حوزه زمان(FDTD) ، طیف‌های بازتاب و ویژگی‌های افت رزونانسی تحت تغییرات پارامترهای ساختاری و سطوح انرژی فرمی گرافن مورد بررسی قرار گرفتند. نتایج شبیه‌سازی نشان می‌دهد که زیست‌حسگر پیشنهادی به حساسیتی معادل 3412 $nm \cdot RIU^{-1}$ و ضریب کیفی (FOM) برابر با $29.66RIU^{-1}$ دست می‌یابد که پتانسیل بالای آن برای آشکارسازی انتخابی و فوق‌حساس بیومولکول‌ها را تأیید می‌کند.

۱-مقدمه

حسگرهای زیستی دسته ای از ابزارهای اندازه‌گیری هستند که بر پایه‌ی پدیده‌ها و اصول بیولوژیکی کار می‌کنند. عملکرد این حسگرها بر اساس تشخیص و واکنش به تغییرات محیطی است که در آن قرار گرفته‌اند [۱]. حسگرهای تشدید پلاسمون سطحی (SPR) یکی از قدرتمندترین حسگرهای زیستی نوری هستند[۲-۶]. پلاسمون‌های سطحی (SPs) نوعی موج الکترومغناطیسی هستند که در مرز بین یک فلز و یک دی‌الکتریک منتشر می‌شوند. این امواج ناشی از نوسان جمعی الکترون‌های آزاد در فلز هستند که با میدان الکترومغناطیسی نور ورودی برهم‌کنش کرده و در نزدیکی سطح فلز به‌طور قوی محصور می‌شوند. به‌طور کلی، پلاسمون‌های سطحی به دو نوع پلاسمون‌های سطحی موضعی (LSPs) و پلاسمون‌های سطحی انتشاری (SPPs) تقسیم می‌شوند.در نوع LSP، نوسانات الکترونی در نانوذرات فلزی زمانی برانگیخته می‌شوند که نور تابشی دارای فرکانسی نزدیک به فرکانس پلاسمایی فلز باشد. در این حالت، اگر اندازه‌ی نانوذرات با طول موج تشدید قابل مقایسه باشد، پاسخ پلاسمونی می‌تواند به‌شدت به شکل، اندازه و محیط اطراف ذرات وابسته باشد. در مقابل، پلاسمون‌های سطحی انتشاری (SPP)ترکیبی از حرکت نوسانی بارهای آزاد در سطح فلز و انتشار یک موج الکترومغناطیسی پلاریزه در محیط دی‌الکتریک هستند که به آن‌ها پلاریتون‌های پلاسمون سطحی نیز گفته می‌شود[۷]. برانگیختگی SPP ها به‌صورت

* پست الکترونیک نویسنده مسئول: s.hajinasiri@iau.ac.ir
۱. گروه مهندسی برق، واحد قزوین، دانشگاه آزاد اسلامی، قزوین، ایران.
۲. گروه مهندسی برق، واحد تبریز، دانشگاه آزاد اسلامی، تبریز، ایران.

استناد به این مقاله: نحوه استناد فارسی در اینجا درج گردد.

UNCORRECTED PROOF

مستقیم انجام نمی‌شود و برای تحریک آن‌ها باید شرایط تطابق تکانه (momentum matching) از طریق اجزای نوری مانند منشور، توری یا موجبر برقرار شود تا تکانه نور با تکانه پلاسمون سطحی برابر گردد. در هر دو نوع پلاسمون، نوسان بار الکتریکی موجب ایجاد میدان الکتریکی درون فلز و دی‌الکتریک می‌شود. از آن‌جا که فرکانس یا زاویه‌ی رزونانس پلاسمونی به ثابت دی‌الکتریک محیط اطراف بسیار حساس است، هرگونه تغییر در ضریب شکست محیط باعث جابه‌جایی در طول موج یا زاویه‌ی رزونانس می‌شود. این تغییرات معمولاً به‌صورت تغییر طول موج بر واحد ضریب شکست بیان شده و شاخصی از حساسیت حسگر نوری هستند.به دلیل محصورشدگی قوی میدان الکترومغناطیسی در نزدیکی سطح فلز، پلاسمون‌ها تنها به تغییرات محیطی نزدیک سطح حساس هستند؛ بنابراین، این ویژگی امکان شناسایی انتخابی زیست‌مولکول‌هایی را فراهم می‌کند که توسط گیرنده‌های زیستی به سطح حسگر متصل شده‌اند. افزایش حساسیت در حسگرهای پلاسمونی می‌تواند چشم‌اندازهای جدیدی در تشخیص‌های زیستی و بالینی ایجاد کند؛ از جمله امکان پایش در لحظه‌ی بیماری‌ها و تشخیص زودهنگام سرطان در محل مراقبت از بیمار.

در راستای دستیابی به این هدف، پلتفرم‌های حسگری نوینی در حال توسعه هستند. یکی از رویکردهای امیدبخش، استفاده از فراماد هذلولی (HMM) است که در سال‌های اخیر توانسته‌اند افزایش چشمگیر حساسیت را نسبت به ساختارهای پلاسمونیکی مرسوم نشان دهند[۸-۱۰].

HMM ها دسته ای از مواد مصنوعی هستند که پراکندگی هذلولی را نشان می دهند، زیرا یکی از اجزای اصلی گذردهی آنها دارای علامت مخالف با دو جزء دیگر است[۱۱]. پاسخ دی الکتریک فراماد هایپربولیک مشابه کریستال تک محوری است با این تفاوت که برای این مواد با ناهمسانگردی به صورت $\varepsilon_{\perp}\times\varepsilon_{\mathrm{P}}<0$، سطح هم فرکانس برای امواجی با قطبش TM از حالت بسته (بیضوی) به صورت باز و به شکل هذلولی تبدیل شده است. و رابطه پاشندگی برای آنها به صورت زیر است.

$$\frac{k_x^2+k_y^2}{\varepsilon_{\perp}^2}+\frac{k_z^2}{\varepsilon_{\mathrm{P}}^2}=\frac{\omega^2}{c_0^2} \qquad (۱)$$

در رابطه فوق، ω نشان دهنده فرکانس زاویه‌ای، c_0 سرعت نور و k_x، k_y و k_z نشان دهنده مولفه‌های بردار موج هستند. برای فراماده هذلولی نوع II ساختار چندلایه ای در راستای عمود بر سطح $(\varepsilon_{\perp}>0)$ خواص دی الکتریک و در راستای درون سطح $\varepsilon_{\mathrm{P}}<0$ خواص فلزی از خود نشان می دهد. ما از یک فراماده هذلولی نوع دوم متشکل از لایه های متناوب گرافن و Al_2O_3 استفاده کرده‌ایم. هر دولایه موجی از پلاسمون سطحی (SP) را پشتیبانی می‌کند که به‌طور قوی با لایه‌های مجاور جفت شده و امکان تشکیل یک پلاسمون سطحی منتشرشونده را فراهم می‌سازد. این جفت شدگی انتقال انرژی را درون حجم ساختار و همچنین در امتداد فصل مشترک هر دولایه تسهیل می‌کند[۱۲]. موج حاصل، که با نام پلاسمون پلاریتون حجمی (BPP) شناخته می‌شود، در سراسر حجم ماده توزیع می‌گردد. پلاسمون‌پلاریتون‌های حجمی دارای تکانه‌ای بسیار بالا هستند و نسبت به کوچک‌ترین تغییرات در ثابت دی‌الکتریک محیط اطراف واکنش بسیار شدیدی نشان می‌دهند.ما در این کار برانگیختگی این مدهای با تکانه بالا را با استفاده از تکنیک جفت شدگی گریتینگ گرافنی نشان دادیم[۱۳-۱۵].

در سال‌های اخیر، زیست‌حسگرهای مبتنی بر گرافن در بازه‌های فرکانسی گسترده‌ای از ناحیه تراهرتز تا ناحیه مرئی و فروسرخ نزدیک مورد بررسی قرار گرفته‌اند. در ناحیه تراهرتز، تحریک پلاسمون‌های سطحی گرافن به دلیل قابلیت تنظیم‌پذیری بالا و نفوذ میدان مناسب، منجر به توسعه حسگرهای با حساسیت بالا شده است. در ناحیه فروسرخ میانی، گرافن به دلیل هم‌پوشانی با ناحیه اثرانگشت مولکولی، بستر مناسبی برای آشکارسازی بدون برچسب فراهم می‌کند. همچنین در ناحیه فروسرخ نزدیک و مرئی، ساختارهای هیبریدی مبتنی بر گرافن با فلزات نجیب یا دی‌الکتریک‌ها جهت افزایش پاسخ پلاسمونیکی مورد استفاده قرار گرفته‌اند. از نظر طیفی، این حسگرها به دو دسته تک‌باندی و چندباندی تقسیم می‌شوند که ساختارهای چندرزونانسی امکان آشکارسازی همزمان چندین آنالیت یا افزایش دقت تشخیص را فراهم می‌کنند. این تنوع طیفی و ساختاری نشان‌دهنده ظرفیت بالای گرافن برای طراحی حسگرهای قابل تنظیم در گستره وسیعی از فرکانس‌ها است.

UNCORRECTED PROOF

نانوریبون‌های گرافنی نوارهایی باریک از گرافن با عرضی در حد چند نانومتر هستند که به‌دلیل محدودیت کوانتومی در راستای عرضی، خواص الکترونیکی و نوری متفاوتی نسبت به گرافن دوبعدی نشان می‌دهند. در این ساختارها، کاهش ابعاد موجب القای گاف انرژی قابل تنظیم می‌شود که امکان کنترل رفتار پلاسمونیکی و پاسخ طیفی را در گستره‌ی وسیعی از طول‌موج‌ها از ناحیه‌ی تراهرتز تا فروسرخ فراهم می‌سازد. نوسانات جمعی الکترون‌ها در این نانوریبون‌ها منجر به ایجاد پلاسمون‌های گرافنی موضعی می‌شود که نقش کلیدی در برانگیزش و کنترل مدهای پلاسمونیکی سطحی ایفا می‌کند. در واقع، این ساختارهای تناوبی با افزودن مؤلفه‌ی موجی مناسب به بردار تکانه‌ی فوتون، شرایط تطبیق تکانه بین موج تابیده و پلاسمون‌های سطحی را فراهم می‌سازند و امکان جفت‌کردن کارآمد نور به مدهای پلاسمونیکی را بدون نیاز به اجزای حجیمی مانند منشور (در پیکربندی کرچمن) مهیا می‌کنند. این ویژگی سبب می‌شود که گریتینگ‌های مبتنی بر نانوریبون‌های گرافنی، گزینه‌ای بسیار کارآمد برای زیست‌حسگرهای نوری فشرده و قابل مجتمع‌سازی باشند.

از سوی دیگر، رسانایی الکتریکی و ضریب دی‌الکتریک گرافن را می‌توان از طریق تنظیم انرژی فرمی با اعمال ولتاژ گیت یا دوپینگ شیمیایی کنترل کرد. این قابلیت، امکان تنظیم‌پذیری دینامیکی در پاسخ رزونانسی حسگر را فراهم می‌سازد، به‌طوری‌که با تغییر شرایط الکتریکی، مکان پیک رزونانس و شدت میدان محلی قابل کنترل است. این پدیده نه‌تنها موجب بهبود حساسیت حسگر می‌شود، بلکه امکان طراحی حسگرهای چندباندی برای تشخیص هم‌زمان چند نوع آنالیت زیستی را فراهم می‌نماید[۱۹-۳۱].

جایگزینی نانوریبون‌های گرافنی با نانوریبون‌های طلا، منجر به تغییر اساسی در مکانیزم تحریک و ناحیه طیفی تشدید پلاسمونی می‌شود. نانوریبون‌های طلا با دارا بودن الکترون‌های آزاد فلزی، پلاسمون‌های سطحی قوی در ناحیه‌ی مرئی تا نزدیک فروسرخ ایجاد می‌کنند و موجب تمرکز شدید میدان‌های الکتریکی در لبه‌ها و شکاف‌های نانوساختار می‌شوند. این ویژگی، حساسیت حسگر را نسبت به تغییرات جزئی در ضریب شکست محیط افزایش می‌دهد و آن را برای آشکارسازی مولکول‌های زیستی با پاسخ نوری در محدوده‌ی مرئی بسیار مناسب می‌سازد. با این حال، دلیل می‌توانند میدان‌های الکتریکی بسیار شدیدی را در حجم‌های زیر طول‌موج متمرکز کنند. این تمرکز شدید میدان، باعث افزایش چشمگیر حساسیت در فرآیند آشکارسازی مولکول‌های زیستی می‌شود، زیرا جذب یا اتصال آنالیت‌ها در نزدیکی سطح نانوریبون‌ها موجب تغییر محسوس در ضریب شکست مؤثر محیط و جابه‌جایی پیک رزونانس در طیف بازتاب می‌گردد[۱۶-۱۸].

در طراحی زیست‌حسگرهای نوری مبتنی بر گرافن، استفاده از آرایه‌های تناوبی نانوریبون به‌عنوان ساختار گریتینگ، وجود تلفات اهمی بالا و عدم امکان تنظیم‌پذیری دینامیکی، محدوده‌ی کاری این حسگرها ثابت بوده و انعطاف‌پذیری آن‌ها نسبت به تغییرات محیطی کمتر است[۳۲-۳۴].

در این پژوهش، ما یک معماری ترکیبی نوین شامل گریتینگ میکرونوارهای گرافنی و فراماده هذلولی شامل چندین دولایه ی Graphene/ Al_2O_3 پیشنهاد می‌کنیم. در این ساختار، گریتینگ گرافنی، امکان جفت شدگی کارآمد نور ورودی به مدهای با تکانه بالا در گرافن را فراهم می‌کند، چرا که عدم تطابق بردار موج بین مدهای انتشار در فضای آزاد و مدهای موجود در HMM را به حداقل می‌رساند. برای زیست‌حسگر پیشنهادی، جابجایی طول موج رزونانس ناشی از تغییرات ضریب شکست محیط اطراف (RI)با استفاده از شبیه‌سازی‌های عددی بر اساس روش FDTD سه‌بعدی محاسبه شد. این شبیه‌سازی‌ها با بهره‌گیری از مجموعه نرم‌افزاری لومریکال انجام شدند. عملکرد حسگر از نظر حساسیت و ضریب شایستگی (FOM)در طیف وسیعی از ضریب شکست های مربوط به مولکول‌های زیستی رایج به‌طور کمی مورد ارزیابی قرار گرفت.

لازم به توضیح است که هدف این پژوهش ارائه و ارزیابی یک پلتفرم حسگری مبتنی بر فراماده هذلولی بوده است و تمرکز اصلی بر بررسی پاسخ ساختار نسبت به تغییر ضریب شکست محیط اطراف به‌صورت کلی قرار داشته است. در این راستا، شبیه‌سازی‌ها برای بازه ضریب شکست ۱.۳۳ تا ۱.۷ انجام شد که این بازه طیف وسیعی از محیط‌های زیستی شامل مایعات زیستی، پروتئین‌ها و ترکیبات آلی را پوشش می‌دهد. بنابراین ساختار پیشنهادی می‌تواند برای آشکارسازی انواع مختلف بیومولکول‌ها مورد استفاده قرار گیرد.

UNCORRECTED PROOF

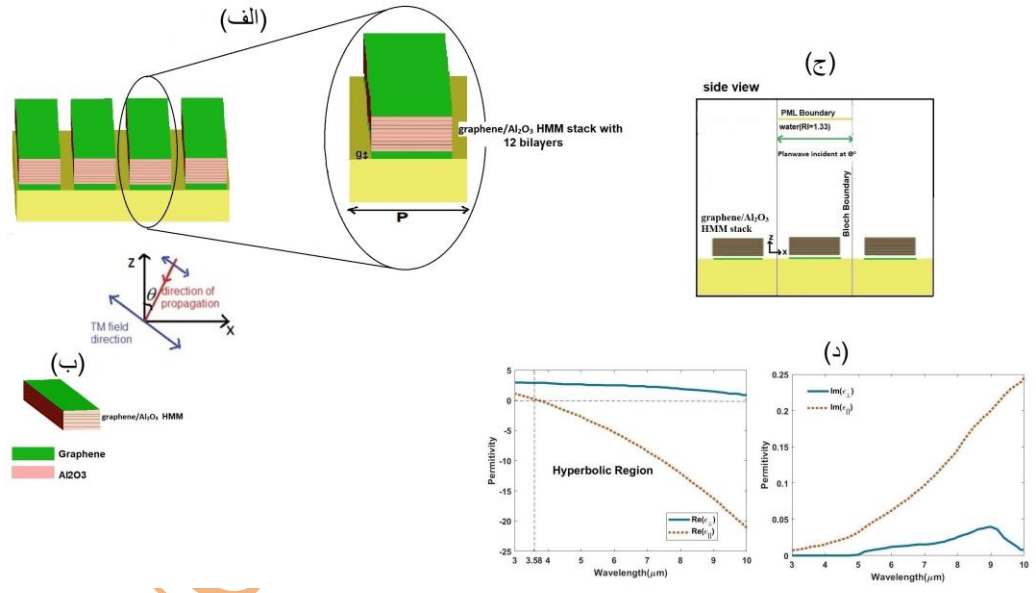
استناد به این مقاله: نحوه استناد فارسی در اینجا درج گردد.

۲- روش و ساختار

پلتفرم زیست حسگر پلاسمونیک پیشنهادی، همانطور که در شکل (۱- الف) نشان داده شده است، ترکیبی از ساختار گریتینگ میکرونوارهای گرافنی و یک فراماده هذلولی است. بالاترین لایه پشته HMM، که سطح حسگر را تشکیل می دهد، از یک صفحه گرافن تشکیل شده است، همانطور که در شکل(۱- ب) نشان داده شده است.

استفاده از گرافن به عنوان سطح حسگر حساسیت سنسور پیشنهادی را تا حد زیادی افزایش می دهد. نمای کناری سلول واحد شبیه سازی شده با شرایط مرزی پریودیک (بلاخ) در راستای محور x و PML در راستای محورهای y و z در شکل (۱- ج) نشان داده شده است. لایه های دوبعدی گرافن با ضخامت، $t_g = 0.34$ نانومتر، و لایه های Al_2O_3 با ضخامت، $t_d = 10.4$ نانومتر تنظیم شده اند که محدودیت فراماده را برآورده می کند. تعداد دولایه های Graphene/Al_2O_3 (N)، می تواند برای بهینه سازی خواص جذب تغییر کند. جذب توسط ساختار HMM همچنین می تواند با تغییر دوره تناوب ساختار گریتینگ(p) ، انرژی فرمی گرافن(E_F) و تغییر فاصله بین ساختار گریتینگ و فراماده هذلولی تنظیم شود. برای جلوگیری از پراش در فضای آزاد و همچنین برانگیختن مدهای با تکانه‌ی بزرگ در لایه‌ی HMM گرافنی، همواره دوره‌ی ساختار (p)کوچکتر از طول موج انتخاب می‌شود[۳۵].

نور فرودی، در محدوده IR میانی، بصورت مغناطیسی عرضی (TM) قطبی شده است و ساختار را از بالا با زاویه θ تحت تابش قرار می دهد. مد TM به این دلیل انتخاب شده است که، به طور کلی، حساسیت بالاتری نسبت به مد الکتریکی عرضی (TE) نشان می دهد.



شکل ۱- الف)شماتیک پشته بیوسنسور HMM پیشنهادی در بالای ساختار گریتینگ، ب) پشته فراماده graphene/Al2O3 با N=12 دولایه و یک لایه گرافن در بالا، ج) نمای کناری یک سلول واحد مورد استفاده در شبیه سازی، د) بخش‌های حقیقی و موهومی گذردهی الکتریکی

ساختار Graphene/Al_2O_3 پیشنهادی در شبیه‌سازی FDTD از طریق توابع دی الکتریک Al_2O_3 و رسانایی سطحی گرافن توصیف می شود. اجزای تانسور دی الکتریک تک محوری این HMM ناهمسانگرد را می توان به صورت تقریبی به فرم زیر نمایش داد[۳۶]:

$$\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \varepsilon_{\perp} = \frac{t_g\varepsilon_g + t_d\varepsilon_d}{t_g + t_d} \qquad (۲)$$

$$\varepsilon_{zz} = \varepsilon_{\mathrm{P}} = \frac{\varepsilon_g\varepsilon_d(t_g + t_d)}{t_g\varepsilon_d + t_d\varepsilon_g} \qquad (۳)$$

که در آن ε_{P} و $\varepsilon_{\perp}$ به ترتیب مولفه های موازی و عمود با نور فرودی هستند. گذردهی موثر و ضخامت گرافن به ترتیب با ε_g و t_d و دی الکتریک با ε_d و t_g نشان داده می شود. با توجه به ماهیت نازک بودن گرافن در حد اتم ($t_g = t_d$) می توانیم $\varepsilon_{\mathrm{P}} \cong \varepsilon_d$ را تقریب بزنیم. از

آنجایی که دوره تناوب $(t_g + t_d)$ ساختار چند لایه فراماده Graphene/Al_2O_3 بسیار کوچکتر از طول موج عملیاتی است، می توان آن را به عنوان یک فراماده ناهمسانگرد در نظر گرفت.

تئوری محیط موثر (EMT) برای طراحی HMM استفاده شد زیرا ضخامت تک تک لایه‌های گرافن و دی الکتریک HMM بسیار کمتر از طول موج تحریک است. برای به دست آوردن پراکندگی هذلولی در فرکانس‌های نوری، از ۱۲ لایه نازک متناوب گرافن و دی‌اکسید آلومینیوم (Al_2O_3) به ترتیب با ضخامت ۰/۳۴ نانومتر و ۱۰/۴ نانومتر برای ساخت HMM استفاده شد. برای Al_2O_3 و Au، مقادیر گذردهی مستقیماً از پایگاه داده مواد نرم افزار لومریکال گرفته شده است در حالی که ε_g را می توان به صورت زیر بیان کرد:

$$\varepsilon_g = 1 + i\frac{\sigma}{\omega\varepsilon_0 t_g} \qquad (۴)$$

که در آن ε_0 و δ به ترتیب گذردهی خلا و هدایت سطحی گرافن هستند. این رابطه با این فرض نوشته شده است که ساختار باند الکترونیکی ورقه گرافن تحت تأثیر ورقه‌های مجاور قرار نمی‌گیرد. بدون در نظر گرفتن میدان مغناطیسی خارجی، رسانایی سطح همسانگرد گرافن با استفاده از فرمول کوبو محاسبه می شود که در آن، δ به صورت مجموع انتقال درون باند (δ_{intra}) و بین باند (δ_{inter}) به صورت بیان می شود:

$$\delta_{intra} = \frac{ie^2 k_B T}{\pi\hbar^2(\omega + i/\tau)}\left(\frac{E_F}{K_B T} + 2\ln\left(e^{-\frac{E_F}{K_B T}} + 1\right)\right) \qquad (۵)$$

$$\delta_{inter} = \frac{ie^2}{4\pi\hbar^2}\ln\left|\frac{2E_F - (\omega + i\tau^{-1})\hbar}{2E_F + (\omega + i\tau^{-1})\hbar}\right| \qquad (۶)$$

که در آن ω فرکانس نور فرودی است، τ زمان آرامش الکترون- فونون، E_F انرژی فرمی گرافن، T نشان دهنده دما برحسب کلوین است و e، k_B و $\hbar$ به ترتیب نشان دهنده بار الکترونیکی، ثابت بولتزمن و ثابت پلانک کاهش یافته هستند. مولفه های گذردهی الکتریکی تک محوری برگرفته شده از تئوری محیط موثر در شکل (۱-د) نشان داده شده است که تایید می کند چند لایه Graphene/Al_2O_3 ساخته شده، یک HMM نوع II با پراکندگی هذلولی در $\lambda > 3.58\mu m$ است که در آن $\varepsilon_p < 0$ و $\varepsilon_\perp > 0$ است.

فرآیند طراحی به‌صورت مرحله‌به‌مرحله انجام گرفته است. ابتدا بازه فرکانسی فروسرخ میانی (۱۰–۳ میکرومتر)با توجه به کاربردهای زیستی انتخاب گردید. سپس با استفاده از نظریه محیط مؤثر، پارامترهای لایه‌های گرافن و Al_2O_3 به‌گونه‌ای تعیین شد که شرط رفتار هذلولوی ($\varepsilon\parallel \cdot \varepsilon\perp < 0$) در این بازه برقرار گردد. تعداد لایه‌ها و ضخامت آن‌ها به‌گونه‌ای انتخاب شد که پاسخ مؤثر به شرایط محیط همگن نزدیک شود. در ادامه، برای فراهم‌سازی تطبیق تکانه و تحریک مدهای سطحی و هذلولوی، نانوگریتینگ گرافنی به ساختار افزوده شد. در نهایت، پارامترهای هندسی گریتینگ شامل پریود و نسبت پرشدگی با هدف بیشینه‌سازی جابه‌جایی رزونانس و حساسیت حسگر بهینه‌سازی گردید.

انتخاب بازه ۱۰–۳ میکرومتر بر اساس ملاحظات فیزیکی و کاربردی انجام شده است. مطابق نتایج نظریه محیط مؤثر، ساختار از طول موج‌های بزرگ‌تر از ۳/۵۸ میکرومتر وارد ناحیه هذلولی می‌شود که در آن پراکندگی غیرمعمول منجر به تقویت میدان و بهبود عملکرد حسگری می‌گردد. علاوه بر این، بازه مذکور در ناحیه فروسرخ میانی و به‌ویژه در محدوده اثرانگشت مولکولی قرار دارد که بسیاری از ارتعاشات مشخصه مولکول‌های زیستی در آن رخ می‌دهد و بنابراین برای زیست‌حسگری بدون برچسب مناسب است. همچنین، گرافن در این بازه دارای پاسخ پلاسمونیکی قابل تنظیم و تلفات نسبتاً پایین است که امکان کنترل پویا رزونانس‌ها را فراهم می‌کند. بر این اساس، انتخاب این بازه فرکانسی دارای مبنای فیزیکی و کاربردی مشخص می‌باشد. توضیحات مربوطه در نسخه اصلاح‌شده به مقاله افزوده شد.

از نظر ساخت، اجزای اصلی حسگر پیشنهادی بر پایه فناوری‌های رایج نانوساخت قابل پیاده‌سازی است. لایه‌های Al_2O_3را می‌توان با روش رسوب‌دهی لایه اتمی (ALD) با ضخامت کنترل‌شده تهیه نمود و گرافن نیز به‌صورت متداول با رشد CVD و انتقال روی زیرلایه مورد استفاده قرار می‌گیرد. ایجاد نانوگریتینگ گرافنی و الگوی تناوبی ساختار با روش‌هایی مانند لیتوگرافی پرتو الکترونی/نوری و فرایند اچ امکان‌پذیر است. همچنین قابلیت تنظیم انرژی فرمی گرافن می‌تواند از طریق اعمال ولتاژ گیت (ساختار

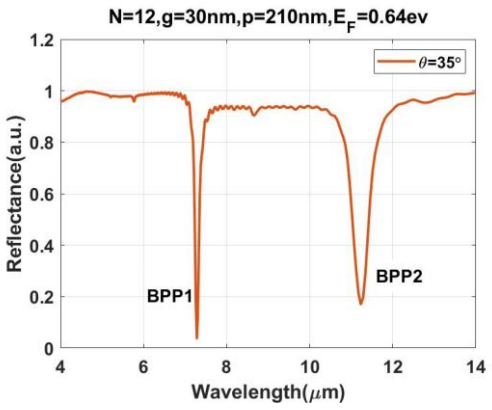
UNCORRECTED PR

گرافن–دی‌الکتریک–الکترود) محقق شود. در نهایت، مشخصه‌یابی طیفی در بازه فروسرخ میانی با روش‌هایی نظیر FTIR (و در صورت نیاز ATR-FTIR) قابل انجام است. بنابراین از دیدگاه فناوری ساخت و اندازه‌گیری، پیاده‌سازی عملی ساختار پیشنهادی امکان‌پذیر ارزیابی می‌شود.

۳- نتایج شبیه سازی:

برای ارزیابی عملکرد ساختار پیشنهادی، شبیه‌سازی‌های عددی بر اساس روش FDTD انجام شد. نتایج طیفی نشان می‌دهد که فرامادهٔ هذلولی با گرتینگ گرافنی باعث افزایش برهم‌کنش نور با محیط بیولوژیکی و در نتیجه افزایش حساسیت زیست‌حسگر می‌شود.

برای تأیید حضور مدهای پلاسمون حجمی در فرامادهٔ هذلولی ساخته‌شده، طیف بازتاب آن را بر حسب طول‌موج تحریک رسم کردیم که در شکل (۲) نشان داده شده است. برای این ساختار، شبیه‌سازی‌های FDTD با پارامترهای زیر انجام شد: ۱۲ لایه $Graphene/Al_2O_3$، $\theta = 35^{o}$، فاصله گریتینگ تا HMM برابر با ۳۰ نانومتر، تناوب نانوگریتینگ گرافنی ۲۱۰ نانومتر و انرژی فرمی گرافن برابر با ۰٫۶۴ الکترون ولت .

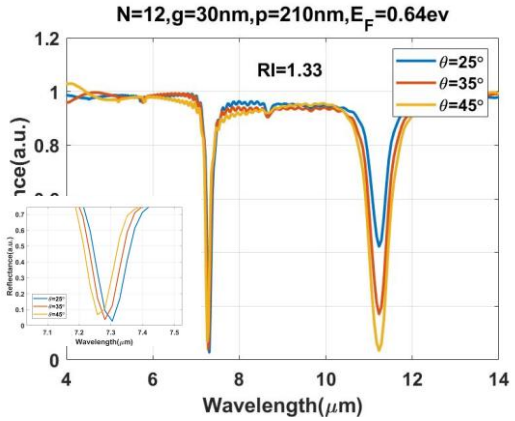


شکل ۲- طیف بازتاب زیست حسگر پیشنهادی

شکل ۲ نشان می دهد که در ناحیه هذلولی دو مینیمم بازتابی مشاهده می شود که متناظر با مدهای تکانه بلند هستند. در $\theta = 35^{o}$ مدهای تکانه بلند در طول موجهای $7.28\mu m$ (BBB1) و $11.22\mu m$ (BPP2) هستند. با در نظر گرفتن میزان عبور صفر از طریق HMM جفت شده با ساختار نانوگریتینگ گرافنی، میزان جذب برای BPP1 برابر 96٪و برای BPP2 برابر با 83٪ برای نور تابشی قطبی شده TM می باشد. جذب قوی توسط HMM ها به فضای k هذلولی نامعین نسبت داده می شود که منجر به تعداد زیادی چگالی حالت فوتونی در داخل HMM می شود.

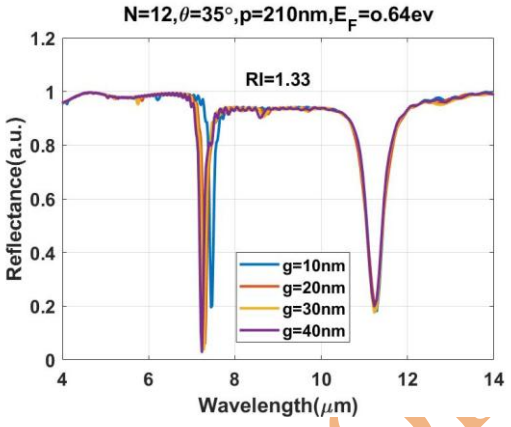
مطابق نتایج نظریه محیط مؤثر، ساختار پیشنهادی از طول موج $\lambda>3.58\ \mu m$ وارد ناحیه هذلولی می‌شود و طیف بازتاب (شکل ۲) وجود دو رزونانس مشخص در بازه فروسرخ میانی را نشان می‌دهد (دو باند حسگری). از نظر طراحی، ساختار ذاتاً قابلیت توسعه چندباندی دارد؛ زیرا ایجاد/افزایش مدهای رزونانسی از طریق تحریک مرتبه‌های بالاتر جفت شدگی گریتینگ با تغییر پریود P و نسبت پرشدگی، و همچنین تغییر پارامترهای پشته HMM (تعداد لایه‌ها/ضخامت‌ها) امکان‌پذیر است. علاوه بر این، نزدیک یا دور کردن باندهای رزونانسی با تنظیم انرژی فرمی گرافن E_F (کنترل الکتریکی) و نیز تغییر پارامترهای هندسی گریتینگ قابل انجام است، زیرا این پارامترها به‌طور مستقیم شرط تطبیق تکانه و ویژگی‌های پاشندگی مودها را تغییر می‌دهند.

همان طور که در شکل (۳) نشان داده شده است می توان ویژگی‌های نوری ساختار زیست حسگر را با تغییر چند پارامتر کلیدی مانند زاویه تابش نورTM قطبیده(θ) ، تعداد دولایه‌های گرافن/دی‌الکتریک(N) ، تناوب نانوگریتینگ گرافنی(p) و فاصله جداسازی (g) بین پشته HMM و ساختار نانوگریتینگ گرافنی، به‌طور مؤثری تنظیم کرد.

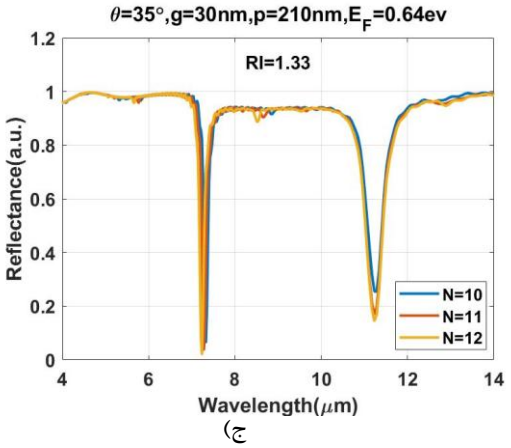


الف)

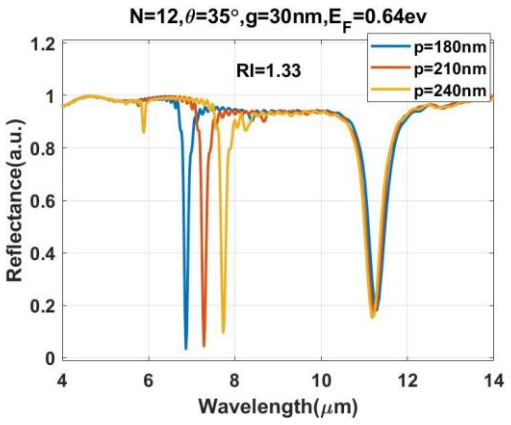
CORRECTED PROOF



ب)



ج)



د)

شکل ۳- طیف بازتاب ساختارفراماده Graphene/Al2O3جفت شده با نانو گریتینگ گرافنی، الف) باتغییر زوایای فرودی ، ب) با تغییر فاصله بین گریتینگ گرافنی و پشته فراماده (g) ، ج) با تغییر تعداد دولایه های Graphene/Al_2O_3 ،د) با تغییر دوره تناوب ساختار گریتینگ(P)

با تغییر زاویه‌ی تابش نور TM از °25 تا°45 مطابق شکل (۳-الف) جابه‌جایی محسوسی در موقعیت پیک‌های رزونانس پلاسمون حجمی (SPP) در طیف بازتاب مشاهده می‌شود. با افزایش زاویه‌ی فرودی، پیک‌های رزونانس به سمت طول‌موج‌های کوتاه انتقال یافته و شدت مینیمم بازتاب افزایش می‌یابد که نشان‌دهنده‌ی افزایش برهم‌کنش نور با ساختار نانواستوانه‌ای و تقویت مدهای پلاسمونی سطحی است. این تغییرات بیانگر آن است که زاویه‌ی تابش یکی از پارامترهای کلیدی در تنظیم پاسخ نوری و کنترل شرایط رزونانس در ساختار زیست‌حسگر مبتنی بر HMM محسوب می‌شود. چنین وابستگی زاویه‌ای، امکان تنظیم‌پذیری دقیق طیف بازتاب را فراهم کرده و در بهینه‌سازی حساسیت و دقت تشخیص حسگر نقش مؤثری ایفا می‌کند.. تغییر رنگ آبی به دلیل تغییر در شاخص مؤثر (شاخص مدال، n_{modal}) BPPها با زاویه تابش ایجاد می‌شود. برای ساختار جفت شده گریتینگ n_{modal}از رابطه زیر بدست می آید[۲۴]:

$$n_{modal} = \frac{\lambda}{p} n_0 \sin\theta \qquad (۷)$$

که در آن λ طول موج نور فرودی، p دوره تناوب گریتینگ، n_0 ضریب شکست محیط تابش و θ زاویه تابش است. در زاویه تابش بالاتر، طول موج تشدید برای یک مقدار معین n_{modal} کاهش می یابد (تغییر آبی).

زاویه تابش در این پژوهش برابر °۳۵ در نظر گرفته شده است. بررسی پاسخ ساختار برای زوایای مختلف (°۲۵، °۳۵ و °۴۵) نشان می‌دهد که تغییر زاویه موجب جابه‌جایی مکان رزونانس و تغییر در عمق و پهنای پیک می‌شود که ناشی از تغییر در شرط جفت‌شدگی گریتینگ است. با این حال، حساسیت ساختار که بر اساس جابه‌جایی طول موج رزونانس نسبت به تغییر ضریب شکست تعریف می‌شود، وابستگی شدیدی به زاویه نشان نمی‌دهد، زیرا منشأ اصلی آن نفوذ میدان در محیط آنالیت است. در مقابل، زاویه تابش تأثیر محسوسی بر پهنای رزونانس و در نتیجه ضریب شایستگی (FOM) دارد. نتایج نشان می‌دهد که زاویه °۳۵ منجر به ایجاد رزونانس باریک‌تر و عمیق‌تر شده و عملکرد بهینه‌تری ارائه می‌دهد، ازاین‌رو به‌عنوان زاویه کاری انتخاب شده است.

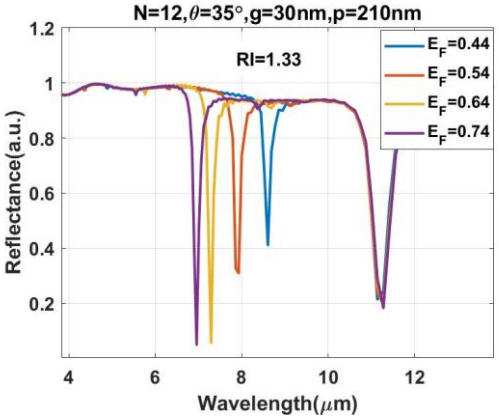
UNCORRECTED

استناد به این مقاله: نحوه استناد فارسی در اینجا درج گردد.

شکل (۳-ب) تأثیر فاصله بین پشته HMM و ساختار نانو گریتینگ گرافنی (g) و شکل (۳-ج) تاثیر تعداد دولایه‌های Graphene/Al_2O_3 را بر طیف بازتاب نشان می‌دهند. افزایش g یا N منجر به جذب بیشتر و جابجایی به سمت طول موجهای آبی در نمودار بازتاب می‌شود. همانطور که در شکل (۳-ج) نشان داده شده است، تعداد بیشتر دولایه‌ها منجر به تطابق بیشتر ساختار با رفتار پیش‌بینی شده توسط مدل فراماد هذلولی می‌شود. این امر حالت‌های رزونانس هذلولی متمایز، مانند مدهای k بالا، را افزایش می‌دهد و منجر به جذب قوی‌تر می‌شود. جابجایی مشاهده شده رزونانس به طول موج‌های کوتاه‌تر با افزایش N به افزایش جفت شدگی بین حالت‌های پلاسمون گرافن منفرد نسبت داده می‌شود. علاوه بر این، شکل (۳-د) نشان می‌دهد که با تغییر دوره‌ی تناوب سلول واحد (p) از 180 تا 240 نانومتر، جابه‌جایی محسوسی در موقعیت پیک‌های رزونانس در طیف بازتاب مشاهده می‌شود. افزایش مقدار p باعث انتقال پیک‌های رزونانس به طول‌موج‌های بلندتر می‌شود که این پدیده ناشی از افزایش فاصله‌ی بین گریتینگ‌های فلزی و در نتیجه تغییر در شرایط جفت شدن مدهای پلاسمونی سطحی است. در واقع، با بزرگ‌تر شدن دوره تناوب، برهم‌کنش بین موج تابشی و مدهای پلاسمونی ضعیف‌تر شده و طول‌موج تشدید به ناحیه مادون قرمز بلندتر منتقل می‌شود. این ویژگی نشان می‌دهد که پارامتر pنقش مؤثری در تنظیم موقعیت رزونانس دارد و از آن می‌توان برای طراحی و بهینه‌سازی عملکرد نوری حسگر، به‌ویژه در کنترل بازه‌ی عملکرد طیفی و افزایش حساسیت آن، بهره برد. برای بهینه‌سازی عملکرد حسگر با پایش تغییرات در طول موج رزونانس، شبیه‌سازی‌های FDTD بعدی با استفاده از پارامترهای زیر انجام می‌شوند: N=12، g = 30 نانومتر، p = 210 نانومتر و E_F = 0.64eV.

۳-۱- انرژی فرمی قابل تنظیم گرافن:

یک طرح عملی برای تنظیم رسانایی گرافن، از طریق بایاس الکتریکی، توسط چانگ و همکاران، نشان داده شده است. که در آن پتانسیل شیمیایی گرافن با اعمال یک ولتاژ بایاس در هر لایه گرافن به طور موثر تنظیم شده است. یک طرح مشابه را می توان در ساختار HMM پیشنهادی ما برای بایاس الکتریکی لایه گرافن، که بین دو لایه Al2O3 قرار گرفته است، اتخاذ کرد. انرژی فرمی کنترل شده با ولتاژ، می تواند برای تنظیم رسانایی سطحی گرافن و در نتیجه کنترل خواص جذب ساختار فراماده Graphene/Al_2O_3 استفاده شود[۳۷, ۳۸] .این مطلب در شکل (۴) نشان داده شده است، که در آن هر مقدار E_F مربوط به سطح دوپینگ خاصی در گرافن است.



شکل ۴- طیف بازتاب ساختار فراماده Graphene/Al2O3 جفت شده با نانوگریتینگ گرافنی با مقادیر متفاوت انرژی فرمی گرافن

افزایش انرژی فرمی منجر به تقویت محصورشدگی میدان و کاهش شاخص مؤثر مدهای پلاسمونیک می‌گردد. در نتیجه، انتقال طیفی پاسخ نوری به سمت طول‌موج‌های کوتاه‌تر (ناحیه آبی) همراه با افزایش جذب نوری مشاهده می‌شود. این قابلیت تنظیم، مکانیسم قدرتمندی را برای بهینه‌سازی عملکرد حسگر و بهبود حساسیت در کاربردهای حسگر زیستی در زمان واقعی ارائه می‌دهد. ترسیم بخش حقیقی $\varepsilon_{\square}$در مقابل طول موج های فرودی برای مقادیر مختلف E_F نشان می دهد که با افزایش E_F ، ناحیه هذلولی به سمت طول موج‌های کوتاه‌تر (تغییر آبی) تغییر می‌کند که وابستگی شدید ویژگی‌های نوری HMM را به انرژی فرمی گرافن تأیید می‌کند.

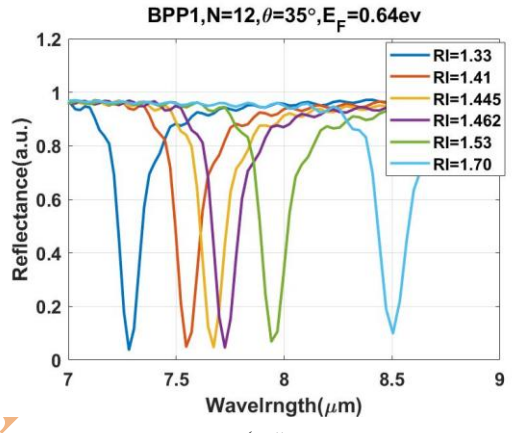
تنظیم انرژی فرمی گرافن در کاربردهای عملی از طریق اعمال ولتاژ گیت در ساختارهای گرافن–دی‌الکتریک–الکترود قابل انجام است. در ساختار پیشنهادی، لایه Al_2O_3 به‌عنوان دی‌الکتریک گیت عمل کرده و با افزودن یک الکترود پشتی یا گیت بالایی، انرژی فرمی گرافن به‌صورت الکتریکی تنظیم شود. تغییر ولتاژ گیت موجب تغییر چگالی حامل‌ها در گرافن و در نتیجه جابه‌جایی رزونانس‌های پلاسمونی می‌شود. این روش در ساختارهای

UNCORRECTED PROOF

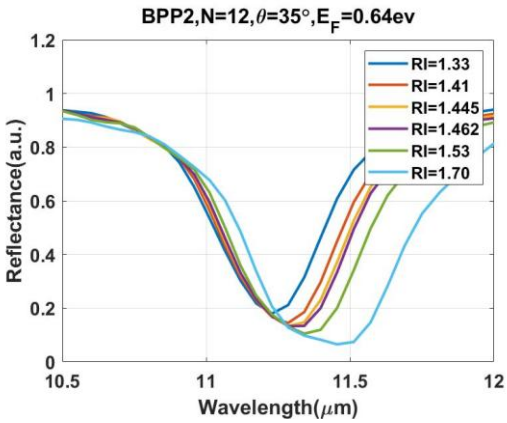
مبتنی بر گرافن به‌طور گسترده در ادبیات علمی گزارش شده و از نظر فناوری ساخت قابل تحقق است.

۳-۲- ارزیابی عملکرد سنسور:

عملکرد حسگر با محاسبه حساسیت هر یک از مدهای تکانه بلند در پاسخ به حضور مولکول‌های زیستی، که با ضریب شکست (RI) مربوط به آنها مشخص شده است، ارزیابی می‌شود. شکل(۵- الف و ب) طیف‌های بازتابی را برای هر یک از مدهای BPP تحت شرایط مختلف RI نشان می‌دهد. همانطور که قبلاً نشان داده شد، افزایش RI منجر به جابجایی قرمز در طول موج رزونانس برای هر مد می‌شود.



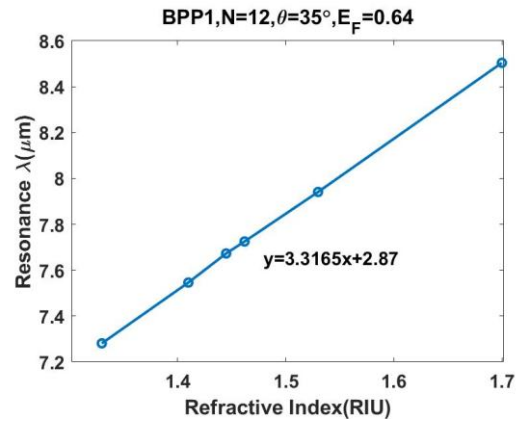
الف)



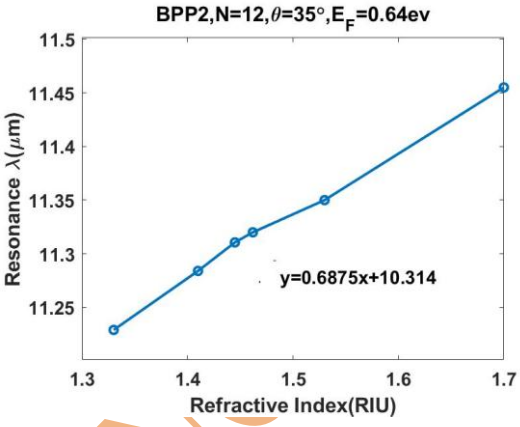
ب)

شکل ۵- طیف‌های بازتاب ساختار فراماده Graphene/Al2O3 جفت شده با نانوگریتینگ گرافنی برای تشخیص مولکول‌ها با ضریب شکست‌های مختلف الف) برای BPP1 ب) برای BPP2

رابطه‌ی خطی بین طول‌موج رزونانس (λ) و ضریب شکست محیط نمونه، همان‌طور که در شکل (۶) نشان داده شده است، بیانگر حساسیت بالای حسگر زیستی پیشنهادی نسبت به تغییرات ضریب شکست است. با افزایش ضریب شکست از ۱.۳۵ تا ۱.۷RIU ، طول‌موج رزونانس به‌طور مشخصی به سمت مقادیر بلندتر (تغییر قرمز) جابه‌جا می‌شود که نشان‌دهنده‌ی برهم‌کنش قوی نور و ماده در سطح حسگر است. این پاسخ تقریباً خطی و یکنواخت نشان‌دهنده‌ی توانایی بالای تشخیص و پایداری مناسب ساختار پیشنهادی برای کاربردهای زیست‌حسگری با دقت بالا است.



الف)



ب)

شکل ۶- رابطه خطی متناظر طول موج رزونانس در مقابل RI محیط الف) برای BPP1 ب) برای BPP2

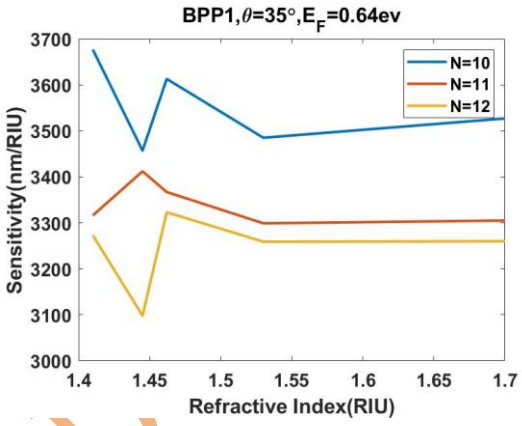
حساسیت زیست حسگر پیشنهادی از رابطه زیر بدست می آید:[۳۹]

$$S = \frac{\Delta\lambda_r}{\Delta n} \qquad (۸)$$

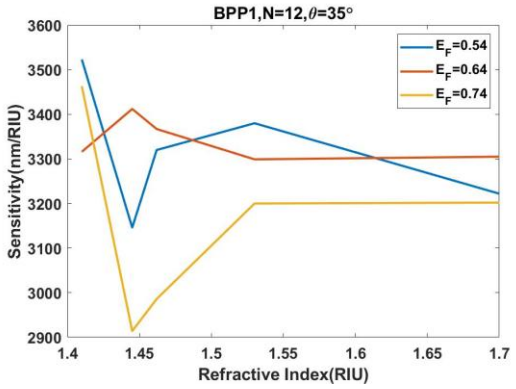
که در آن، $\Delta\lambda_r$ تغییر طول موج تشدید ناشی از تغییر Δn در ضریب شکست محیط اطراف، با توجه به آب

UNCORRECTED PROOF

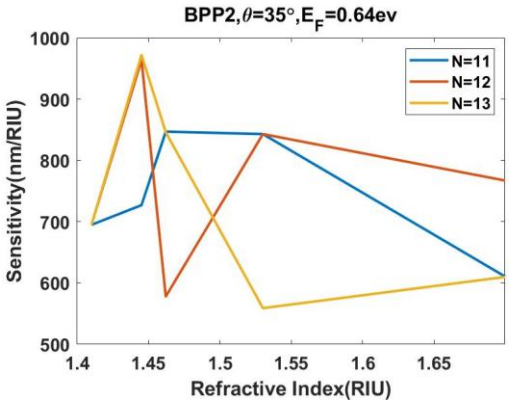
(RI=1.33) به عنوان پس‌زمینه است. تغییر طول موج تشدید، نسبت به محلول مرجع، برای بیومولکول‌های معمولی مانند جیمونوگلوبولین انسانی (IgG, RI = 1.41)، آلبومین سرم انسانی (HSA,RI = 1.445)، DNA تک رشته‌ای (ss-DNA,RI=1.462) و DNA دو رشته ای (ds-DNA,RI=1.53) و کلسترول خالص (RI=1.70) محاسبه می شود.



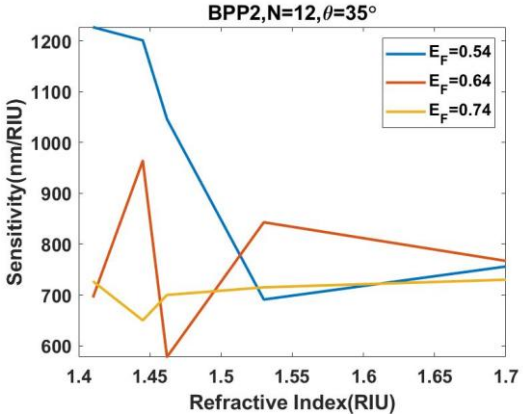
الف)



ب)



ج)



د)

شکل ۷- حساسیت حسگر زیستی فرامادهGraphene/Al2O3 برای تشخیص مولکول‌های زیستی، که با ضریب شکست مربوطه آنها نسبت به ضریب شکست آب (RI=1.33) به عنوان مرجع نشان داده شده است. الف) حساسیت BPP1 به ازای مقادیر متفاوت N ، ب) حساسیت BPP1 به ازای مقادیر متفاوت انرژی فرمی گرافن، ج) حساسیت BPP2 به ازای مقادیر متفاوت N ، د) حساسیت BPP2 به ازای مقادیر متفاوت انرژی فرمی گرافن

شکل (۷) حساسیت زیست‌حسگر پیشنهادی را بر حسب تغییر ضریب شکست محیط اطراف با تغییر تعداد دولایه های graphene/Al_2O_3 و تغییر انرژی فرمی گرافن نشان می‌دهد. همان‌طور که مشاهده می‌شود، بیشترین مقدار حساسیت ساختار مربوط به BPP1 می باشد که به ازای N=10 برابر با ۳۶۷۷ و به ازای N=11 برابر با ۳۴۱۲ و به ازای N=12 برابر ۳۳۲۳ می باشد ,و همچنین بیشترین میزان حساسیت به هنگام تغییر انرژی فرمی گرافن و به ازای E_F=0.54 برابر با ۳۵۲۳ و به ازای E_F=0.64 برابر با ۳۴۱۲ و به ازای E_F=0.74 برابر ۳۴۶۳ می باشد که بیانگر عملکرد مطلوب حسگر در آشکارسازی تغییرات بسیار جزئی در ضریب شکست آنالیت است.

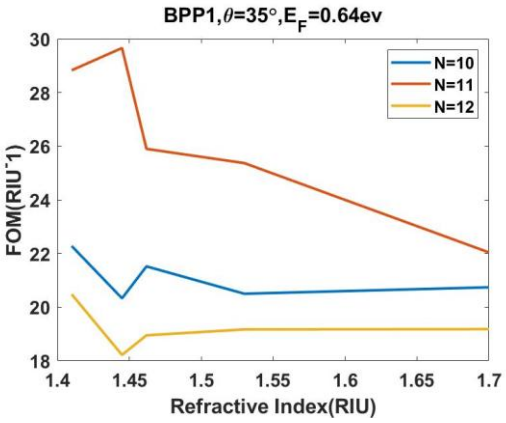
عملکرد سنسور، در حد تشخیص، با تیزی عمق های تشدید تعیین می شود، همانطور که توسط پارامتر FOM تعیین می شود:

$$FOM = \frac{S}{FWHM} \qquad (۹)$$

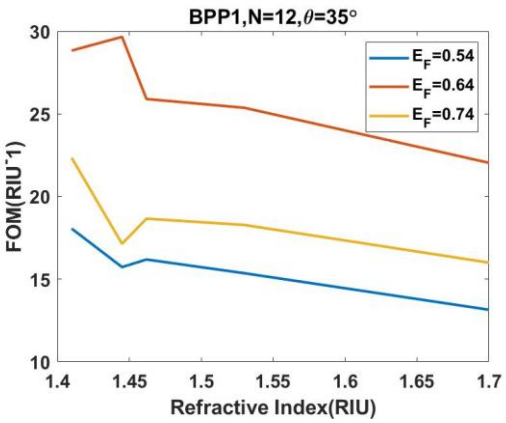
که در آن S حساسیت و FWHM عرض کامل عمق رزونانس در نیمه حداکثر است. در اینجا، دقت تشخیص به

UNCORRECTED

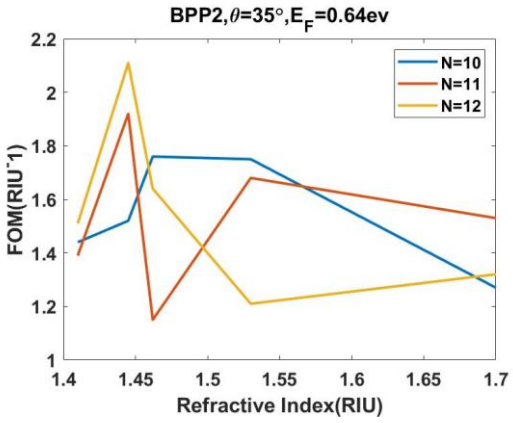
عنوان متقابل FWHM تعریف می شود. یک سنسور با FOM بزرگ دارای دقت تشخیص بالایی است و عمق رزونانسی با عرض خط باریک ایجاد می کند[۴۱,۴۰]. این سنسور را قادر می سازد تا تغییرات کوچک RI را در محیط سنجش با حساسیت بالا تشخیص دهد. مقادیر FOM، برای مد BPP، در شکل ۸ در RI های خاص و به ازای مقادیر متفاوت تعداد دولایه ها(N) و انرژی فرمی گرافن(E_F) نشان داده شده است. به طور کلی، حساسیت های بالا و عمق رزونانس تیز، منجر به FOM های بالاتر می شود.



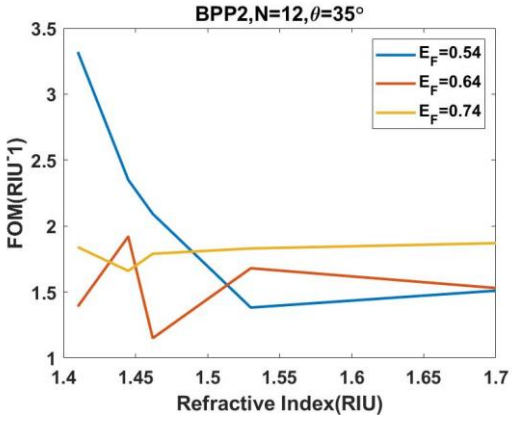
الف)



ب)



ج)



د)

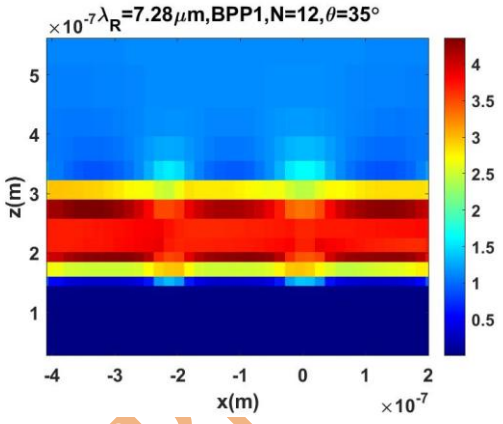
شکل ۸- مقادیر FOM حسگر زیستی فراماده Graphene/Al2O3 برای تشخیص مولکول‌های زیستی که توسط RI مربوطه آنها نشان داده می‌شود. الف)ضریب شایستگی BPP1 به ازای مقادیر متفاوت N، ب) ضریب شایستگی BPP1 به ازای مقادیر متفاوت انرژی فرمی گرافن، ج) ضریب شایستگی BPP2 به ازای مقادیر متفاوت N، د) ضریب شایستگی BPP2 به ازای مقادیر متفاوت انرژی فرمی گرافن

همان‌طور که مشاهده می‌شود، بیشترین مقدار FOM به هنگام تغییر N مربوط به BPP1 می باشد و به ازای N=10 برابر با ۲۲/۲۸ و به ازای N=11 برابر با ۲۹.۶۶ و به ازای N=12 برابر ۲۰.۴۵ می باشدو و همچنین بیشترین میزان FOM به هنگام تغییر انرژی فرمی گرافن و به ازای E_F=0.54 برابر با ۱۸/۰۶ و به ازای E_F=0.64 برابر با ۲۹.۶۶ و به ازای E_F=0.74 برابر ۲۲/۳۴ می باشد. این مقدار بالای FOM همراه با پایداری آن، پتانسیل ساختار

UNCORRECTED

طراحی‌شده را برای کاربردهای زیست‌حسگری با حساسیت بالا تأیید می‌کند.

برای بررسی نحوه‌ی توزیع و تمرکز میدان الکتریکی در ساختار پیشنهادی، نمودار توزیع میدان الکتریکی در شکل (۹) ارائه شده است.



شکل ۹- نمودار توزیع میدان الکتریکی پلاسمون های حجمی در سه دوره تناوب

همان‌طور که مشاهده می‌شود، بیشترین چگالی میدان الکتریکی (رنگ قرمز) در ناحیه‌ی بین لایه‌های گرافن و دی‌الکتریک (Al_2O_3) متمرکز است، که بیانگر برانگیختگی مؤثر مدهای پلاسمونی در مرز این دو ماده است. تمرکز میدان در این ناحیه باعث افزایش برهم‌کنش نور با آنالیت و در نتیجه بهبود حساسیت زیست‌حسگر می‌شود. کاهش تدریجی شدت میدان در نواحی بالاتر (رنگ‌های آبی و سبز) نشان‌دهنده‌ی تضعیف میدان در فاصله‌ی بیشتر از سطح فعال حسگر است. این توزیع یکنواخت و محلی‌شده‌ی میدان تأیید می‌کند که طراحی ساختار با ترکیب لایه‌های گرافن Al_2O_3 و گریتینگ گرافنی منجر به بهینه‌سازی محصورسازی میدان و ارتقای کارایی حسگر در تشخیص تغییرات جزئی ضریب شکست محیط می‌شود.

عملکرد حسگر پیشنهادی با مقایسه آن با حسگرهای زیستی پلاسمونیک پیشرفته مختلف مبتنی بر گرافن، همانطور که در جدول (۱) آمده است، ارزیابی شده است. معیارهای مهمی مانند ساختار حسگری، محدوده تشخیص ضریب شکست (RI)، حداکثر حساسیت و ضریب شایستگی (FOM) در نظر گرفته شده‌اند. بر اساس داده‌های ارائه شده، حسگر پیشنهادی عملکرد بهبود یافته‌ای را ، به ویژه از نظر حداکثر ضریب شایستگی و محدوده تشخیص ضریب شکست (RI) نشان می دهد.

- جدول ۱- مقایسه عملکرد حسگری حسگرهای زیستی پلاسمونیک مبتنی بر گرافن

ساختار حسگر	محدوده ضریب شکست	بازه طول موجی	بیشترین حساسیت (nm. RIU^{-1})	FOM (RIU^{-1})	منبع
حسگر پلاسمونیک ترکیبی فلز - گرافن	1–1.4	-	2300	28.75	[۱۹]
فیبر نوری چند حالته U شکل مبتنی بر LSPR با کمپلکس سه‌بعدی نانوذرات طلا و گرافن چند لایه	1.340–1.352	450-700nm	1251.44	–	[۷]
فیبر تک حالته استاندارد (SMF)، که از پهلو صیقل داده شده و با یک فیلم نازک طلا پوشش داده شده است، و یک ورق گرافن روی فیلم طلا قرار دارد	1.333–1.3505	-	1039.18	–	[۳۰]
روکش پلیمری با روکش اکسید گرافن/نقره، الیاف سیلیکا، فیلم گرافن الگودهی شده به صورت آرایه‌های تناوبی از نانوریبون‌ها روی یک زیرلایه شفاف	1.333–1.3731	-	3311	24	[۳۸]
فراماده هذلولی گرافن/آلومینیوم دی اکسید روی ساختار گریتینگ طلا	1.330–1.530	3-10μm	4052	11.44	[۲۳]
جاذب متامتریال مبتنی بر گرافن تک باند باریک برای کاربردهای حسگری زیستی با پیش‌بینی جذب با استفاده از تحلیل یادگیری ماشین	-	100-300μm	601	4.9	[۴۲]

UNCORRECTED PROOF

تحلیل یادگیری ماشینی یک حسگر ضریب شکست پلاسمونیک مبتنی بر رزونانس فانو با استفاده از رزوناتورهای U شکل	-	500-1900nm	571	14.987	[۴۳]
حسگر ضریب شکست و دما با وضوح بالا با رزونانس فانو در حفره‌های پلاسمونیک دیسکی و پرانتز شکل	1-1.003	700-800nm	735	25,357	[۴۴]
جاذب کامل متامتریال تک حالته مبتنی بر گرافن-پلاسمونیک هیبریدی با یک باند بسیار باریک برای سنجش غلظت هموگلوبین	-	-	3040 GH/RIU	34.5	[۴۵]
جاذب دقیق مبتنی بر گرافن برای تشخیص نشت جزئی آلودگی هوا رادون و کلروفرم	1-1.6	22-26 µm	1321.32 TH/RIU	1334.66	[۴۶]
جاذب مارپیچی شکل دو بانده مستقل از قطبش مبتنی بر گرافن برای حسگری زیست پزشکی تراهرتز	1-1.6	30-150 µm	1150 GH/RIU	1.55	[۴۷]
فراماده هذلولی گرافن/آلومینیوم دی اکسید روی ساختار گریتینگ میکرونوارهای گرافن	1.33-1.7	3-10µm	3412	29.66	ساختار پیشنهادی

با توجه به جدول، ساختار پیشنهادی با FOM برابر ۲۹.۶۶ و بیشینه حساسیت ۳۴۱۲ (nm/RIU) در بازه ضریب شکست ۱/۳۳-۱/۷ و محدوده کاری ۱۰-۳ میکرومتر، عملکردی رقابتی و متعادل نسبت به سایر کارها نشان می‌دهد. اگرچه بالاترین حساسیت مطلق جدول مربوط به برخی ساختارها مانند ۴۰۵۲ یا ۳۳۱۱ است، اما بسیاری از آن‌ها در بازه ضریب شکست محدودتر یا طول موج‌های باریک‌تر عمل می‌کنند. در مقابل، ساختار پیشنهادی علاوه بر حساسیت بالا، بازه تشخیص وسیع‌تری از ضریب شکست را پوشش می‌دهد که آن را برای کاربردهای زیستی متنوع مناسب‌تر می‌کند. همچنین عملکرد آن نسبت به برخی ساختارهای با FOM پایین‌تر (مانند ۱/۵۵ یا ۴/۹) به‌طور محسوسی بهتر است و از نظر توازن بین حساسیت، FOM و گستره کاری، یک گزینه بهینه و کارآمد محسوب می‌شود.

۴- نتیجه گیری

در این پژوهش، یک زیست‌حسگر نوری مبتنی بر فراماده هذلولی $Graphene/Al_2O_3$ همراه با نانوگریتینگ گرافنی در بازه فروسرخ میانی (۱۰-۳ میکرومتر) طراحی و به‌صورت عددی بررسی شد. تحلیل محیط مؤثر نشان داد که ساختار در این بازه دارای رفتار هذلولی بوده و امکان تقویت میدان و ایجاد رزونانس جذب باریک را فراهم می‌کند. نتایج شبیه‌سازی FDTD بیانگر دستیابی به حداکثر حساسیت ۳٤۱۲ nm/RIU و ضریب شایستگی (FOM) برابر با ۲۹/٦٦ است. همچنین موقعیت رزونانس جذب از طریق تنظیم انرژی فرمی گرافن به‌صورت پویا قابل کنترل است. این ویژگی‌ها ساختار پیشنهادی را به گزینه‌ای مناسب برای کاربردهای زیست‌حسگری بدون برچسب در ناحیه فروسرخ میانی تبدیل می‌کند.

تقدیر و تشکر

نویسنده این مقاله از همفکری اعضای هیئت تحریریه مجله علمی-پژوهشی مدل سازی در مهندسی دانشگاه سمنان کمال سپاسگزاری را دارند.

تعارض منافع

نویسنده اعلام می کند که در مورد انتشار این مقاله تعارض منافع وجود ندارد.

تاییدیه اخلاقی

نویسندگان متعهد می‌شوند که مطالب این مقاله را در هیچ مجله دیگری به چاپ نرسانده اند.

مشارکت های نویسندگان

سعید حاجی نصیری و شبنم عندلیبی میاندوآب اساتید راهنمای پایان نامه حیدر فرجی بودند .تعریف موضوع و راهنمایی های لازم بر عهده سعید حاجی نصیری و شبنم عندلیبی میاندوآب بوده و انجام شبیه سازی ها بر عهده حیدر فرجی بوده است.

منابع مالی ندارد

UNCORRECTED PROOF

مراجع

[1] Borisov, Sergey M., and Otto S. Wolfbeis.“Optical Biosensors.” Chemical Reviews 108, no. 2 (2008): 423–461.

[2] Anker, Jeffrey N., W. Paige Hall, Olga Lyandres, Nathan C. Shah, Jing Zhao, and Richard P. Van Duyne. “Biosensing with Plasmonic Nanosensors.” Nature Materials 7, no. 6 (2008): 442–453.
[3] Brolo, Alexandre G.“Plasmonics for Future Biosensors.” Nature Photonics 6, no. 11 (2012): 709–713.

[4] Zeng, Shuwen, Dominique Baillargeat, Ho-Pui Ho, and Ken-Tye Yong.“Nanomaterials Enhanced Surface Plasmon Resonance for Biological and Chemical Sensing Applications.” *Chemical Society Reviews* 43, no. 10 (2014): 3426–3452.

[5] Zijlstra, Peter, Pedro M. R. Paulo, and Michel Orrit.“Optical Detection of Single Non-Absorbing Molecules Using the Surface Plasmon Resonance of a Gold Nanorod.” Nature Nanotechnology 7, no. 6 (2012): 379–382.

[6] Homola, Jiří, Sinclair S. Yee, and Günter Gauglitz.“Surface Plasmon Resonance Sensors.” Sensors and Actuators B: Chemical 54, no. 1–2 (1999): 3–15.

[7] Li, Can, Zhen Li, Shuo Li, Yachao Zhang, Bing Sun, Yanyan Yu, Wenjing Yue, et al.“LSPR Optical Fiber Biosensor Based on a 3D Composite Structure of Gold Nanoparticles and Multilayer Graphene Films.” Optics Express 28, no. 5 (2020): 6071–6083.

[8] Kabashin, Andrei V., Paul Evans, Sergey Pastkovsky, William Hendren, Gregory A. Wurtz, Robert Atkinson, Anatoly V. Zayats, et al.“Plasmonic Nanorod Metamaterials for Biosensing.” Nature Materials 8, no. 11 (2009): 867–871.

[9] Sreekanth, Kandammathe V., Yildiray Alapan, Mohamed ElKabbash, Amanda M. Wen, Emrah Ilker, Michael Hinczewski, Giuseppe Strangi, et al.“Enhancing the Angular Sensitivity of Plasmonic Sensors Using Hyperbolic Metamaterials.” Advanced Optical Materials 4, no. 11 (2016): 1767–1772.

[10] Sreekanth, Kandammathe V., Yildiray Alapan, Mohamed ElKabbash, Emrah Ilker, Michael Hinczewski, Umut A. Gurkan, Giuseppe Strangi, et al.“Extreme Sensitivity Biosensing Platform Based on Hyperbolic Metamaterials.” Nature Materials 15, no. 6 (2016): 621–627.

[11] Poddubny, Alexander, Ivan Iorsh, Pavel Belov, and Yuri Kivshar.“Hyperbolic Metamaterials.” Nature Photonics 7, no. 12 (2013): 948–957.

[12] Avrutsky, Ivan, Ildar Salakhutdinov, Justin Elser, and Viktor Podolskiy.“Highly Confined Optical Modes in Nanoscale Metal–Dielectric Multilayers.” Physical Review B: Condensed Matter and Materials Physics 75, no. 24 (2007): 241402.

[13] Sreekanth, Kandammathe Valiyaveedu, Antonio De Luca, and Giuseppe Strangi.“Experimental Demonstration of Surface and Bulk Plasmon Polaritons in Hypergratings.” Scientific Reports 3, no. 1 (2013): 3291.

[14] Sreekanth, Kandammathe V., Krishna K. H., Antonio De Luca, and Giuseppe Strangi.“Large Spontaneous Emission Rate Enhancement in Grating Coupled Hyperbolic Metamaterials.” Scientific Reports 4, no. 1 (2014): 6340.

[15] Sreekanth, Kandammathe V., Antonio De Luca, and Giuseppe Strangi.“Excitation of Volume Plasmon Polaritons in Metal–Dielectric Metamaterials Using 1D and 2D Diffraction Gratings.” Journal of Optics 16, no. 10 (2014): 105103.

[16] Ju, Long, Baisong Geng, Jason Horng, Cyriac Girit, Mark Martin, Zhongwei Hao, Feng Wang, et al. “Graphene Plasmonics for Tunable Terahertz Metamaterials.” Nature Nanotechnology 6, no. 10 (2011): 630–634.

[17] Yan, Hugen, Tony Low, Wenjing Zhu, Yilei Wu, Michael Freitag, Xiaobo Li, Fengnian Xia, et al. “Damping Pathways of Mid-Infrared Plasmons in Graphene Nanostructures.” Nature Photonics 7, no. 5 (2013): 394–399.

[18] Li, Xuanhua, Jinmeng Zhu, and Bingqing Wei.“Hybrid Nanostructures of Metal/Two-Dimensional Nanomaterials for Plasmon-Enhanced Applications.” Chemical Society Reviews 45, no. 11 (2016): 3145–3187.

[19] Vafapour, Zahra, Yaser Hajati, Mahdi Hajati, and Hadi Ghahraloud.“Graphene-Based Mid-Infrared Biosensor.” Journal of the Optical Society of America *B* 34, no. 12 (2017): 2586–2592.

UNCORRECTED PROOF

[20] Hong, Qian, Jie Luo, Chen Wen, Jian Zhang, Zhen Zhu, Shouqin Qin, and Xiaohui Yuan.“Hybrid Metal–Graphene Plasmonic Sensor for Multi-Spectral Sensing in Both Near- and Mid-Infrared Ranges.” Optics Express 27, no. 24 (2019): 35914–35924.

[21] Fakharian, Mohammad Mehdi.“Design of a Perfect Multi-Band Graphene Metamaterial Absorber with Polarization-Insensitive Capability for Terahertz Applications.” Journal of Modeling in Engineering 20, no. 69 (1401): 93–102.(in pesian)

[22] Wu, Tingting, Yu Luo, and Lei Wei.“Mid-Infrared Sensing of Molecular Vibrational Modes with Tunable Graphene Plasmons.” Optics Letters 42, no. 11 (2017): 2066–2069.

[23] Sreekanth, Kandammathe V., Mohamed ElKabbash, Yildiray Alapan, Emrah Ilker, Michael Hinczewski, Umut A. Gurkan, and Giuseppe Strangi.“Hyperbolic Metamaterials-Based Plasmonic Biosensor for Fluid Biopsy with Single Molecule Sensitivity.” EPJ Applied Metamaterials 4, no. 1 (2017).

[24] Cynthia, S., R. Ahmed, S. Islam, K. Ali, and M. Hossain.“Graphene Based Hyperbolic Metamaterial for Tunable Mid-Infrared Biosensing.*”* RSC Advances 11, no. 14 (2021): 7938–7945.

[25] Baqir, M. A., and P. K. Choudhury.“Hyperbolic Metamaterial-Based Optical Biosensor for Detecting Cancer Cells.” IEEE Photonics Technology Letters 35, no. 4 (2022): 183–186.

[26] Bahareh Khodadadi and Pejman Rezaei, "An analytical approach to estimate the sensitivity of an adsorbent-based refractive index biosensor from the slope of frequency change," Journal of Modeling in Engineering, (1404): -,(in persian)

[27] Chang, Y. C., C. H. Liu, C. H. Liu, S. Zhang, S. R. Marder, E. E. Narimanov, T. B. Norris, et al.“Realization of Mid-Infrared Graphene Hyperbolic Metamaterials.” Nature Communications 7, no. 1 (2016): 10568.

[28] Baqir, M. A., A. Farmani, T. Fatima, M. R. Raza, S. F. Shaukat, and A. Mir.“Nanoscale, Tunable, and Highly Sensitive Biosensor Utilizing Hyperbolic Metamaterials in the Near-Infrared Range.” Applied Optics 57, no. 31 (2018): 9447–9454.

[29] Pianelli, A., R. Kowerdziej, M. Dudek, K. Sielezin, M. Olifierczuk, and J. Parka.“Graphene-Based Hyperbolic Metamaterial as a Switchable Reflection Modulator.” Optics Express 28, no. 5 (2020): 6708–6718.

[30] Su, Zengping, Yueke Wang, and Hangyu Shi.“Dynamically Tunable Directional Subwavelength Beam Propagation Based on Photonic Spin Hall Effect in Graphene-Based Hyperbolic Metamaterials.” Optics Express 28, no. 8 (2020): 11309–11318.

[31] Zhang, N. M. Y., K. Li, P. P. Shum, X. Yu, S. Zeng, Z. Wu, L. Wei, et al.“Hybrid Graphene/Gold Plasmonic Fiber-Optic Biosensor.” (2016).

[32] Ogawa, S., S. Fukushima, and M. Shimatani.“Graphene Plasmonics in Sensor Applications: A Review.” Sensors 20, no. 12 (2020): 3563.

[33] Barrios, Carlos Angulo.“Modeling of a Graphene Nanoribbon–Based Microfluidic Surface Plasmon Resonance Biosensor.” Plasmonics 17, no. 2 (2022): 745–752.

[34] Ou, X., Y. Liu, M. Zhang, L. Hua, and S. Zhan.“Plasmonic Gold Nanostructures for Biosensing and Bioimaging.” Microchimica Acta 188, no. 9 (2021): 304.

[35] Faraji, H., S. Haji-Nasiri, and S. A. Miandoab.“Correction: Engineered Graphene-Integrated 3D Curved Hyperbolic Metamaterial Nanolenses for Advanced Multiselective Nanophotonic Biosensing.” Optical and Quantum Electronics 57, no. 11 (2025): 608.

[36] Xiang, Y., X. Dai, J. Guo, H. Zhang, S. Wen, and D. Tang.“Critical Coupling with Graphene-Based Hyperbolic Metamaterials.” Scientific Reports 4, no. 1 (2014): 5483.

[37] Brouillet, Jeremy, Georgia T. Papadakis, and Harry A. Atwater.“Experimental Demonstration of Tunable Graphene-Polaritonic Hyperbolic Metamaterial.” Optics Express 27, no. 21 (2019): 30225–30232.

[38] Wang, Q., and B. T. Wang. "Surface Plasmon Resonance Biosensor Based on Graphene Oxide/Silver Coated Polymer Cladding Silica Fiber." *Sensors and Actuators B: Chemical* 275 (2018): 332–338.

[39] Wang, Qi, and Bo-Tao Wang.“Surface Plasmon Resonance Biosensor Based on Graphene Oxide/Silver Coated Polymer Cladding Silica Fiber.” Sensors and Actuators B: Chemical 275 (2018): 332–338.

UNCORRECTED PROOF

[40] Yousef Rafiq Irani, Javad Javidan, and Hamid Heydarzadeh.“A Fully Multiband Terahertz Absorber Graphene Structure with Frequency Tunability and Polarization-Independent Applicability in Biosensors.” Journal of Modeling in Engineering 23, no. 83 (1404): 1–10.(in persian)

[41] Alireza Pileroudi, Javad Javidan, Yousef Rafigh Iranian, and Hamid Heydarzadeh.“Polarization-Independent Dual-Band Graphene Perfect Absorber Structure for Use in Biosensors.” Journal of Modeling in Engineering 23, no. 83 (1404): 121–132.(in persian)

[42] Khani, S., P. Rezaei, and M. Rahmanimanesh. "Single-Narrowband Graphene-Based Metamaterial Absorber for Bio-Sensing Applications with Absorption Prediction Using Machine Learning Analysis." *Results in Engineering* (2025): 107821.

[43] Khani, S., Rezaei, P., & Rahmanimanesh, M. (2025). Machine learning analysis of a Fano resonance based plasmonic refractive index sensor using U shaped resonators. *Scientific Reports*, *15*(1), 23857.

[44] Khani, S., and M. Hayati. "High Resolution Refractive Index and Temperature Sensor with Fano Resonance in Disk and Parenthesis-Shaped Plasmonic Cavities." *Results in Optics* 19 (2025): 100816.

[45] Khani, S. "Hybrid Graphene-Plasmonic-Based Single-Mode Metamaterial Perfect Absorber with an Ultra-Narrow Band for Hemoglobin Concentration Sensing." *IEEE Transactions on Nanotechnology* (2025).

[46] Khodadadi, B., P. Rezaei, and S. Hadipour. "Accurate Graphene-Based Absorber for Slight Leakage Detection of Radon and Chloroform Air-Pollution." *Results in Physics* 71 (2025): 108196

[47] Khodadadi, B., P. Rezaei, and S. Hadipour. "Dual-Band Polarization-Independent Maze-Shaped Absorber Based on Graphene for Terahertz Biomedical Sensing." *Optics Express* 33, no. 3 (2025): 3869–3880.

UNCORRECTED PROOF