

Міністерство освіти і науки України
Харківський національний університет радіоелектроніки

Факультет Електронної та біомедичної інженерії
(повна назва)

Кафедра Фізичних основ електронної техніки
(повна назва)

КВАЛІФІКАЦІЙНА РОБОТА

Пояснювальна записка

рівень вищої освіти другий (магістерський)
ДОСЛІДЖЕННЯ ФОТОННО-КРИСТАЛІЧНОГО СЕНСОРА БАКТЕРІЙ,
ЩО ПЕРЕНОСЯТЬСЯ ВОДОЮ
(тема)

Виконав:
здобувач 2 курсу, групи ФТОІм-23-1
Кириленко В. В.
(прізвище, ініціали)

Спеціальність 175 Інформаційно-вимірювальні
технології
(код і повна назва спеціальності)

Тип програми освітньо-професійна
(освітньо-професійна або освітньо-наукова)

Освітня програма «Фотоніка та
оптоінформатика»
(повна назва освітньої програми)

Керівник проф. каф. ФОЕТ Одаренко Є.М.
(посада, прізвище, ініціали)

Допускається до захисту

Зав. кафедри _____
(підпис)

Гнатенко О.С.
(прізвище, ініціали)

2025 р.

Харківський національний університет радіоелектроніки

Факультет Електронної та біомедичної інженерії
(повна назва)
Кафедра Фізичних основ електронної техніки
(повна назва)
Рівень вищої освіти другий (магістерський)
Спеціальність 175 Інформаційно-вимірювальні технології
(код і повна назва)
Тип програми освітньо-професійна
(освітньо-професійна або освітньо-наукова)
Освітня програма «Фотоніка та оптоінформатика»
(повна назва)

ЗАТВЕРДЖУЮ:

Зав. кафедри _____
(підпис)

« ____ » _____ 20 ____ р.

ЗАВДАННЯ
НА КВАЛІФІКАЦІЙНУ РОБОТУ

здобувачеві Кириленку Валерію Валерійовичу
(прізвище, ім'я, по батькові)

1. Тема роботи Дослідження фотонно-кристалічного сенсора бактерій, що переносяться водою

затверджена наказом університету від « 22 » листопада 2024 р. № 1230 Ст

2. Термін подання студентом роботи до екзаменаційної комісії 28 січня 2025 р.

3. Вихідні дані до роботи Фізичні властивості одновимірних та двовимірних фотонно-кристалічних структур. Відомості про основні принципи побудови фотонно-кристалічних сенсорів. Основні співвідношення матричного методу для дослідження одновимірних фотонних кристалів.

4. Перелік питань, що потрібно опрацювати в роботі _____

1 Огляд та аналіз сучасних фотонно-кристалічних біологічних та хімічних сенсорів.

2 Побудова біологічного сенсору на основі одновимірного фотонного кристалу.

3 Дослідження характеристик сенсорного пристрою для визначення бактерій, які переносяться водою

5. Перелік графічного матеріалу із зазначенням креслеників, схем, плакатів, комп'ютерних ілюстрацій

Демонстраційний матеріал – 15 слайдів

КАЛЕНДАРНИЙ ПЛАН

№	Назва етапів роботи	Терміни виконання етапів роботи	Примітка
1	Інформаційно-тематичний пошук та огляд літературних джерел про фотонні кристали та сенсорні структури на їх основі	02.09.24–30.09.24	Виконано
2	Створення розрахункового проєкту на основі застосування матричного методу	01.10.24–20.10.24	Виконано
3	Виконання чисельних розрахунків характеристик фотонно-кристалічного сенсорного пристрою	21.10.24–12.11.24	Виконано
4	Аналіз результатів розрахунків характеристик біосенсорного пристрою.	13.11.24–28.11.24	Виконано
5	Оформлення пояснювальної записки	29.11.24–18.12.24	Виконано
6	Оформлення демонстраційних матеріалів	19.12.24–05.01.25	Виконано
7	Проходження нормоконтролю та перевірки на академічний плагіат	06.01.25–15.01.25	Виконано
8	Отримання відгуку та рецензії	18.01.25–20.01.25	Виконано
9	Підготовка та захист кваліфікаційної роботи	21.01.25–29.01.25	Виконано

Дата видачі завдання 02 вересня 2024 р.

Здобувач _____
(підпис)

Керівник роботи _____ проф. каф. ФОЕТ Одаренко Є.М.
(підпис) (посада, прізвище, ініціали)

РЕФЕРАТ

Пояснювальна записка кваліфікаційної роботи: 49 с., 23 рис., 5 табл.,
1 додаток, 19 джерел.

БІОЛОГІЧНИЙ СЕНСОР, ДЕФЕКТ ПЕРІОДИЧНОСТІ, МАТРИЧНИЙ МЕТОД, ФОТОННИЙ КРИСТАЛ, ФОТОННО-КРИСТАЛІЧНИЙ СЕНСОР.

Об'єкт дослідження – сенсорний пристрій на основі одновимірного фотонного кристалу для детектування бактерій, що переносяться водою.

Мета роботи – визначення основних експлуатаційних характеристик біологічного сенсорного пристрою на основі одновимірного фотонного кристалу.

Метод дослідження – матричний метод на основі застосування матриць перенесення.

У роботі розглянуто фотонно-кристалічний сенсор на основі одновимірного фотонного кристалу з дефектом періодичності. Створено розрахунковий проєкт для обчислення експлуатаційних характеристик досліджуваної сенсорної системи. Проведено розрахунки характеристик сенсора для різних зразків бактерій, що переносяться водою та здійснено модифікацію структури для поліпшення її характеристик.

ABSTRACT

Explanatory note of the qualification work: 49 pp., 23 figures, 5 tables, 1 appendices, 19 sources.

BIOLOGICAL SENSOR, MATRIX METHOD, PERIODICITY DEFECT, PHOTONIC CRYSTAL, PHOTONIC CRYSTAL SENSOR.

The object of the study is a sensor device based on a one-dimensional photonic crystal for detecting water-borne bacteria.

The purpose of the work is to determine the main operational characteristics of a biological sensor device based on a one-dimensional photonic crystal.

The research method is a matrix method based on the use of transfer matrices.

The work considers a photonic crystal sensor based on a one-dimensional photonic crystal with a periodicity defect. A calculation project has been created to calculate the operational characteristics of the sensor system under study. The sensor characteristics have been calculated for various samples of water-borne bacteria and the structure has been modified to improve its characteristics.

ЗМІСТ

Вступ.....	7
1 Фотонно-кристалічні інтегровані сенсори	8
1.1 Фотонно-кристалічні сенсори для вимірювання показника заломлення	9
1.2 Інтерферометричний ФК сенсор	27
1.3 Багатоканальний фотонно-кристалічний сенсор	29
2. Моделювання фотонно-кристалічного біосенсора.....	31
2.1 Основні розрахункові співвідношення	32
2.2 Дослідження фотонно-кристалічного сенсору.....	33
2.3 Характеристики фотонно-кристалічного сенсору	37
2.4 Модифікація фотонно-кристалічного сенсору.....	37
2.5 Вплив падаючого світла на характеристики біосенсора.....	43
Висновки	47
Перелік джерел посилання	48
Додаток А Демонстраційний матеріал.....	50

ВСТУП

Фотонні кристали – це наноструктуровані матеріали, які можуть маніпулювати світлом на нанорозмірі, дозволяючи високочутливо виявляти біологічні молекули. Функціоналізуючи поверхню фотонного кристала специфічними рецепторами, які зв'язуються з бактеріальними клітинами, можна досягти швидкого та точного виявлення шкідливих патогенів у джерелах води. Завдяки високій чутливості та можливостям моніторингу в реальному часі ця технологія має значні переваги перед традиційними методами виявлення бактерій.

Крім того, розробка фотонно-кристалічного сенсора для бактерій, які переносяться водою, має важливі наслідки для моніторингу навколишнього середовища, спостереження за громадським здоров'ям та оцінки якості води. Можливості моніторингу в реальному часі фотонно-кристалічного сенсора можуть надати цінні дані для систем раннього попередження та швидкого реагування в разі забруднення. Завдяки постійним дослідженням і розробкам в цій галузі сенсоріки існує можливість підвищення ефективності цієї технології та встановлення нових стандартів контролю якості питної води.

В даній кваліфікаційній роботі розглядається одна з можливих конфігурацій біологічного сенсора на основі одновимірного фотонного кристалу з дефектом періодичності у вигляді додаткового шару, де розміщуються зразки водних розчинів.

1 ФОТОННО-КРИСТАЛІЧНІ ІНТЕГРОВАНІ СЕНСОРИ

Сьогодні інтегровані сенсори на основі фотонних кристалів (ФК) представляють один із найпопулярніших класів фотонних датчиків, які зазвичай використовуються для фізичного та хімічного/біохімічного зондування. У цьому контексті головними перевагами цих фотонних сенсорних архітектур є ефективне утримання світла в дуже малих об'ємах, висока вибірковість за довжиною хвилі, надвисока чутливість і вибірковість механізму сприйняття.

Матеріали, які зазвичай використовуються для вимірювання планарних ФК пристроїв, це гетеропітаксціальні шари, шари сполук III-нітриду або діелектричні шари, такі як Si_3N_4 , TiO_2 , SiO_2 та добре відомі пластини напіпровідник-на-ізоляторі (ННІ). Крім того, в останні кілька років все більший інтерес викликають органічні сполуки та полімери. Нарешті, фотонні кристали пористого кремнію нещодавно також були запропоновані для зондування органічних парів. Проте очікується, що майбутні інтегровані фотонні датчики будуть сумісні з CMOS, їх можна буде реалізувати за допомогою недорогих процесів і пристосувати для масового виробництва.

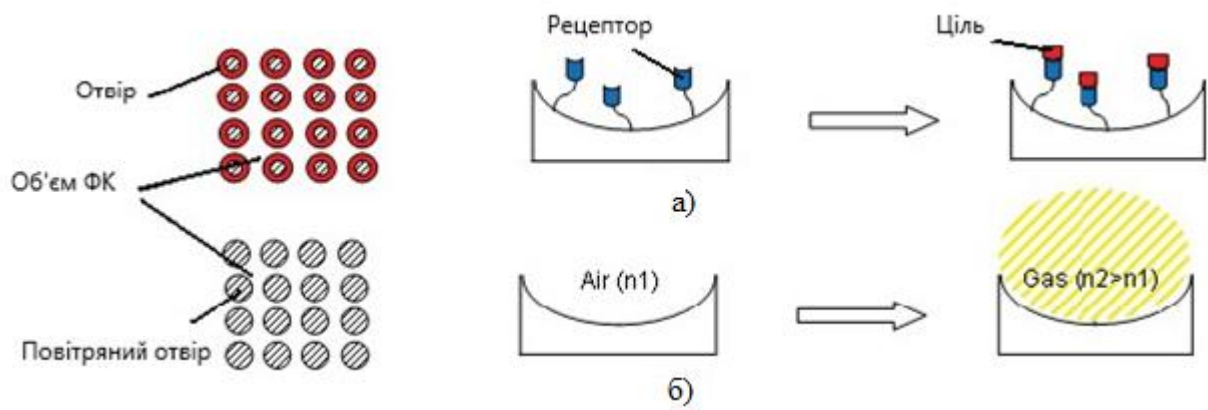
У цьому контексті технологічна платформа ННІ, безсумнівно, є найбільш підходящою платформою для виготовлення надкомпактних і високоефективних інтегрованих датчиків на основі ФК.

В цьому розділі представлено кілька типів архітектури датчиків на основі ФК, зосереджених на принципах вимірювання (тобто датчик на основі показника заломлення (ПЗ), оптичного поглинання, оптико-механічних, нелінійних ефектів) і ефективності пристроїв.

1.1 Фотонно-кристалічні сенсори для вимірювання показника заломлення

Датчики на основі показника заломлення представляють найбільш поширений клас ФК датчиків. Фактично, велика кількість передових архітектур (наприклад, інтегровані мікропорожнини та інтерферометричні конфігурації) використовують вимірювання показника заломлення для виявлення об'єктів. Такі датчики мають численні переваги, такі як мінімальна підготовка зразків без флуоресцентного мічення, виявлення в реальному часі, висока чутливість і вибірковість. Зокрема, принцип чутливості полягає у вимірюванні змін ПЗ масового розчину (наприклад, деіонізованої води, $n_{\text{Вода}} = 1,33$ або повітря; $n_{\text{Повітря}} = 1$; $\lambda = 1,55$ мкм) через присутність хімічних аналітів або газів, які зазвичай характеризуються вищим коефіцієнтом заломлення. Застосування в газовому та водному середовищі досліджуються для виявлення концентрацій хімічних і біологічних речовин. Фактично, використовуючи ці датчики, можна кількісно визначити поверхневу або об'ємну щільність молекули та білка (наприклад, стрептавідину, DN, mRN). Нещодавно було продемонстровано, що передові ФК сенсори належним чином розроблені для виявлення однієї молекули, здатні виявляти кілька молекул, сконцентрованих у складному розчині [1].

На рисунку 1.1, а схематично показаний принцип вимірювання характеристик поверхні. Зокрема, отвори ФК спочатку функціоналізуються молекулами рецепторів, правильно підібраними для вибіркової адсорбції цільових аналітів у складному розчині. Отже, коли пристрій піддається впливу хімічного зразка, цільові молекули іммобілізуються рецепторами на внутрішніх поверхнях отвору датчика.



а) поверхневе виявлення; б) однорідне виявлення.

Рисунок 1.1 – Схеми для сенсоріки поверхонь

Адсорбований шар, що характеризується товщиною t_{ad} , викликає локалізовану зміну показника заломлення навколо діркової області. Нарешті, поверхнева чутливість S_s зазвичай визначається наступним чином:

$$S_s = \frac{\partial n_{eff}}{\partial t_{ad}}, \quad (1.1)$$

де n_{eff} – ефективний індекс оптичної моди, що поширюється в сенсорному пристрої.

Інший механізм чутливості, названий гомогенним чутливістю, схематично зображено на рис. 1.1, б. У цьому випадку ефективний індекс оптичної моди, що поширюється, змінюється через зміни ПЗ покриття, викликані газами або рідкими зразками, належним чином сконцентрованими в середовищі покриття, де експонується фотонний датчик. Отже, однорідну чутливість S_h можна визначити як:

$$S_h = \frac{\partial n_{eff}}{\partial n_c}, \quad (1.2)$$

де n_c – показник заломлення покриття.

Перший клас сенсорів, який буде обговорюватися, це сенсори на основі резонансних мікропорожнин на фотонних кристалах. Ці пристрої виготовляються шляхом введення локалізованих дефектів (тобто видалення одного або більше отворів) у періодичному розподілі отворів. У такий спосіб ідеальна періодичність фотонного кристала порушується, і на карті забороненої зони вводиться дефектний стан, що дозволяє збуджувати резонансні моди.

Два параметри, тобто добротність Q і чутливість до довжини хвилі S_λ , необхідно враховувати для оцінки продуктивності датчика на основі порожнини в ФК. Q -фактор визначає форму резонансних піків і, отже, значення повної ширини на половині максимуму (FWHM) і виражається наступним виразом:

$$Q = \frac{w_0 U(t)}{P(t)}, Q = \frac{f_0}{\Delta f}, \quad (1.3)$$

де w_0 – кутова резонансна частота;

$U(t)$ – енергія, що зберігається в режимі резонатора;

$P(t)$ – енергія, що розсіюється за один цикл (тобто один обхід у резонансній порожнині);

f_0 – резонансна частота;

Δf – пікова смуга пропускання.

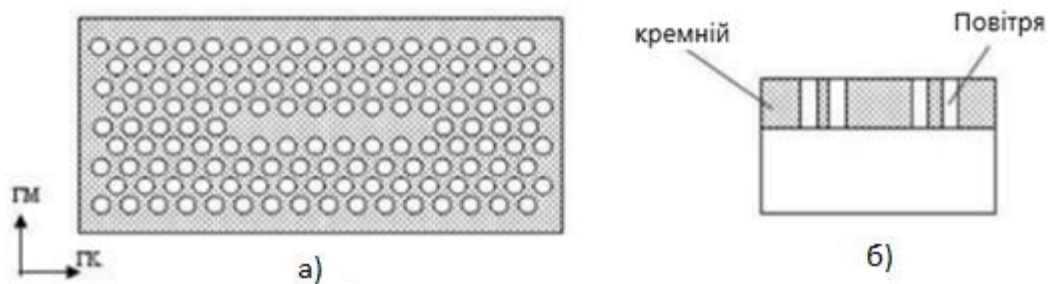
Зокрема, сенсори на основі ФК-порожнини можуть працювати у двох різних режимах. Перший – це режим визначення довжини хвилі, а другий – режим визначення інтенсивності. У першому методі оптичне зчитування полягає в моніторингу довжини хвилі оптичного сигналу за допомогою оптичного аналізатора спектру (ОАС), тоді як в останньому можна контролювати зміни інтенсивності вихідного сигналу за допомогою фотодетектора (ФД). У цьому контексті чутливість до довжини хвилі S_λ представляє фундаментальний параметр для кількісної оцінки продуктивності датчика у випадку схеми опитування довжини хвилі. S_λ визначається відповідно до рівняння (1.4), як відношення між зсувом резонансної довжини

хвилі, викликаним зміною фонового показника заломлення. Крім того, він надається в одиницях nm/RIU (одиниця показника заломлення), як:

$$S_\lambda = \frac{\Delta\lambda}{\Delta n}. \quad (1.4)$$

На рисунку 1.2 показаний типовий приклад двовимірної мікропорожнини ФК у пластині кремній на ізоляторі (КНІ) [2]. Як показано на рисунку 1.2, повітряні отвори витравлюються лише у верхньому кремнієвому шарі, і вони можуть бути реалізовані стандартним анізотропним травленням.

Періодична структура характеризується гексагональною коміркою з постійною ґратки $a = 515$ нм. Радіус повітряних отворів r і товщина шару кремнію h вибираються як співвідношення $r/a = 0,33$ і $h/a = 0,427$, в результаті чого $r = 170$ нм і $h = 220$ нм. Як можна спостерігати на рис. 1.2, мікропорожнина отримана видаленням семи повітряних отворів у центрі ФК. Така мікропорожнина формально позначається як L7-порожнина через кількість отворів, видалених у періодичній структурі.



а) мікропорожнина ФК, реалізована шляхом видалення семи отворів як лінійного дефекту (порожнина L7); б) поперечний переріз.

Рисунок 1.2 – Двовимірні мікропорожнини ФК у пластині кремній на ізоляторі (КНІ)

Різне розташування повітряних отворів поблизу центру порожнини покращує добротність мікропорожнини. Зокрема, зміщуючи три ряди повітряних отворів на відстані $0,02a$, $0,014a$ та $0,017a$ від центру порожнини, можна отримати покращення Q -фактора приблизно у 1000 разів. Крім того, розмістивши три пари міні-отворів в області порожнини, можна додатково підвищити продуктивність резонансної порожнини. Зображення цієї нової компоновки схематично показано на рисунку 1.3. Зокрема, пара під назвою С має радіус $r_C = 0,78r$ і зсув назовні $d_C = 0,2a$. Центр другої пари (тобто В) не переміщується, але радіуси цих отворів мінімізуються, в результаті чого $d_B = 0$ і $r_B = 0,2r$. Нарешті, внутрішня пара отворів має зміщення від початкового положення $d_A = 0,2a$, а радіус трохи більший, ніж у попередньої пари, і становить $r_A = 0,28r$. За цих проектних умов у корпусі з повітряним проникненням порожнина досягає добротності 2600, демонструючи резонансну довжину хвилі близько 1550 нм.

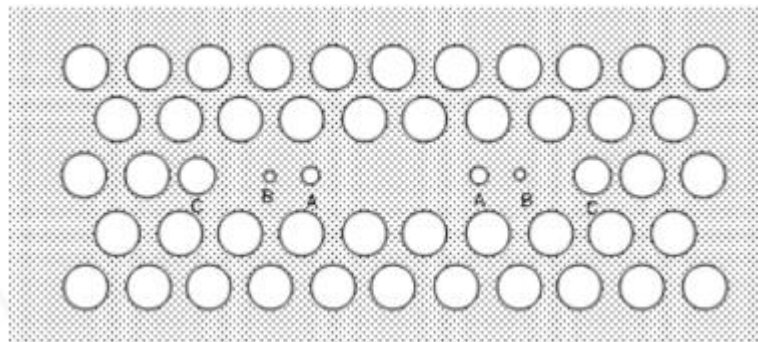


Рисунок 1.3 – Збільшення області порожнини L7

Ефективність запропонованого датчика була оцінена у випадку проникнення води або етанолу, показники заломлення яких оцінюються як 1,332 і 1,359 при $\lambda \approx 1,55$ мкм відповідно. Резонансний зсув довжини хвилі, вимірний у першому випадку, становить 22,28 нм, а в останньому – 12,65 нм. Нарешті, описаний до цього часу пристрій демонструє чутливість до 460 нм/RIU, що є вищим за чутливість, зазвичай досягнуту порожниною L3.

Сенсор для визначення показника заломлення, який використовує резонансну мікропорожнину ФК, характеризується областю порожнини в повітряному отворі. У цьому датчику технологічний підхід, який використовується для реалізації мікропорожнини полягає не в модифікації постійної решітки або радіусів отворів, що характеризують ФК, а у введенні прямолінійного дефекту, в якому модифікована ширина хвилеводу діє як резонансна порожнина [3]. Як показано на рисунку 1.4, пристрій складається з двовимірного ФК, що характеризується гексагональною коміркою та сталою ґратки $a = 510$ нм.

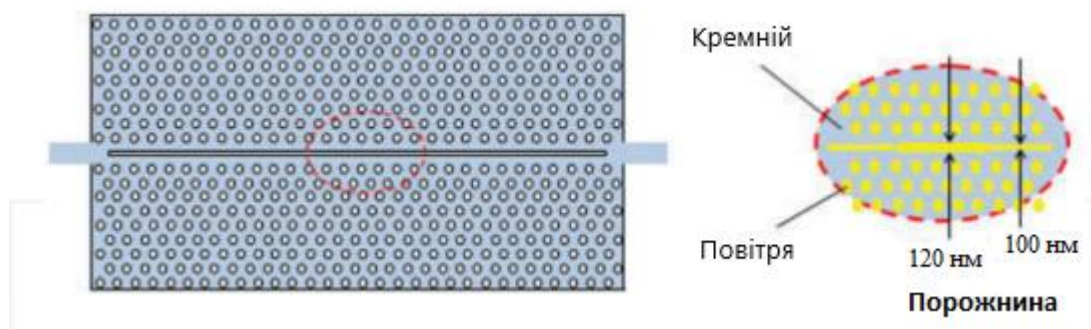


Рисунок 1.4 – Повітряно-щілинна порожнина ФК

Область хвилеводу виходить шляхом видалення ряду повітряних отворів у середині конструкції. Робиться також проріз, вбудований в цю область дефекту періодичності. Ширина повітряної щілини залишається постійною і становить 100 нм, за винятком середини. Щілину роблять шляхом збільшення ширини повітряної щілини від 100 нм до 120 нм у центрі. Це зменшення ширини щілини призводить до утворення відбивних бар'єрів для хвиль у резонансній порожнині, довжина якої $L = 3a$.

Весь пристрій було оброблено на пластині КНІ товщиною 220 нм із шаром оксиду товщиною 2 мкм. Мода резонатора сильно обмежена областю резонатора, ефективний об'єм моди $V_{\text{eff}} = 0,05$ мкм³, а просторове перекриття між модою резонатора та повітряним прорізом становить $F > 0,73$.

Чутливість може бути виражена як функція перекриття просторового режиму F , як повідомляється в наступному виразі:

$$S_{\lambda} = \frac{\Delta\lambda}{\Delta n} = \Gamma \frac{\lambda_0}{n_{eff}}, \quad (1.5)$$

де n_{eff} – ефективний показник моди резонатора;

$n = 3,46$ – показник заломлення кремнію;

n_{gas} – показник заломлення газу;

λ_0 – резонансна довжина хвилі.

Коли повітря з показником заломлення $n_{air} = 1$ проникає в отвори ФК, сенсор демонструє резонансну частоту $\lambda_0 = 1570$ нм, близьку до граничної частоти, яка виникає при 1590 нм. Коефіцієнт якості (добротність) оцінюється як $Q = 26\,000$, а чутливість $S_2 = 570$ нм/RIU.

Ефективність датчика була експериментально кількісно визначена шляхом впливу на порожнину різних газів. Було використано декілька газів. Зокрема, повітря ($n = 1,000265$) як еталонний газ, азот (N_2 , $n = 1,000270$), гелій (He, $n = 1,000032$), вуглекислий газ (CO_2 , $n = 1,000406$), ацетилен (C_2H_2 , $n = 1,000579$) і пропану (C_3H_8 , $n = 1,000999$). Всі показники заломлення наведено на атмосферний тиск на резонансній довжині хвилі $\lambda_0 = 1570$ нм і кімнатній температурі $T = 20$ °С.

Експериментальні результати показують синій зсув для газу He і червоний зсув для газу CO_2 або C_3H_8 , що характеризується вищими ПЗ. Показано, що резонансний зсув довжини хвилі лінійно залежить від змін показника заломлення, розрахованого відносно еталонного газу, тобто повітря.

ФК сенсор, описаний вище, обмежений тим фактом, що на резонансні зсуви довжини хвилі впливають не лише зміни показника заломлення покриття, але й зовнішні параметри, такі як температура, тиск, адсорбована вологість або прогресуюче окислення поверхні датчика. Щоб мінімізувати цей ефект, необхідно перевірити датчик газами, що не містять O_2 , або використовувати

ідентичну архітектуру датчика, що діє як еталонна для компенсації небажаних ефектів, згаданих вище.

ФК сенсор на основі кільцевої резонаторної порожнини був запропонований для моніторингу рівня солоності морської води від 0 % до 40 % [4]. Зокрема, кільцевий резонатор реалізується шляхом видалення ряду кремнієвих стрижнів у структурі ФК, що характеризується періодичним розподілом квадратних комірок кремнієвих стрижнів у повітрі. Архітектура датчика показана на рисунку 1.5.

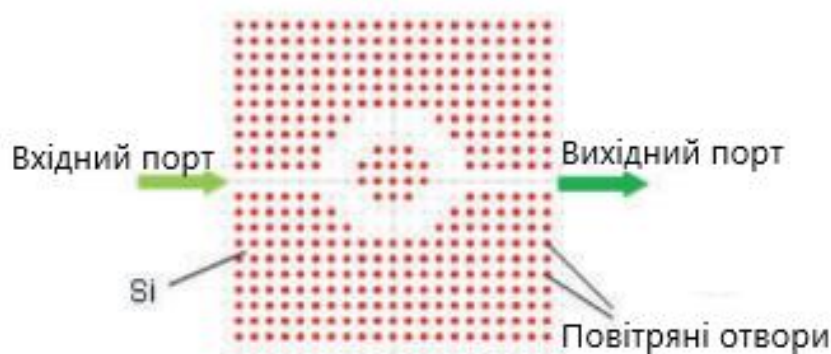


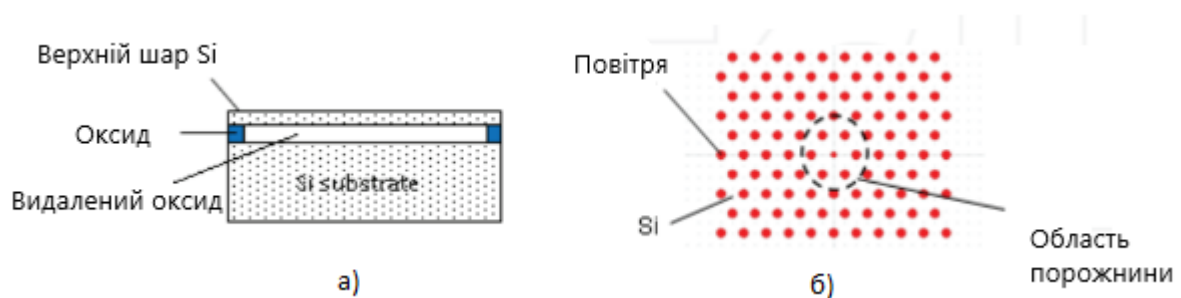
Рисунок 1.5 – Схематична структура датчика для зондування морської води

Постійна решітки $a = 540$ нм, а радіус стрижнів $r = 0,185a = 100$ нм. Показник заломлення кремнієвих стрижнів становить $n = 3,46$, тоді як фоновий ПЗ встановлено як ПЗ морської води. Вхідний і вихідний хвилеводи розміщені в горизонтальному напрямку по відношенню до центру кільцевого резонатора.

Різні відсотки солоності викликають фонові зміни ПЗ, що призводить до помітних змін спектра пропускання датчика. Зокрема, можна прийняти схему опитування як за інтенсивністю, так і за довжиною хвилі, що призводить до більш точного та точного оптичного зчитування. Вихідна ефективність датчика знижується з 99 % до 80 % за рахунок підвищення рівня солі у воді з 0 % до 40 %. Крім того, в діапазоні солоності від 0 % до 40 % ПЗ води зростає від 1,33300 до 1,34031 відповідно. Відповідно до рівняння (1.4), зміни ПЗ фонового розчину викликають зсуви резонансної довжини хвилі. Фактично, в діапазоні

інтересів, тобто від 0 % до 40 %, резонансна довжина хвилі зсувається вниз від 1590,55 нм до 1590,05 нм. Добротність змінюється як функція солоності. Завдяки збільшенню рівня солі у воді добротність збільшується.

Було також запропоновано ФК сенсор на основі порожнини повітряного містка, що демонструє добру чутливість [5]. Цей датчик характеризується трикутним (або, еквівалентно, гексагональним) масивом повітряних отворів з постійною ґратки $a = 440$ нм і радіусом $r = 0,29a = 127,5$ нм. Мікропорожнина була реалізована шляхом зменшення радіуса центрального отвору ($r_d = 0,2a = 88$ нм). Повітряний міст створюється шляхом видалення частини прихованого діоксиду кремнію, який затиснутий між двома шарами кремнію, як показано на рисунку 1.6. Верхній шар кремнію має товщину $t = 0,591a$.



а) поперечний переріз; б) вид зверху.

Рисунок 1.6 – ФК сенсора на основі порожнини повітряного містка

Карта забороненої зони свідчить про наявність фотонної забороненої зони лише для поперечної електричної (TE) поляризованої моди в мікропорожнині. За цих умов чутливість оцінюється як $S = 570$ нм/RIU, що вище, ніж чутливість, оцінена в простому сенсорі на основі ФК КНІ, що характеризується такими ж фізичними характеристиками.

У сенсорі, представленому вище, конструкція радіуса дефекту та товщини плити відіграє фундаментальну роль для покращення продуктивності зондування. Фактично, змінюючи радіус дефекту, можна отримати різні

характеристики забороненої зони. Крім того, можуть бути належним чином введені різні дефектні стани, а отже, і різні резонансні умови. Наприклад, при збільшенні радіуса отвору дефекту відбувається синій зсув резонансної довжини хвилі, демонструючи вищу чутливість. Цей ефект виправданий тим фактом, що більша частина локалізованого поля розподіляється в області порожнини, що призводить до значного перекриття між резонансними оптичними модами та хімічними/біохімічними видами, які потрібно зафіксувати.

Товщина плити є ключовим параметром, оскільки вона впливає на параметри продуктивності, тобто S_2 і добротність. Крім того, товщина плити також серйозно впливає на розподіл поля та ширину забороненої зони. Фактично, для тоншої плити S_2 більше, а добротність менша через меншу обмеженість і більше перекриття між напруженістю електричного поля та фоном. Навпаки, резонансна довжина хвилі зсувається до більшої довжини хвилі за рахунок збільшення товщини плити.

Оригінальне рішення, яке було запропоноване для покращення продуктивності зондування, полягає в ФК сенсорі, заснованому на принципі ПЗ-сенсору, який характеризується масивом резонансних мікропорожнин.

Перший пристрій вбудовано в монолітну кремнієву підкладку товщиною $t = 0,55a = 232,65$ нм [6]. Двовимірний ФК характеризується трикутною решіткою отворів з постійною ґратки $a = 423$ нм і радіусом повітряного отвору $r = 0,32a = 135,36$ нм. Як показано на рисунку 1.7, пристрій складається з хвилеводу, отриманого шляхом видалення ряду повітряних отворів уздовж горизонтального напрямку. Такий хвилевід направляє світло від входу сенсора до виходу. Область порожнини примикає до хвилеводу і реалізується шляхом витягування назовні двох отворів у протилежному напрямку (паралельно хвилеводу). Крім того, радіуси навколишніх отворів були скориговані для оптимізації розміру порожнини. Зокрема, радіус лівого та правого отворів встановлено рівним $r_x = 0,25a$, а радіус верхнього та нижнього отворів дорівнює $r_y = 0,35a$.

Зсув отвору є стратегічним параметром проектування. Фактично, змінюючи зсув отворів порожнини, резонансна довжина хвилі спектра пропускання зміщується, що також призводить до змін добротності.

Для структури, зображеної на рисунку 1.7, було продемонстровано, що оптимальний зсув становить $s_x = 0,2a$, оскільки при цьому значенні досягається максимальна добротність.

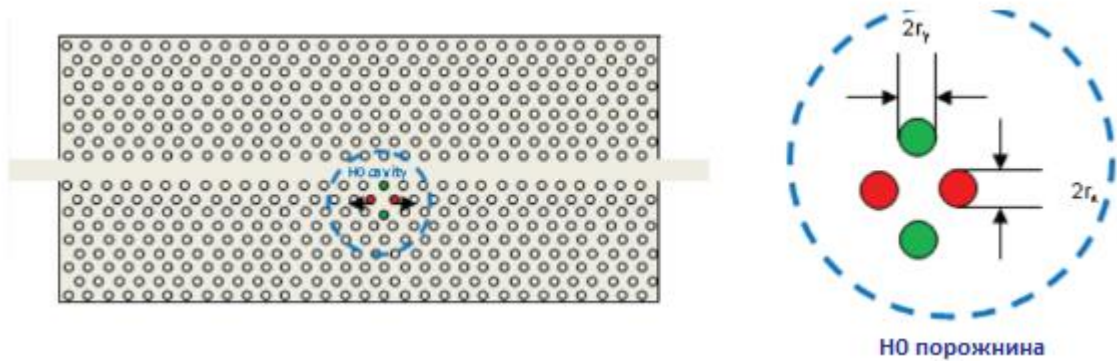


Рисунок 1.7 – Структура порожнини із збільшенням розташування отворів

Крім того, найкращий набір радіусів було встановлено на $r_x = 0,32a$ та $r_y = 0,28a$, щоб отримати добротність $Q = 2,761$.

Іншим основним параметром конструкції є кількість функціональних отворів навколо області порожнини для аналізу масової чутливості. Спочатку зондові рецептори осідають на внутрішніх поверхнях отворів поблизу області порожнини. Коли цільові молекули проникають у отвори, показник заломлення навколо області порожнини змінюється. Це явище пов'язане зі зв'язуванням між молекулами зонда та цільовими об'єктами, що призводить до поверхневого зондування.

Зручно ввести новий параметр, відомий як масова чутливість S_m , який ілюструє залежність резонансного зсуву довжини хвилі від кількості функціоналізованих дірок N :

$$S_m = \frac{\Delta\lambda}{N}. \quad (1.6)$$

Очікується, що чутливість зростає за рахунок зменшення кількості функціональних отворів. Найбільш чутливими до змін ПЗ є внутрішні отвори в горизонтальному напрямку. Отже, щоб оптимізувати подію зондування, необхідно нанести шар молекул зонду лише на поверхню отворів, згаданих вище.

Таким чином, n сенсорів виготовлені в каскаді, з боковим зв'язком з тим самим хвилеводом, що дозволяє багаторазове та паралельне вимірювання. Як показано на рисунку 1.8, кожна H_0 -порожнина характеризується однаковою архітектурою з різними наборами геометричних параметрів. Спектр пропускання показує n різних провалів, кожен з яких не залежить від інших. Коли відбувається подія прив'язки, зсув впливає лише на відповідний спад передачі. Це дозволяє багаторазове та одночасне визначення різних хімічних речовин.

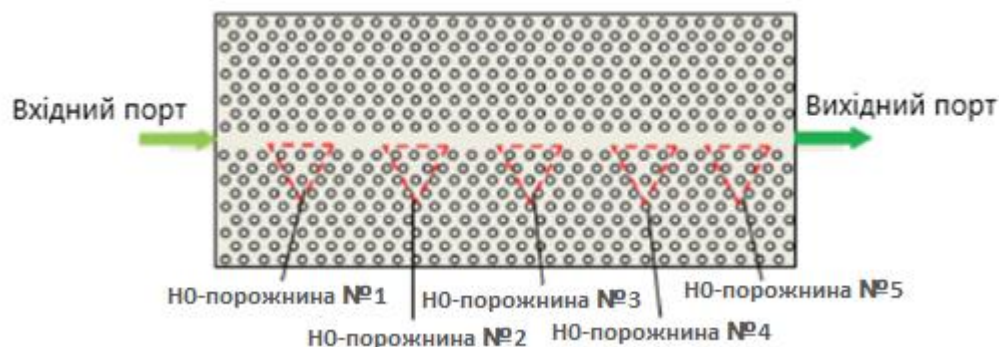


Рисунок 1.8 – Масив резонансних порожнин H_0

Цей датчик демонструє чутливість до довжини хвилі 115,60 нм/RIU. Крім того, чутливість також можна змінювати від 84,39 нм/RIU до 161,25 нм/RIU, регулюючи кількість функціональних отворів від 2 до 28 відповідно. Перевага цієї архітектури полягає в низькій масовій межі виявлення, що досягається за допомогою невеликої функціональної площі, що призводить до хорошого рівня оптичної інтеграції та великого ступеня мультиплексного зондування у водному середовищі.

Для одночасного визначення різних видів у водному середовищі було запропоновано ФК сенсор показника заломлення, заснований на тій же архітектурі, що описана вище (тобто серія каскадних резонансних порожнин) [7]. Архітектура складається з масивів одновимірних ФК резонаторів, з'єднаних з одним хвилеводом шини. Кожна порожнина має дещо іншу ширину відносно інших, так що кожна може незалежно виявляти різні біомолекулярні види у відповідь на зміни ПЗ навколишнього середовища. Механізм чутливості виникає, коли біомолекули, зосереджені в порожнині сенсора, захоплюються молекулами рецептора, попередньо розподіленими на поверхні сенсора. Кільцеві резонатори були розроблені для демонстрації різних резонансних довжин хвиль, що дозволяє мультиплексне виявлення за допомогою одного хвилеводу. Коли цільові молекули вибірково захоплюються рецепторами, провал у спектрі пропускання показує червоний зсув. Аналіз величини цього червоного зсуву дає кількісну інформацію про концентрацію цільових молекул у зразку і, отже, про їхню зв'язану масу.

Структура складається з одномодового кремнієвого хвилеводу з шириною 450 нм і висотою 250 нм, тоді як резонатори були реалізовані з областю порожнини, оточеної 8 повітряними отворами з обох боків діаметром 200 нм, причому одновимірна стала решітки дорівнює 390 нм. Площа порожнини першого датчика була отримана шляхом зміщення назовні внутрішніх отворів на 39 нм від центру, як показано на рисунку 1.9.

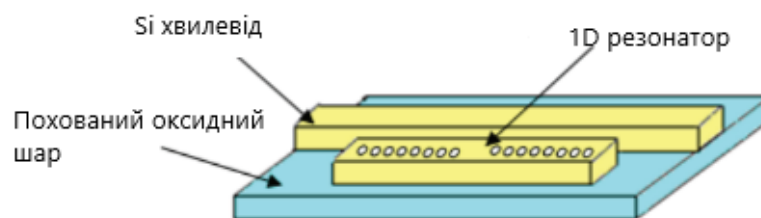


Рисунок 1.9 – Мікропорожнина одновимірного фотонного кристала

Представлену вище архітектуру було застосовано для виявлення різних біомолекул. Перша конфігурація складається з п'яти резонаторів, кожен з яких

функціонує окремим зондом. Зокрема, резонатори, функціоналізовані глутаральдегідом і стрептавідином, служать контролем неспецифічної адсорбції аналіту. Інші резонатори, функціоналізовані моноклональними антитілами, призначені для моніторингу та виявлення *in vivo* концентрацій інтерлейкінів 4, 6 і 8 [7]. Пристрій може виявляти антитіла в діапазоні концентрацій 1 мкг/мл÷1 мг/мл, що підходить для клінічного застосування та медичної діагностики, наприклад тестування на ВІЛ та скринінг на наркотики.

Та сама архітектура, що характеризується аналогічним розташуванням п'яти резонаторів біля ФК хвилеводу, була розроблена з іншою кількістю функціональних отворів, а не з іншим розміром областей порожнини [8]. Кожен резонатор був функціоналізований одноланцюговим моношаром DN (ssDN) товщиною 50 нм з показником заломлення $n_{ssDNA} = 1,456$.

Розроблений сенсор, здатний виявляти *in vivo* окремі частинки розміром з віруси у водному та газоподібному середовищі [9]. Цей ФК сенсор характеризується гексагональним масивом циліндричних повітряних отворів, вбудованих у пластину КНІ з постійною ґраткою $a = 400$ нм і радіусом пор $r = 120$ нм (рис. 1.10). Радіус центрального отвору становить $r_d = 342,5$ нм, що призводить до ширини забороненої зони від 1440 нм до 1590 нм для ТЕ мод.

Латексна сфера з показником заломлення $n = 1,45$ може бути захоплена в центральний отвір ФК, що характеризується більшим діаметром порівняно з діаметром оточуючих отворів і діаметром тієї самої сфери, яку потрібно зафіксувати. Таким чином можна виявити присутність окремої частинки, яка потрапила в найбільший отвір, спостерігаючи за резонансним зсувом довжини хвилі в спектрі пропускання сенсора. Насправді, коли сфера потрапляє в порожнину датчика, резонансний пік, що характеризується невеликою добротністю близько 2000, зміщується в червоний колір приблизно на 4 нм. Крім того, червоний зсув пропорційно збільшується зі збільшенням діаметра латексної сфери. Цей сенсор є корисним інструментом у медицині та охороні здоров'я для виявлення окремих молекул (рис. 1.10).

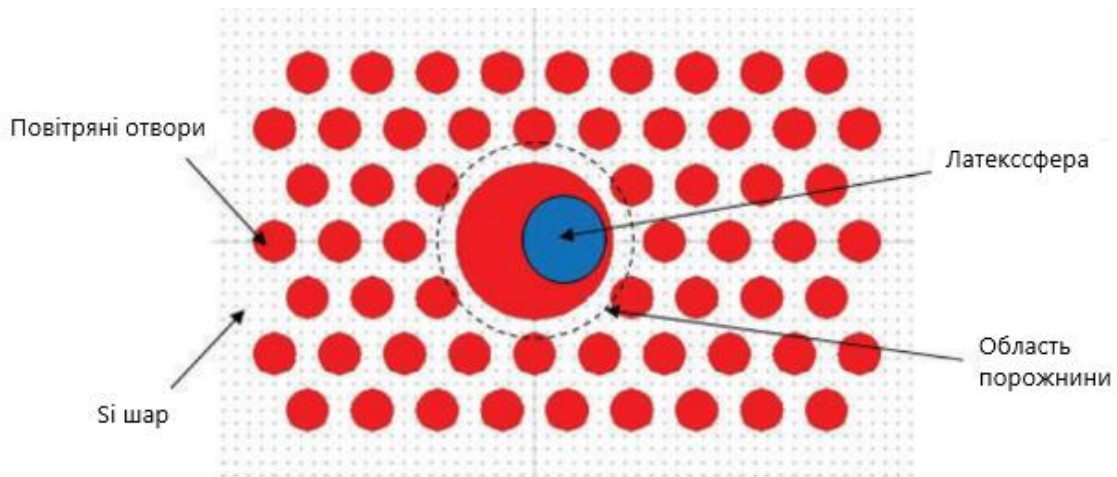


Рисунок 1.10 – Схема ФК сенсора з однією латексною сферою в центральному дефекті мікропорожнини

У кількох сенсорах показника заломлення ФК хвилевід безпосередньо діє як чутливий елемент без проектування будь-якої вбудованої мікропорожнини.

Раніше ФК хвилевід зазвичай реалізовувався шляхом введення лінійного дефекту в періодичну плоску структуру. У таких хвилевідних структурах може направлятися лише світло з довжинами хвиль в межах забороненої зони ФК. Зокрема, моди, що розповсюджуються, обмежені повним внутрішнім відбиттям (ПВВ) у вертикальному напрямку та періодичною структурою збоку.

Ефективність сенсорів показника заломлення можна визначити кількісно шляхом моніторингу змін довжини хвилі відсікання (λ_{cutoff}) як функції ПЗ покриття. Зокрема, λ_{cutoff} описує максимальну довжину хвилі, на якій оптична мода може поширюватися у ФК хвилеводі, і вона залежить від ПЗ середовища покриття. Отже, чутливість датчика можна визначити як співвідношення між змінами довжини хвилі відсікання та змінами ПЗ покриття наступним чином:

$$S = \frac{dT}{dn_c} = \frac{\Delta\lambda_{cutoff}}{\Delta n_c}, \quad (1.7)$$

де T – спектр пропускання;

Δn_c – зміна ПЗ середовища покриття;

$\Delta\lambda_{cutoff}$ – зміна довжини хвилі відсікання.

В роботі [10] був запропонований сенсор для виявлення ssDN, демонструючи межу виявлення 19,8 нМ. Цей датчик, потенційно здатний виявляти дуже низькі концентрації аналіту (наприклад, білків, бактерій, DN), виготовлений у пластині КНІ із шаром кремнію товщиною 250 нм і захованим діоксидом кремнію товщиною 3 мкм.

Постійна решітки ФК становить $a = 390$ нм, а радіус отвору $r = 111$ нм. Отже, структура демонструє керовану ТЕ-моду з краєм смуги, розташованим навколо $\lambda = 1550$ нм. На вході та виході ФК хвилеводу світло подається або збирається одномодовим хвилеводом шириною 500 нм, як показано на рисунку 1.11.



Рисунок 1.11 – Схема ДНК-сенсора на основі ФК, що характеризується вхідним і вихідним одномодовими хвилеводами шириною 500 нм

Робочий режим зондування здійснюється спектральними піками, створеними збудженням кількох k-мод у повільнохвильовому режимі поблизу краю смуги. Насправді, зміни положень піків постійно контролюються, таким чином визначаючи чутливість датчика відповідно до рівняння (1.7).

Сенсор був протестований з додатковим розчином ssDN, зв'язаним із зондом ssDN, попередньо нанесеним на поверхню датчика. піковий зсув $\Delta\lambda = 47,1$ пм відповідає концентрації DN 0,5 мкм у зразку комплексу.

Важливим параметром, який необхідно належним чином розробити для підвищення ефективності вимірювання в однолінійному хвилеводному ФК сенсорі, є радіус отворів, розташованих по обидва боки дефекту лінії [11]. У

цьому контексті запропоновано інтегрований сенсор на основі ФК хвилеводу. Архітектура сенсора характеризується круглими повітряними отворами в кремнієвій пластині, як показано на рисунку 1.12. Структура трикутної решітки має постійну решітки $a = 370$ нм і радіус отвору $r = 120$ нм. Хвилевід отримано шляхом видалення цілого ряду отворів у горизонтальному напрямку, в результаті чого утворюється ФК хвилевід довжиною 9,5 мкм. Крім того, 12 рядів отворів періодично розподіляються з кожного боку дефекту лінії. Сенсор демонструє велику ширину забороненої зони між 1230 нм і 1720 нм для ТЕ мод і дуже малу заборонену зону для поляризації ТМ.

Чутливість пристрою була оцінена шляхом моніторингу граничного зсуву довжини хвилі, коли датчик, спочатку підданий впливу повітря ($n_c = 1$), потім покривається водним розчином (тобто деіонізованою водою з $n = 1,33$). Отже, граничний зсув довжини хвилі оцінюється на 30 нм через зміну ПЗ покриття на 0,33 ($1,33-1$).

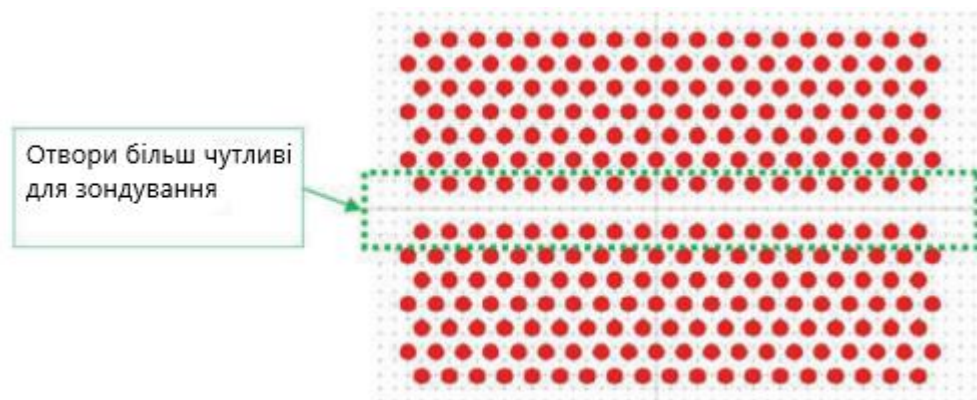


Рисунок 1.12 – Фотонно-кристалічний хвилевідний сенсор із чутливими отворами

Чутливість датчика можна покращити шляхом проникнення зразка для аналізу лише в отвори, прилеглі до дефекту лінії. Таке розташування створює зсув відсікання на 20 нм, що відповідає чутливості 60 нм/RIU.

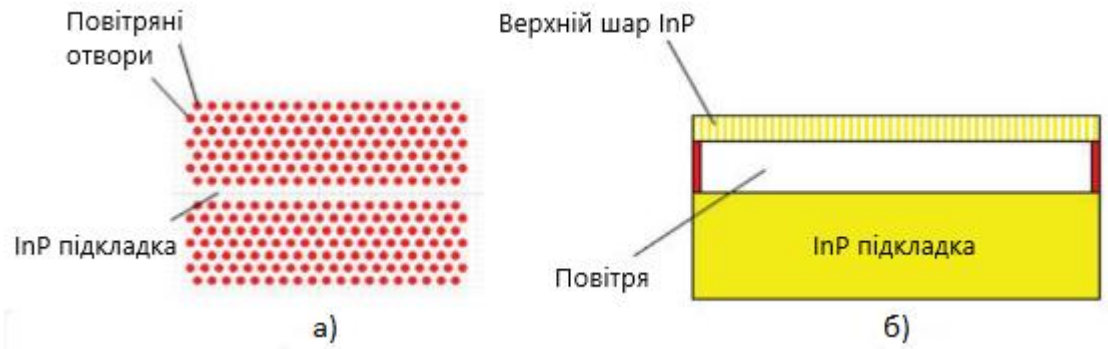
Експерименти показали, що чутливість можна додатково підвищити шляхом оптимізації розміру отворів поблизу дефекту лінії, які більш чутливі,

ніж віддалені області. Насправді, за рахунок збільшення розміру отвору можна досягти зсуву довжини хвилі відсікання на 80 нм і чутливості до $S_2 = 240$ нм/RIU, що призводить до покращення приблизно на 62 % відносно оригінального датчика.

Сенсор для визначення ПЗ також був запропонований для визначення газу. Зокрема, взаємодія між модою повільного світла, що поширюється в структурі, і газом, що проникає в неї, перетворюється на зміни ефективного показника заломлення хвилеводу, що призводить до зміни довжини хвилі режиму повільного світла [12]. Цей тип датчика має перевагу покращення продуктивності сприйняття через покращену взаємодію світла та речовини. Крім того, забезпечується селективність сенсора, оскільки спектр пропускання змінює свою амплітуду лише при заповненні газом структури ФК.

Як показано на рисунку 1.13, сенсор складається з конфігурації мембрани InP. Зокрема, повітряний шар знизу та зверху ФК плити товщиною 285 нм забезпечує симетрію пристрою. Структура ФК вбудована в пластину InP з трикутною періодичністю, постійною ґратки $a = 441$ нм і радіусом повітряних отворів $r = 0,33a$. Хвилевід виходить шляхом видалення цілого ряду повітряних отворів.

Ефективність пристрою оцінювали шляхом дослідження сенсора, заповненого аргоном ($n = 1,000282$) і гелієм ($n = 1,000035$), які належним чином заповнювали ФК хвилевід. Зокрема, було виявлено зсув 0,6 нм у випадку заповнення хвилеводу гелієм і зсув 0,05 нм у випадку заповнення аргоном. Сенсор демонструє хорошу стійкість до збурень навколишнього середовища і він здатний виявляти всі гази, що характеризуються показниками заломлення, подібними до аргону і гелія, за винятком тих, показники заломлення яких дуже близькі до ПЗ повітря (тобто $n_{\text{Air}} = 1$)



а) вид зверху; б) поперечний переріз.

Рисунок 1.13 – Фотонно-кристалічний хвилеводний сенсор газів

1.2 Інтерферометричний ФК сенсор

Існують ФК сенсори, інтегровані в архітектури інтерферометрів. Загалом принцип вимірювання, що характеризує архітектури інтерферометрів, базується на вимірюванні фазового зсуву. Зокрема, якщо збурення виникає лише на одному плечі інтерферометра, вихідний сигнал відрізняється від вхідного сигналу, демонструючи зміну його фази або амплітуди. У конфігурації Маха-Цендера можна кількісно визначити величину фазового зсуву на активному плечі шляхом відстеження інтенсивності вихідного сигналу. Збурення, згадане вище, може бути пов'язане зі зміною показника заломлення покриття в одному плечі інтерферометра через присутність аналітів у зразку. Це явище можна описати наступним співвідношенням:

$$\Delta\phi = \Delta BL = \frac{2\pi}{\lambda} \Delta nL, \quad (1.8)$$

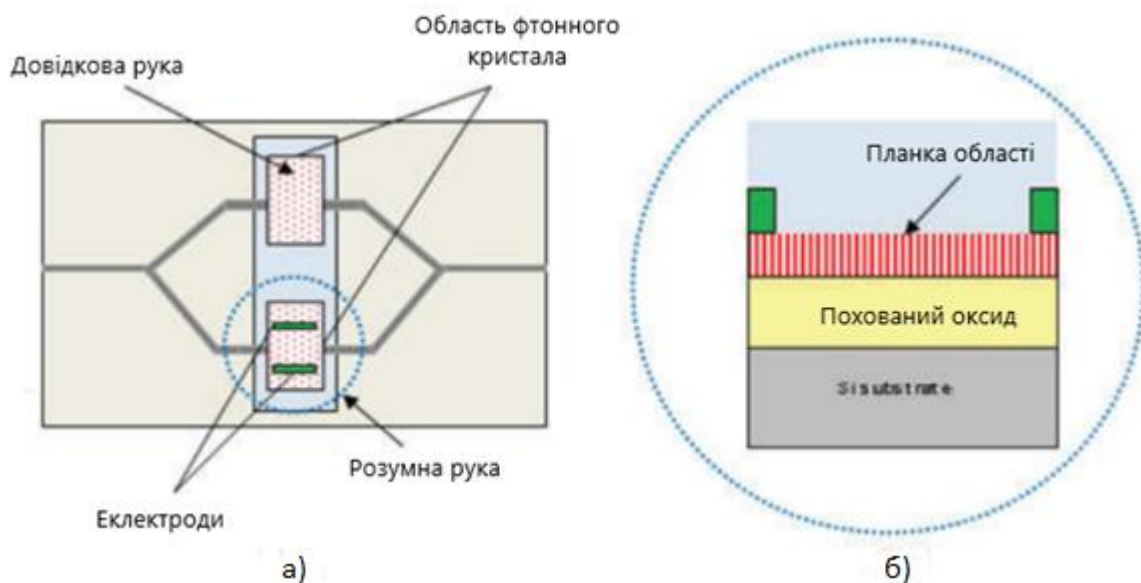
де Δn – зміна показника заломлення;

L – довжина хвилеводу;

λ – довжина хвилі.

Сенсор на основі інтерферометра Маха-Цендера з щілинним ФК хвилеводом представлений на рисунку 1.14 [13]. Датчик складається з ФК хвилеводів в активному та еталонному плечах, ребристих хвилеводів для входу та виходу сенсора, Y-подібних з'єднань, електродів та електродних майданчиків. Зокрема, ФК хвилеводи реалізуються шляхом видалення одного ряду повітряних отворів у кремнієвій пластині. Пристрій виготовлено на пластині КНІ, у якій товщина шару кремнієвої серцевини становить $t = 215$ нм, верхнім середовищем оболонки є повітря, а нижнім шаром є шар оксиду завтовшки 2 мкм. У кремнієвій пластині отвори розташовані шестикутними комірками з постійною ґратки $a = 400$ нм, що призводить до діаметра повітряного отвору $d = 0,53a$.

Для датчиків можна індукувати локалізовані зміни ПЗ, заповнюючи область хвилеводу газо- або рідкофазними аналітичними матеріалами.



- а) інтерферометр з фотонно-кристалічним хвилеводом;
 б) поперечний переріз.

Рисунок 1.14 – Сенсор на основі інтерферометра Маха-Цендера

Таким чином, інтенсивність вихідного сигналу може змінюватися завдяки ефекту сполучення статичної керуючої напруги, що підтримується через електроди на плечах датчиків і змін показника заломлення. Експериментальне порівняння доводить, що кремнієвий щілинний ФК хвилевід забезпечує 30-кратну ефективну зміну ПЗ порівняно зі звичайним кремнієвим щілинним хвилеводом.

1.3 Багатоканальний фотонно-кристалічний сенсор

Нещодавно було досліджено та запропоновано сенсор, який поєднує характеристики розподілу оптичної потужності багатомодового інтерференційного дільника потужності та резонансні характеристики передачі численних мікропорожнинних ФК масивів [14]. Пристрій, схематично зображений на рисунку 1.15, виготовлений на платформі КНІ і складається з оптичного розгалужувача потужності 1·4, який розділяє вхідне світло від гребінчастого хвилеводу на чотири вихідні канали. Розгалужувач має довжину та ширину 123 мкм та 16 мкм відповідно. Вхідний хвилевід має ширину 2,5 мкм, а виходи розділені на 1,5 мкм. ФК хвилеводи є лінійними дефектами з рівномірною постійною ґратки $a = 400$ нм і діаметром отворів $d = 0,54a$, які вбудовані в кремнієву пластину товщиною $t = 0,58a = 232$ нм.

На плечах №1-3 крайові повітряні отвори на осі мікропорожнини ФК зміщені назовні в горизонтальному напрямку на відстань, рівну $0,15a$. На плечі №4 дві мікропорожнини, розташовані на відстані 50 мкм, виконані як L13. У першому кромкові повітряні отвори зміщені всередину на $0,15a$, у другому мікропорожнині краєві повітряні отвори зміщені назовні на $0,15a$, що призводить до нульового перехресного перетину.

Кожна мікропорожнина вкрита різними рецепторними біомолекулами, кожна з яких реагує на свій специфічний кон'югат.

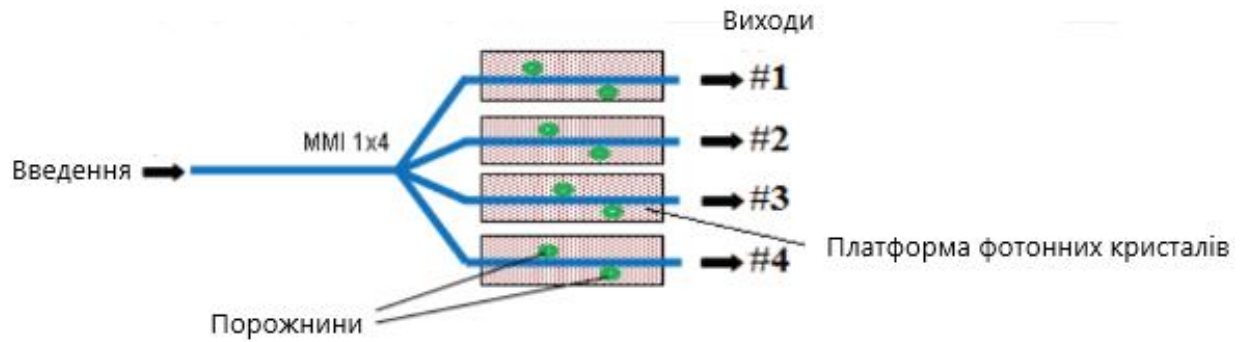


Рисунок 1.15 – Схема пристрою з розділенням каналів

Фактично, шляхом введення в чутливу область 60 мкл 600 нМ козячого антикролячого IgG Abs, розчинений у PBS, змінюється лише спектр пропускання плеча №2, демонструючи резонансний зсув довжини хвилі. Фактично, плече №2 надруковано специфічним кон'югатом кролячого антикозячого IgG Abs. Плече №4 працює аналогічно, тоді як будь-який зсув спостерігається в інших плечах, оскільки плечі №1 і №3 надруковані людським IL-10 Abs, а плече №4 у другій мікропорожнині покрито BS. Отже, шляхом зміни розчину зразка, тобто шляхом введення 60 мкл 600 нМ щурячого антитіла до людського IL-10 Abs, розчиненого в PBS, спостерігається лише один резонансний зсув довжини хвилі в плечі №1. Нарешті, датчик стійкий до змін навколишнього середовища та дозволяє багаторазове використання.

Додаткові можливості для покращення експлуатаційних характеристик фотонно-кристалічних сенсорів надає застосування метаматеріалів з незвичайними фізичними властивостями [15, 16]. Це дозволяє, з одного боку, покращити їх характеристики, а з другого – забезпечити додаткову мініатюризацію цих пристроїв.

2 МОДЕЛЮВАННЯ ФОТОННО-КРИСТАЛІЧНОГО БІОСЕНСОРА

Конструкція біосенсора на основі одновимірного фотонного кристалу для визначення різних типів бактерій, що переносяться водою, показана на рисунку 2.1. Варто зазначити, що дефектний шар розташовується між двома ідентичними бінарними фотонними кристалами PC_1 та PC_2 .

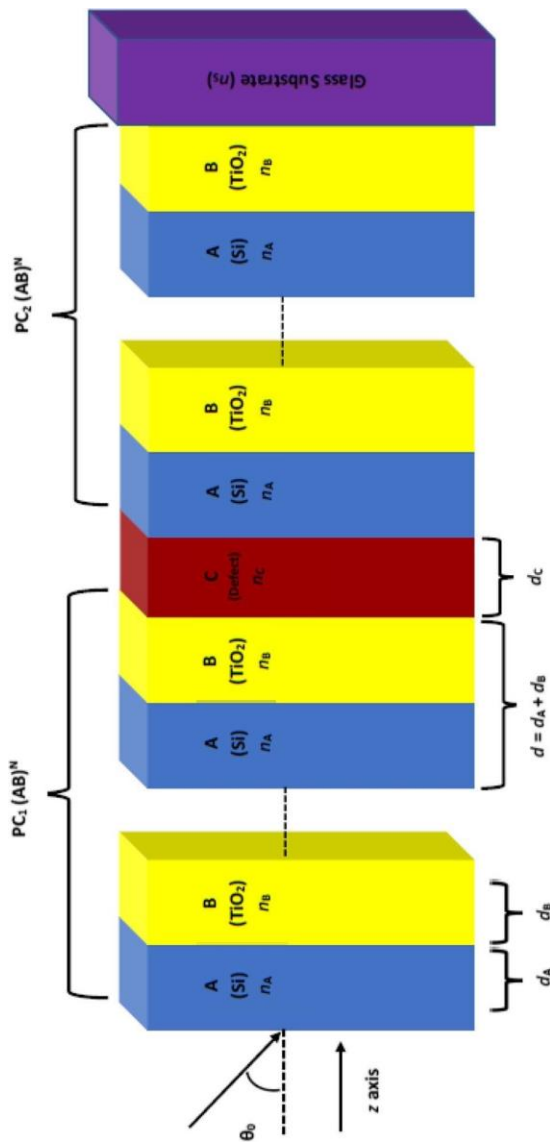


Рисунок 2.1 – Схематична конструкція запропонованого біосенсора

$$(AB)^N C (AB)^N$$

Для позначення періодичних шарів матеріалів використано позначення А, В, С та N. Це Si, TiO₂, повітря та кількість періодів структури відповідно. Тут n_A , n_B і n_C – це показники заломлення шарів Si, TiO₂ і повітря відповідно, а d_A , d_B і d_C – товщина відповідних шарів матеріалу. Кут падіння θ_0 відкладається по відношенню до осі z. Показник заломлення скляної підкладки становить n_S .

Структура сенсору утворена розташуванням РС₁, РС₂ і дефектного шару С у вигляді (AB)^NC(AB)^N. Товщини шарів Si, TiO₂ і повітря обрано такими: $d_A = 40$ нм, $d_B = 90$ нм, $d_C = 112$ нм. Показники заломлення матеріалів такі: $n_A = 3,5$; $n_B = 2,34$; $n_C = 1$.

Весь біосенсор виготовлено на скляній підкладці з ПЗ $n_S = 1,52$. Передбачається, що вся структура розташовується у повітрі. В якості джерела випромінювання використовується плоска хвиля, яка вводиться в одновимірний фотонно-кристалічний біосенсор під кутом падіння $\theta_0 = 0$ відносно осі z з боку повітря (див. рис. 2.1).

2.1 Основні розрахункові співвідношення

Пропускання електромагнітних хвиль через шари фотонно-кристалічного біосенсора розраховується за допомогою методу матриць перенесення (трансфер-матриць). Для шарів А, В і С матриця перенесення визначається наступним чином:

$$m_j = \left(\cos(\gamma_j) - \left(\frac{i}{p_j} \right) \cdot \sin(\gamma_j) - i \cdot p_j \cdot \sin(\gamma_j) \cos(\gamma_j) \right) \quad (2.1)$$

де $j = A, B$ або C .

У цьому рівнянні $p_j = z_0 n_j \cos \theta_j$ і $p_j = \frac{\cos \theta_j}{z_0 n_j}$ для ТЕ і ТМ поляризованих плоских електромагнітних хвиль відповідно. Тут також позначено:

$$\gamma_j = \frac{2\pi}{\lambda} n_j d_j \cos \theta_j$$

з позначеннями d_j , n_j і θ_j для товщини, показника заломлення і кута променя всередині j -го шару структури відповідно. z_0 позначає імпеданс вільного простору, а λ_0 – довжину хвилі у вільному просторі. Вищеописаний метод розширено для отримання повної матриці переносу для всієї фотонно-кристалічної біосенсорної структури у вигляді:

$$M_T = (M_A M_b)^N M_c (M_A M_b)^N = (M_{11} M_{12} M_{21} M_{22}) \quad (2.2)$$

де M_{11} , M_{12} , M_{21} і M_{22} – елементи результуючої передавальної матриці M_T . Коефіцієнт проходження фотонно-кристалічної структури задається формулою:

$$t = \frac{2\eta_0}{(M_{11} + M_{12}n_s)\eta_0 + (M_{21} + M_{22}\eta_s)}, \quad (2.3)$$

де η_0 і η_s – коефіцієнти, що характеризують середовища, які оточують досліджувану структуру.

Для ТЕ хвилі $\eta_0 = z_0 n_0 \cos\theta_0$ і $\eta_s = z_0 n_s \cos\theta_s$, тоді як для ТМ хвилі $\eta_0 = \frac{\cos\theta_0}{z_0 n_0}$ і $\eta_s = \frac{\cos\theta_s}{z_0 n_s}$.

Енергетичний коефіцієнт проходження аналізованого біосенсора може бути виражений як:

$$T = \frac{N_s}{N_0} |t| \quad (2.4)$$

2.2 Дослідження фотонно-кристалічного сенсору

Розглянемо спочатку два фотонні кристали, які складають структуру біосенсора. Обидва ці фотонні кристали складаються з шарів Si та TiO_2 , що чергуються. Кількість періодів структури складає $N = 10$. Показники заломлення та товщина шарів матеріалів Si та TiO_2 обох фотонних кристалів

приймаються рівними $n_A = 3,5$, $d_A = 40$ нм та $n_B = 2,34$, $d_B = 90$ нм відповідно у видимій та ближній інфрачервоній області електромагнітного спектру.

Обидва фотонні кристали з'єднані між собою дефектним шаром з повітря з показником заломлення $n_C = 1,0$ і товщиною $d_C = 112$ нм, який знаходиться в центрі досліджуваної структури.

Ця область використовується для дослідження різних зразків бактерій, що переносяться водою, і відома як область дефектного шару. Вся структура фотонного біосенсора була виготовлена на скляній підкладці з показником заломлення $n_S = 1,5$. За навколишнє середовище взято повітря з показником заломлення $n_0 = 1,0$.

Для ілюстрації роботи біосенсора спочатку замінимо повітря з області дефектного шару на зразок дистильованої води з показником заломлення $n_C = 1,333$. Спектри пропускання запропонованого біосенсора з дефектним шаром дистильованої води зображено на рисунку 2.2.

З рисунку видно, що фотонна заборонена зона простягається від 614,8 нм до 813,1 нм, що знаходиться між видимою та ближньою інфрачервоною областями електромагнітного спектру. Завдяки дефектному шару дистильованої води існує резонансна мода пропускання 97 % в середині фотонної забороненої зони на довжині хвилі 702,3 нм. Ця резонансна мода виникає через порушення трансляційної симетрії, що є аналогом домішкових мод у легovanому напівпровіднику.

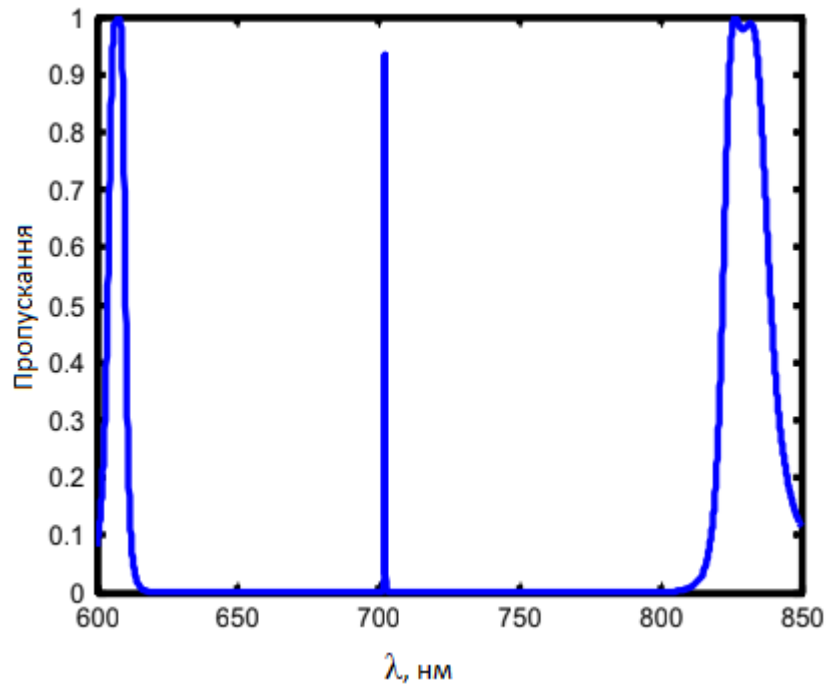


Рисунок 2.2 – Розраховані спектри пропускання одновимірного дефектного фотонного кристалу зі зразком дистильованої води та товщиною дефектної області $d_c = 112$ нм

В таблиці 2.1 наведені числові дані про показники заломлення різноманітних зразків води, як чистої дистильованої, так і забрудненої бактеріями.

Таблиця 2.1 – Різні зразки води та їхні показники заломлення

Порядковий номер зразка	Опис зразка	Показник заломлення
1	Дистильована вода	1,333
2	V. Cholera (холера)	1,365
3	E. Coli (кишкова паличка)	1,388
4	Sh. Flexneri	1,422
5	S. Flagellin	1,430

Відповідно до таблиці, замінюємо в сенсорній структурі розчин дистильованої води на забруднену воду, яка містить бактерії, що передаються через воду. Зокрема, холерний вібріон *Vibrio cholera*. Таблиця 2.1 ілюструє показник заломлення різних зразків води з бактеріями, що переносяться водою,

на додаток до дистильованої води в порядку зростання їхніх показників заломлення.

Забруднена бактеріями *Vibrio cholera* проба води викликає червоне зміщення (збільшення довжини хвилі) резонансного піку з 702,3 нм до 703,7 нм, як показано на рисунку 2.3 суцільною зеленою кривою. Цей червоний зсув зумовлений відносно вищим значенням показника заломлення ($n_C = 1,365$) забрудненої бактеріями холери води порівняно з дистильованою водою ($n_C = 1,333$). Подібні результати були отримані і для інших забруднених зразків води з різними бактеріями, що передаються через воду, відповідно до таблиці 2.1.

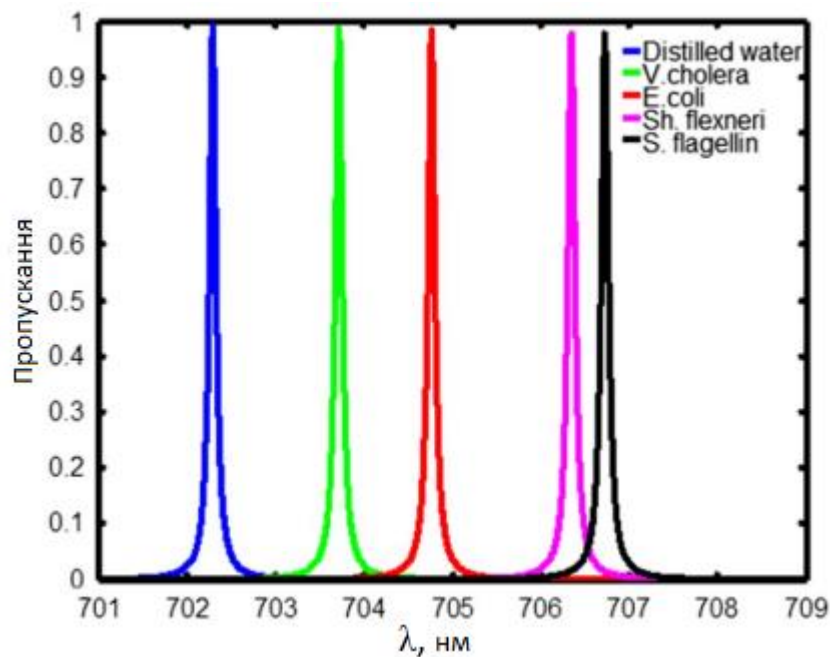


Рисунок 2.3 – Розраховані спектри пропускання одновимірному дефектного фотонного кристалу при нормальному падінні світла, що показують різні режими локалізації дефекту

На рисунку синім, зеленим, червоним, рожевим і чорним кольорами (суцільні криві) показані спектральні характеристики, що відповідають дистильованій воді, холері *V*, кишковій паличці *E. coli*, *Sh. Flexneri* та *S. Fagellin*. Тут товщина дефектної області становить $d_C = 112$ нм.

2.3 Характеристики фотонно-кристалічного сенсору

Якість та ефективність будь-якого біосенсора можна оцінити на основі його чутливості (S), показника якості (FOM), відношення сигнал/шум (SNR), які виражені нижче в рівняннях (2.5)–(2.7) відповідно:

$$S = \frac{\Delta\lambda}{\Delta n}, \quad (2.5)$$

де $\Delta\lambda$ – зсув довжини резонансної хвилі, пов'язаний з відповідною зміною показників заломлення різних чутливих середовищ:

$$FOM = \frac{S}{\Delta\lambda_{FWHM}}, \quad (2.6)$$

де $\Delta\lambda_{FWHM}$ – повна ширина на половині максимуму (FWHM) резонансного піку пропускання дефектної моди:

$$SNR = \frac{\Delta\lambda}{\Delta\lambda_{FWHM}}. \quad (2.7)$$

Числові значення всіх вищевказаних важливих параметрів запропонованого фотонно-кристалічного біосенсора, як визначено в рівняннях (2.5)–(2.7) підсумовуються в таблиці 2.2, що відповідає різним зразкам бактерій, що переносяться водою, які необхідно дослідити відповідно до таблиці 2.1.

2.4 Модифікація фотонно-кристалічного сенсору

Як бачимо з таблиці 2.2, чутливість запропонованого фотонно-кристалічного біосенсора для всіх зразків водних бактерій становить від 43,21 нм/RIU для зразка *V. Cholera* до 46,06 нм/RIU для *Sh. Flexneri*. Це

значення є низьким і його потрібно збільшити, щоб зробити біосенсор більш чутливим.

Таблиця 2.2 – Параметри оцінки ефективності фотонно-кристалічного біосенсора S , $\Delta\lambda_{FWHM}$, SNR та FOM для різних зразків води разом з їх показниками заломлення та резонансною довжиною хвилі (λ) дефектної моди

№	Зразок	Показник заломлення, RIU	λ_c	S , нм/RIU	$\Delta\lambda_{FWHM}$	SNR	FOM
1	Дистильована вода	1,333	702,3	–	0,0890	13,480	–
2	V. Cholera	1,365	703,7	43,21	0,0900	13,300	480,10
3	E. Coli	1,388	704,8	45,45	0,0907	13,230	501,10
4	Sh. Flexneri	1,422	706,4	46,06	0,0924	12,987	498,48
5	S. Flagellin	1,430	607,7	45,50	0,0920	13,043	493,47

Для цього збільшимо товщину області дефектного шару від 112 нм до 200 нм та заповнимо його розчином кишкової палички E. Coli як зразка водних бактерій. Це збільшення товщини області дефектного шару із зразком бактерії E. Coli викликає більш виражений зсув резонансного піку пропускання в бік вищої довжини хвилі, як видно на рисунку 2.4.

На рисунку різні режими локалізації дефектної моди фотонно-кристалічного резонатору показані різними кольорами. Синім, зеленим, червоним, рожевим та чорним позначені суцільні криві, що відповідають дистильованій воді, V. Cholera, E. Coli, Sh. Flexneri та S. Flagellin відповідно. Тут товщина області дефектів становить $d_c = 200$ нм.

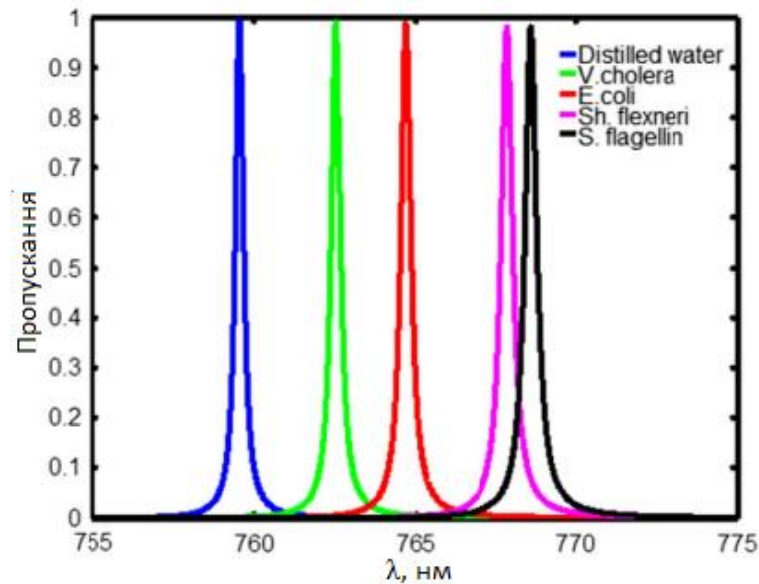


Рисунок 2.4 – Розраховані спектри пропускання одновимірного дефектного фотонного кристалу при нормальному падінні світла

З рисунків 2.3 та 2.4 видно, що при збільшенні товщини дефектного шару області з *E. Coli* від 112 нм до 200 нм положення центральної довжини хвилі резонансного пропускання зміщується з 704,6 нм до 764,9 нм.

Крім того, це збільшує чутливість фотонного біосенсора з 45,45 нм/RIU до 92,60 нм/RIU (табл. 2.3). Наведені вище спостереження були повторені для різної товщини дефектного шару, яка варіюється від 112 нм до 1500 нм з *E. Coli* в області дефектного шару. Всі ці результати були зведені в таблицю 2.3. Вона дає інформацію про збільшення чутливості біосенсора в залежності від товщини шару дефектів у зразку *E. Coli*.

Таблиця 2.3 – Різні значення чутливості, розраховані при різній товщині дефектного шару, що відповідає нормальному ураженню *E. Coli* водою–бактеріальний зразок

Номер зразка	Товщина дефектного шару d_c , нм)	S , нм/RIU
1	112	45,45
2	200	92,60
3	500	178,18
4	1000	274,50
5	1500	329,09

Графічне представлення даних, наведених у таблиці 2.3, наведено на рисунку 2.5. Як з таблиці 2.3, так і з рисунку 2.5 видно, що чутливість біосенсора значно зростає до 329,09 нм/RIU, що відповідає товщині дефектного шару $d_c = 1500$ нм. Ця характеристика може бути інтерпольована за допомогою наступного виразу: $S = 51,567 + 0,19986 \times d_c$ при $R=0,97727$, де R – коефіцієнт кореляції між лінійною кривою та змодельованими даними.

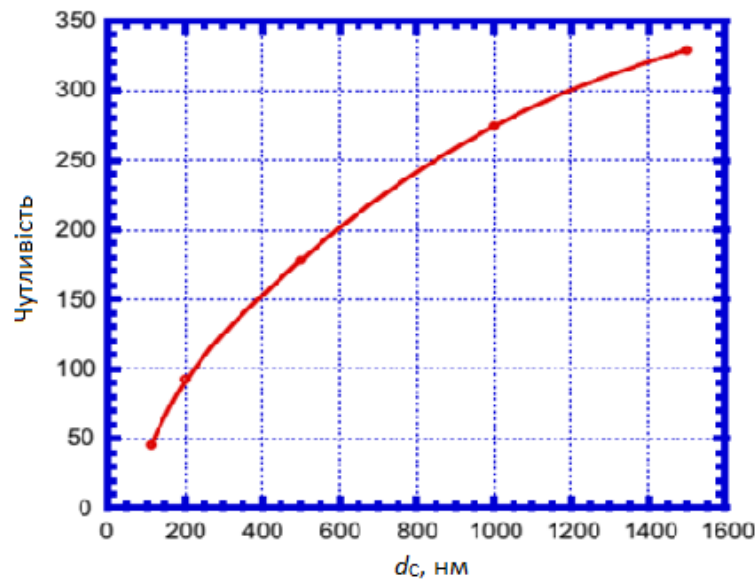


Рисунок 2.5 – Графік чутливості фотонно-кристалічного біосенсора, розрахований для різних значень товщини шару дефектів на зразку водних бактерій *E. Coli* при нормальній інтенсивності випромінювання

Отже, виходячи з вищевикладеного, оптимальною товщиною дефектного шару вважається 1500 нм для досягнення найвищої чутливості для всіх зразків бактерій, що переносяться водою, як зазначено в табл. 2.1.

На рисунку 2.6 наведено графік відгуку біосенсора, завантаженого всіма п'ятьма зразками по черзі, при $d_c = 1500$ нм.

Порівняння рисунків 2.3 та 2.6 показує, що завдяки оптимальній товщині дефектного шару $d_c = 1500$ нм, область фотонної забороненої зони зміщується з 701 нм до 709 нм (див. рис. 2.3) та з 720 нм до 760 нм (рис. 2.6). Резонансні піки пропускання, що відповідають кожному зразку, також зміщуються в бік більшої

довжини хвилі через відповідне зміщення області фотонної забороненої зони. Це є причиною значного підвищення чутливості біосенсора.

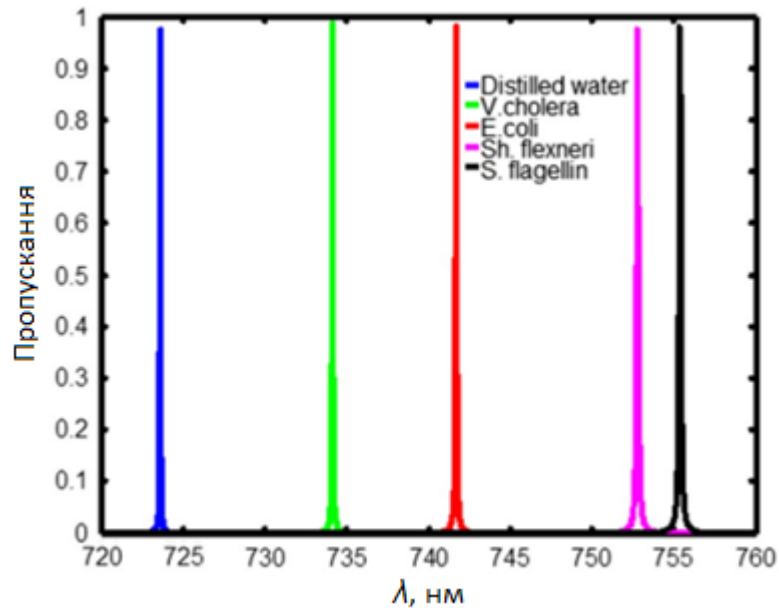


Рисунок 2.6 – Розраховані спектри пропускання одновимірного дефектного фотонного кристалу при нормальному падінні світла (товщина дефектної області становить $d_C = 1500$ нм)

Крім того, фактор якості (добротність), який визначає точність вимірювань біосенсора, також є одним з важливих параметрів, що дозволяє судити про ефективність біологічного сенсора. При розробці будь-якого біологічного сенсора завжди очікується високе значення добротності. Добротність визначається як відношення центральної довжини хвилі (λ_C) до повної ширини напів максимуму (FWHM) резонансного піку передачі ($\Delta\lambda_{FWHM}$):

$$Q = \frac{\lambda_C}{\Delta\lambda_{FWHM}}. \quad (2.8)$$

Крім того, оптимальна товщина дефектного шару також зменшує значення ширини резонансного піку пропускання всередині фотонної

забороненої зони, що відповідає кожному зразку. Це покращує добротність Q і, отже, точність біосенсора.

Далі проілюструємо залежність положення піку коефіцієнту проходження для дефектної моди, що відповідає різним зразкам бактерій, які переносяться водою, розташованими в дефектному шарі, відповідно до формулювання умови реалізації стоячої хвилі:

$$L = m\lambda_0 = n_{eff}g, \quad (2.9)$$

де символи L і λ_0 використовуються для позначення оптичної різниці ходу між стоячими хвилями в області дефектного шару і довжиною хвилі падаючого світла у вільному просторі відповідно, тоді як літери m , n_{eff} і g використовуються для цілого числа, ефективного показника заломлення всієї структури і геометричної різниці ходу відповідно.

Будь-яке збільшення показника заломлення дефектного шару, що містить різні зразки бактерій, які переносяться водою, відповідно до таблиці 2.1, призводить до зміни резонансного стану стоячих хвиль в області порожнини (дефектного шару). Ця зміна стоячих хвиль повинна бути компенсована зміщенням резонансних піків пропускання в область більших довжин хвиль, щоб зберегти значення оптичного шляху.

Цей механізм відповідає за появу резонансного піку пропускання всередині забороненої зони через сильну взаємодію між падаючим світлом і різними зразками бактерій, що переносяться водою, сконцентрованими в області дефектного шару. Також для позначення такого режиму роботи фотонно-кристалічної структури використовується термін «дефектна мода», який позначає, що виникнення піку пропускання в межах фотонної забороненої зони обумовлено саме наявністю дефекту періодичності структури.

2.5 Вплив падаючого світла на характеристики біосенсора

У цьому підрозділі ми досліджуємо вплив кута падіння світла на коефіцієнт пропускання дефектної моди і чутливість фотонно-кристалічного біосенсора. Спектри пропускання в залежності від довжини хвилі у вільному просторі при куті падіння $\theta_0=25^\circ$ зображено на рисунку 2.7.

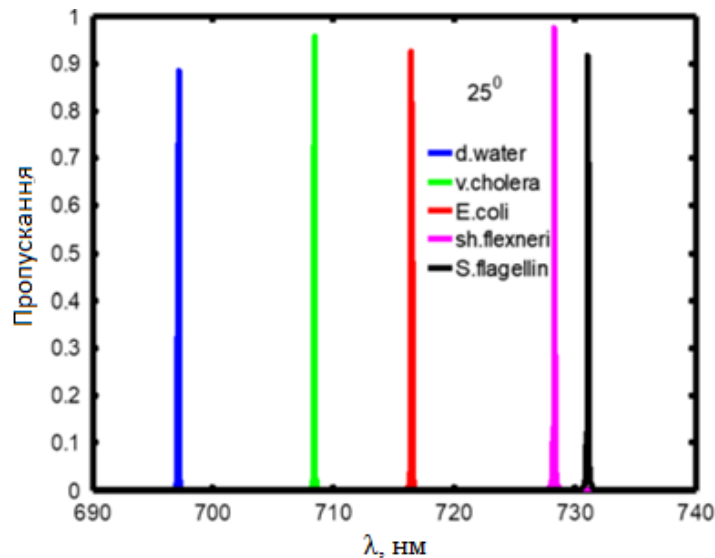


Рисунок 2.7 – Розраховані спектри пропускання одновимірному дефектного фотонного кристалу при косому падінні світла ($\theta_0 = 25^\circ$)

Порівняння рисунків 2.3 та 2.7 показує, що при зміні кута падіння від $\theta_0=0^\circ$ до $\theta_0=25^\circ$, резонансний пік пропускання дефектних мод для всіх п'яти зразків зміщується в бік меншої довжини хвилі (синій зсув) через зміну довжини оптичного шляху світла в області порожнини. Наприклад, на рисунку 2.7 показано, що резонансний пік пропускання для зразка дистильованої води змістився до 697,2 нм при $\theta_0=25^\circ$ з 723,5 нм при $\theta_0=0^\circ$ (див. рис. 2.3). Положення резонансних піків пропускання розчину дистильованої води становить 685,9 нм, 673,6 нм, 643,8 нм і 595,3 нм при кутах падіння $\theta_0=30^\circ$, 35° , 45° і 60° відповідно. Чутливість біосенсора змінюється зі збільшенням кута падіння, як показано в таблиці 2.4. З неї видно, що різні значення чутливості біосенсора в

залежності від кута падіння θ_0 змінюються від 0° до 60° , що відповідає товщині дефектного шару $d_C=1500$ нм.

Таблиця 2.4 – Різні значення чутливості, розраховані при різних кутах падіння світла, що відповідають $d_C = 1500$ нм, для зразка бактерій, що переносяться водним шляхом, *E. Coli*

№	Кут падіння θ_0 , градуси	S , нм/RIU
1	0°	329,09
2	10°	330,90
3	15°	336,40
4	25°	350,00
5	30°	373,60
6	35°	376,40
7	45°	414,50
8	50°	438,20
9	60°	483,60

З таблиці 2.4 також видно, що чутливість може бути додатково збільшена до 483,6 нм/RIU при $\theta_0=60^\circ$ з 329,09 нм/RIU при $\theta_0=0^\circ$. Тепер до даних, наведених у таблиці 2.4, було застосовано процедуру інтерполяції, результати якої показано на рисунку 2.8 і отримано вираз $S = 303,17 + 0,26080 \times \theta_0$ при $R=0,95436$, де R – коефіцієнт кореляції між даними інтерполяційної кривої та даними чисельного розрахунку.

На рисунку 2.8 побудовано графік залежності чутливості запропонованого біосенсора зі зразком *E. Coli* при $d_C = 1500$ нм від кута падіння випромінювання за допомогою таблиці 2.4. З рисунку добре видно, що чутливість повільно зростає до $\theta_0 = 37^\circ$, потім вона практично лінійно збільшується і досягає свого максимального значення 483,6 нм/RIU при $\theta_0 = 60^\circ$. Це дуже велике значення порівняно з результатами, наведеними в літературі [17, 18].

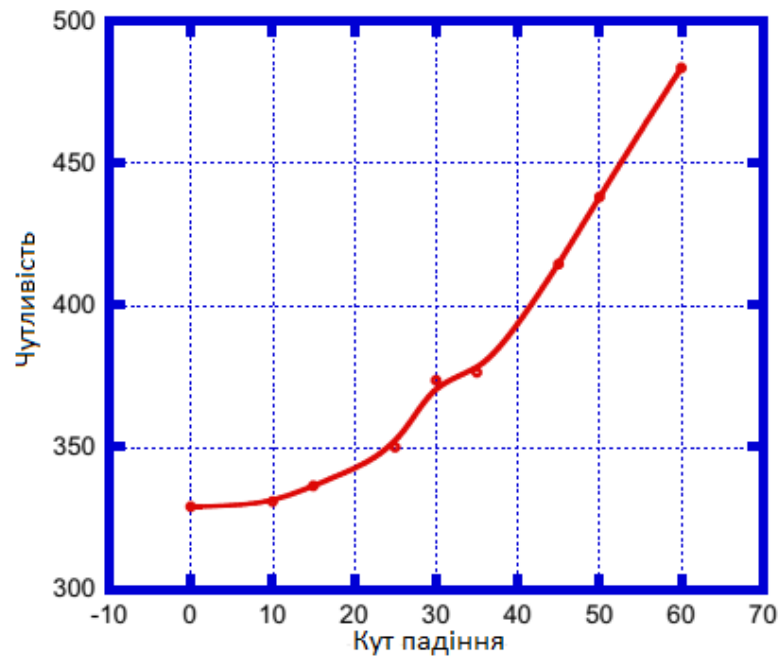


Рисунок 2.8 – Графік, що показує чутливість фотонно-кристалічного біосенсора, розраховану при різних кутах падіння світла на зразок бактерій, що переносяться водою, *E. Coli* при $d_C = 1500$ нм

Ефективність фотонно-кристалічного біосенсора для всіх п'яти зразків (перелічених у таблиці 2.1) було проаналізовано на основі п'яти важливих параметрів, які визначаються в рівняннях (2.5)–(2.9). Числові значення цих параметрів наведено в таблиці 2.5, з якої видно, що значення добротності фотонно-кристалічного біосенсора для всіх п'яти зразків має порядок 10^4 . Це означає, що чутливість досліджуваного біосенсора є дуже високою.

Таблиця 2.5 – Експлуатаційні параметри фотонно-кристалічного сенсору для різних зразків

№	Зразок	Показник заломлення	λ_C , нм	Чутливість S, нм/RIU)	$\Delta\lambda_{FWHM}$	Показник якості ($\times 10^4$)	Добротність ($\times 10^4$)
1	Дистильована вода	1,333	595,7	–	0,04	–	1,4
2	<i>V. Cholera</i>	1,365	611,3	481	0,0155	3,1	3,9
3	<i>E. Coli</i>	1,388	622,3	483	0,0155	3,1	4,0
4	<i>Sh. Flexneri</i>	1,422	638,1	476	0,0125	3,8	5,1
5	<i>S. Flagellin</i>	1,43	641,7	474	0,0125	3,7	5,1

Таким чином, він може точно виявляти бактерії, що присутні у зразку води. Крім того, FOM розглянутого біосенсора також висока і становить близько 10^4 . Високе значення FOM робить розглянуту сенсорну систему придатною для біосенсорних медичних та інженерних застосувань.

Нарешті, межа виявлення (LOD), яка визначає здатність розпізнавати дуже незначні зміни показника заломлення зразка внаслідок забруднення, також була розрахована для фотонно-кристалічного біосенсора. На основі чисельного моделювання, LOD структури становить порядку 10^{-6} RIU, що є дуже низьким. Для будь-якого біосенсора завжди очікується низьке значення LOD.

Це свідчить про те, що розглянутий фотонно-кристалічний біосенсор є дуже чутливим і здатним виявляти найдрібніші зміни показника заломлення досліджуваного зразка. Слід відзначити, що сенсорні системи на основі одновимірних фотонних кристалів можуть також використовуватися в інших галузях сучасної сенсоріки, де потребується висока чутливість пристроїв до зміни контрольованих параметрів [19].

ВИСНОВКИ

В кваліфікаційній роботі зроблено аналітичний огляд науково-технічної літератури з питань, пов'язаних із принципом дії, побудовою та застосуванням різноманітних фотонно-кристалічних сенсорних пристроїв, в тому числі біологічних.

Побудована фізична модель біологічного сенсору на основі одновимірного фотонного кристалу. Для розгляду обрана стандартна конфігурація фотонно-кристалічного сенсору, в якій досліджуваний аналіт розташовується в спеціальному шарі фотонного кристалу, який зазвичай називається «дефектним». Таким чином формується резонансна структура з доволі високими значеннями добротності.

Для розрахунку експлуатаційних характеристик фотонно-кристалічного сенсора розроблено розрахунковий проєкт на основі застосування добре апробованого для подібних структур матричного методу.

Проведені розрахунки спектральних характеристик фотонно-кристалічного сенсору, тобто залежностей коефіцієнту проходження хвилі через багат шарову структуру від довжини хвилі випромінювання.

Досліджено вплив геометричних розмірів дефектного шару фотонно-кристалічної структури на чутливість сенсорної системи, що дозволяє розробити рекомендації щодо шляхів модифікації конструкції таких сенсорних пристроїв з метою поліпшення їх експлуатаційних характеристик.

ПЕРЕЛІК ДЖЕРЕЛ ПОСИЛАННЯ

1. Lin H., Yi Z., Hu J. Double resonance 1-D photonic crystal cavities for single molecule mid-infrared photothermal spectroscopy: theory and design // *Optics Letters*. 2012. Vol. 37, No 8. P. 1304–1306.
2. Liu Y., Salemink H.W.M. Photonic crystal-based all-optical on-chip sensor // *Optics Express*. 2012. Vol. 20, No 18. P. 19912–19920.
3. Jágorská J., Zhang H., Diao Z., Le Thomas N., Houdré R. Refractive index sensing with an air-slot photonic crystal nanocavity // *Optics Letters*. 2010. Vol. 35, No 15. P. 2523–2525.
4. Robinson S., Nakkeeran R. Photonic Crystal based sensor for sensing the salinity of seawater: IEEE International Conference On Advances In Engineering, Science and Management (ICAESM). (March 2012). P. 495–499.
5. Junhua L., Qiang K., Chunxia W., Baoqing S., et al. Design of a photonic crystal microcavity for biosensing // *Journal of Semiconductors*. 2011. art. 034008. Vol. 32, No 3.
6. Yang D., Tian H., Ji Y. Nanoscale photonic crystal sensor arrays on monolithic substrates using side-coupled resonant cavity arrays // *Optics Express*. 2011. Vol. 19, No 21. P. 20023–20034.
7. Mandal S., Goddard J.M., Erickson D. A multiplexed optofluidic biomolecular sensor for low mass detection // *Lab on a Chip*. July. 2009. Vol. 9, No 20. P. 2924–2932.
8. Mandal S., Erickson D. Nanoscale optofluidic sensor array // *Optical Express*. 2008. Vol. 16, No 3. P. 1623–1631.
9. Lee M., Miller B.L., Fauchet P.M. Two-dimensional photonic crystal microcavity sensor for single particle detection. *Lasers and Electro-Optics: 2008 and 2008 Conference on Quantum Electronics and Laser Science*. (May 2008). P. 1–2.
10. García-Rupérez J., Toccafondo V., Bañuls M.J., Griol A. et al. Single strand DNA hybridization sensing using photonic crystal waveguide based sensor:

7th IEEE International Conference on Group IV Photonics (September 2010). P. 180–182.

11. Bougriou F., Bouchemat T., Bouchemat M., Paraire N. High sensitivity of sensors based on two-dimensional photonic crystal: Electronics, Communications and Photonics Conference (SIEPCPC), 2011 Saudi International. (April 2011). P. 1–4.

12. Awad H., Hasan I., Mnaymneh K., Hall T.J., Andonovic I. Gas sensing using slow light in photonic crystal waveguide: 7th Workshop on Fibre and Optical Passive Components (WFOPC). (July 2011) P. 1–3.

13. Chen X., Chen R.T. Sensitivity-enhanced silicon slot photonic crystal waveguides: 5th IEEE International Conference on Group IV Photonics. (September 2008). P. 395–397.

14. Zou Y., Chakravarty S., Lai W.-C., Lin C.-Y., Chen, R.T. Methods to array photonic crystal microcavities for high throughput high sensitivity biosensing on a silicon-chip based platform // Lab Chip. 2012. Vol 12, No 13. P. 2309–2312.

15. Aly A. H., Ameen A. A., Mahmoud M. A., Matar Z. S. et al. Photonic Crystal Enhanced by Metamaterial for Measuring Electric Permittivity in GHz Range // Photonics 2021. Vol 8, No 10. P. 416.

16. Shmat'ko A.A., Kazanko A.V., Mizernik V.N., Odarenko E.N. Surface Plasmon Polariton Resonances of Diffraction Metamaterial Grating: 9th International Conference on Ultrawideband and Ultrashort Impulse Signals. 2018. September 4–7. Odessa. Ukraine. P. 190–193.

17. Ramanujam, N.R., Amiri, I.S., Taya, S.A. et al. (2019). Enhanced sensitivity of cancer cell using one dimensional nano composite material coated photonic crystal // Microsyst Technol. 2019. Vol. 25, P. 189–196.

18. Zadeh F.R, Kaatuzian H., Danaie M. (2019). Hybrid photonic crystal cavity as a sensitivelabel-free biosensor. 27th Iranian Conference on Electrical Engineering(ICEE).2019. P. 18–22.

19. Shmat'ko A. A., Odarenko E. N., Vertiy A. A. Sensor-Polarimeter Based on Anisotropic Photonic Crystal for Solids and Liquids. 2020 IEEE Ukrainian Microwave Week Kharkiv, Ukraine, September 21-25. P. 897–901.