

Харківський національний університет радіоелектроніки

Навчально-науковий інститут лазерної та біомедичної інженерії

Кафедра Фізичних основ електронної техніки

Рівень вищої освіти перший (бакалаврський)

Спеціальність 175 Інформаційно-вимірювальні технології

(код і повна назва)

Тип програми освітньо-професійна

Освітня програма «Інженерія оптоінформаційних та лазерних систем»

(повна назва)

ЗАТВЕРДЖУЮ:

Зав. кафедри

(підпис)

«___» 20__ р.

ЗАВДАННЯ

НА КВАЛІФІКАЦІЙНУ РОБОТУ

здобувачеві Гаврюшенку Сергію Олеговичу

(прізвище, ім'я, по батькові)

1. Тема роботи Фотонно-кристалічний сенсор для детектування ракових клітин

затверджена наказом університету від «25» травня 2026 р. № 419 Ст

2. Термін подання здобувачем роботи до екзаменаційної комісії 24 червня 2026 р.

3. Вихідні дані до роботи основні фізичні властивості одновимірних фотонних кристалів та резонансних структур на їх основі; конфігурації Бреґґівських резонаторів, що використовуються в біосенсоріці; матричний метод для розрахунку характеристик фотонно-кристалічних сенсорних структур.

4. Перелік питань, що потрібно опрацювати в роботі

1 Основні поняття про одновимірні періодичні структури.

2 Фотонні кристали та сенсорні пристрої на їх основі.

3 Переваги застосування фотонно-кристалічних структур в біологічних сенсорах.

4 Розрахункова модель фотонно-кристалічного сенсора.

5 Розрахунок спектральних характеристик Бреґґівського резонатора з різним заповненням та параметрами дефектного шару.

5. Перелік графічного матеріалу із зазначенням креслеників, схем, плакатів, комп'ютерних ілюстрацій _____
Демонстраційний матеріал – 12 слайдів. _____

КАЛЕНДАРНИЙ ПЛАН

№	Назва етапів роботи	Терміни виконання етапів роботи	Примітка
1	Інформаційно-тематичний пошук та огляд літературних джерел про фотонно-кристалічні біологічні сенсори	09.02.26–11.03.26	Виконано
2	Розроблення розрахункового проєкту на основі матричного методу для визначення спектральних характеристик сенсорної структури	20.03.26–15.04.26	Виконано
3	Виконання чисельних розрахунків характеристик фотонно-кристалічного сенсору	06.05.26–17.05.26	Виконано
4	Аналіз результатів розрахунків	19.05.26–23.05.26	Виконано
5	Оформлення пояснювальної записки	27.05.26–07.06.26	Виконано
6	Оформлення демонстраційних матеріалів	08.06.26–11.06.26	Виконано
7	Проходження нормоконтролю та перевірки на академічний плагіат	12.06.26–18.06.26	Виконано
8	Отримання відгуку та рецензії	21.06.26–22.06.26	Виконано
9	Підготовка та захист кваліфікаційної роботи	23.06.26–25.06.26	Виконано

Дата видачі завдання 09 лютого 2026 р.

Здобувач _____
(підпис)

Керівник роботи _____ проф. каф. ФОЕТ Євген ОДАРЕНКО _____
(підпис) (посада, власне ім'я, прізвище)

РЕФЕРАТ

Пояснювальна записка кваліфікаційної роботи: 52 с., 25 рис., 1 додаток, 20 джерел.

МАТРИЧНИЙ МЕТОД, ОДНОВИМІРНИЙ ФОТОННИЙ КРИСТАЛ,
СПЕКТРАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА, ФОТОННА ЗАБОРОНЕНА ЗОНА,
ФОТОННО-КРИСТАЛІЧНИЙ СЕНСОР.,

Об'єкт дослідження – фотонно-кристалічні сенсорні пристрої для точного визначення матеріальних параметрів аналітів.

Мета роботи – визначення спектральних характеристик Бреггівської резонансної структури, яка застосовується для побудови біосенсора та його експлуатаційних характеристик.

Методи дослідження – чисельно-аналітичні за допомогою матричного методу.

Проведене ознайомлення з методами розрахунку та моделювання одновимірних періодичних структур. Проведено чисельні розрахунки спектральних характеристик фотонно-кристалічного біосенсора, які дозволяють визначити його експлуатаційні характеристики. Визначено закономірності впливу параметрів електродинамічної системи біосенсора на його основні характеристики.

ABSTRACT

Explanatory note of the qualification work: 52 p., 25 figs, 1 appendix, 20 sources.

MATRIX METHOD, ONE-DIMENSIONAL PHOTONIC CRYSTAL,
PHOTONIC GAP, PHOTONIC CRYSTAL SENSOR, SPECTRAL
CHARACTERISTICS.

The object of the study is photonic crystal sensor devices for accurate determination of material parameters of analytes.

The purpose of the work is to determine the spectral characteristics of the Bragg resonance structure, which is used to build a biosensor and its operational characteristics.

Research methods are numerical-analytical using the matrix method.

The methods of calculation and modeling of one-dimensional periodic structures are introduced. Numerical calculations of the spectral characteristics of the photonic crystal biosensor are performed, which allow determining its operational characteristics. The patterns of influence of the parameters of the electrodynamic system of the biosensor on its main characteristics are determined.

ЗМІСТ

Вступ	7
1 Біосенсори на основі фотонно-кристалічних структур	8
1.1 Фотонні кристали	10
1.2 Фотонно-кристалічні біосенсори.....	11
1.2.1 Одновимірні фотонно-кристалічні біосенсори	12
1.2.2 Біосенсор для визначення характеристик крові.....	23
2 Моделювання сенсора на основі одновимірного фотонного кристалу	28
2.1 Теоретична модель багатошарової періодичної структури	30
2.2 Аналіз результатів розрахунків	36
2.2.1 Виявлення ракових клітин	36
2.2.2 Вплив зміни кута падіння.....	39
2.3 Вплив кількості періодів на характеристики сенсора	42
2.4 Вплив зміни товщини дефектного шару на характеристики сенсора	44
Висновки.....	49
Перелік джерел посилання	50
Додаток А Демонстраційний матеріал.....	53

ВСТУП

Біосенсиори, що використовують одновимірні фотонні кристали, зараз широко застосовуються для виявлення біомолекулярних взаємодій з високою чутливістю. Ці структури використовують явище фотонної забороненої зони, при якому певні довжини хвиль світла або відбиваються, або пропускаються, що призводить до високочутливих оптичних реакцій на зміни навколишнього середовища, спричинені взаємодією аналіту з електромагнітним полем. Типові конструкції сучасних фотонно-кристалічних сенсорів дозволяють здійснювати моніторинг у режимі реального часу та виявляти біологічні молекули, такі як білки, нуклеїнові кислоти та патогени, без втручання в структуру біологічних об'єктів. Коли показник заломлення аналіту змінюється, то це викликає відповідну зміну резонансних характеристик структури і спричиняє зсув високодобротних резонансних піків пропускання в забороненій зоні. Це явище дозволяє проводити кількісний аналіз характеристик резонатора з високою точністю. Крім того, потенціал мініатюризації таких сенсорів полегшує їх інтеграцію в портативні діагностичні пристрої, просуваючи медичну діагностику в місцях надання медичної допомоги та моніторинг навколишнього середовища.

В даній кваліфікаційній роботі розглядається одна зі схем біосенсора на основі одновимірного фотонного кристалу та проводиться розрахунок та аналіз основних експлуатаційних характеристик цього пристрою.

1 БІОСЕНСОРИ НА ОСНОВІ ФОТОННО-КРИСТАЛІЧНИХ СТРУКТУР

Фотонно-кристалічні біосенсиори – це пристрої, які використовують унікальні оптичні властивості фотонних кристалів для виявлення та аналізу біологічних речовин. Ці біосенсиори бувають різних форм, включаючи одновимірні структури, двовимірні структури та конфігурації на основі волокон. Кожен тип пропонує певні переваги та застосування в галузі біосенсорики. Біосенсиори, що використовують технологію одновимірних фотонних кристалів, використовують регулярно розташовані структури, які змінюються в одному просторовому вимірі. Ці структури зазвичай складаються з шарів з різними показниками заломлення, створюючи заборонену зону, яка спеціально дозволяє пропускати певні довжини хвилі світла. У застосуваннях біосенсорики включення біологічної речовини в регулярну структуру призводить до змін оптичних характеристик, таких як зміщення забороненої зони або резонансної довжини хвилі. Ці варіації можуть бути пов'язані з існуванням або концентрацією певних біологічних аналітів. Біосенсиори, що використовують технологію одновимірних фотонних кристалів, використовуються для ідентифікації біомолекул, таких як ДНК, білки та інші біохімічні сполуки без міток. Їхня нескладна конструкція та просте виготовлення роблять їх добре придатними для різноманітних цілей сенсорного дослідження. Біосенсиори на основі двовимірних фотонних кристалів розширюють цю концепцію до структур, що демонструють періодичність у двох вимірах. Ці структури зазвичай включають ґратчасту структуру з повітряних отворів або діелектричних матеріалів, створюючи планарний масив з відмінними оптичними властивостями. Подібно до своїх одновимірних аналогів, двовимірні фотонно-кристалічні біосенсиори використовують модифікації у фотонній зонній структурі, викликані введенням біологічних речовин. Ці зміни можна ідентифікувати, спостерігаючи зсув резонансних частот або варіації спектрів пропускання та відбиття.

Фотоннокристалічні волокна – це оптичні волокна, що мають періодичну мікроструктуру, яка надає їм відмінних світлопровідних характеристик. Біосенсори на основі фотонно-кристалічних волокон використовують ці властивості для досягнення чутливого та селективного виявлення біологічних речовин. Біосенсори, що використовують фотонно-кристалічні волокна, часто інтегрують рецепторну область, призначену для певних біомолекул. Зміни показника заломлення ядра, що виникають внаслідок подій зв'язування, призводять до помітних зсувів у керованих модах або резонансах волокон [1, 2].

Кров, життєво важлива сполучна тканина, складається з плазми та різних типів клітин і циркулює по венах в організмі людини. Вона становить приблизно 7–8 % від загальної маси тіла, із середнім об'ємом від 5 л до 6 л у дорослих. Основна роль крові полягає в транспортуванні кисню, поживних речовин та виведенні продуктів життєдіяльності по всьому організму. Регульовані серцем, вени служать шляхами для кровообігу. Незважаючи на свою рідку природу, кров вважається тканиною через спеціалізовані клітини, суспендовані в плазмі. Загальний аналіз крові може діагностувати захворювання, досліджуючи різні фізіологічні параметри. Еритроцити переносять кисень за допомогою гемоглобіну, тоді як лейкоцити захищають від певних загроз. Анемію виявляють за низьким рівнем гемоглобіну, гематокриту або кількості еритроцитів. Загалом, кров відіграє вирішальну роль у підтримці фізіологічного балансу та діагностиці різних станів здоров'я [3, 4].

Білі кров'яні тільця, також відомі як лейкоцити, становлять лише 1 % об'єму крові, проте вони мають значний вплив. Ці клітини, що походять з кісткової тканини, відіграють вирішальну роль у контролі захворювань та знищенні бактерій. Білі кров'яні тільця, зокрема короткоживучі нейтрофіли (з тривалістю життя менше доби), що знаходяться як у крові, так і в лімфатичних тканинах, постійно виробляються кістковим мозком. Показник заломлення лейкоцитів знаходиться в діапазоні від 1,43 до 1,46 [5]. Еритроцити також є переважним типом клітин крові. Вони відіграють фундаментальну роль у транспортуванні кисню до тканин

організму через кровообіг у кровоносній системі. Середній показник заломлення еритроцитів зазвичай знаходиться в діапазоні від 1,370 до 1,420 [6]. Гемоглобін, білок, що міститься в еритроцитах, відіграє життєво важливу роль у транспортуванні кисню до органів і тканин організму та сприянні видаленню вуглекислого газу з цих органів і тканин, транспортуючи його назад до легень.

Аморфний перфторований полімер Cytop особливо добре підходить для застосування в інтегрований біофотоніці. Cytop має показник заломлення 1,34 і може розчинятися у фторованих розчинниках. Він адаптується до різних методів формування, таких як екструзія або лиття під тиском, і може бути перетворений на тонкі плівки (кілька мікрометрів або менше) за допомогою таких методів, як нанесення покриття методом центрифугування або занурення [7].

1.1 Фотонні кристали

Наразі спостерігається швидкий та суттєвий прогрес у виробництві та розробці мікрооптики та фотонних схем. Ця тенденція триває вже досить тривалий час, значною мірою замінюючи обробку електричних даних в оптичній обробній промисловості. Фотонні кристали, що характеризуються періодичною зміною показника заломлення, були створені з використанням парних напівпровідникових кристалів для впливу на потік фотонів. Здатність фотонних кристалів до роботи базується на внутрішніх змінах показника заломлення в цих структурах. У той час як інші структури, пов'язані зі світлом, демонструють певний рівень оптичного обмеження, фотонні кристали демонструють вищий ступінь візуального обмеження, що рівномірно поширюється по всій структурі. Зустрічаючи діелектричну речовину в чергувальному розташуванні під час процесу випромінювання, світло відбивається, що призводить до повної інтерференції відбиття на певній довжині хвилі. Певні довжини хвиль світла не можуть проникнути крізь матеріал і пройти на інший бік через це явище. Характеристики

кристала залежать від ширини фотонної забороненої зони, яка обмежує випромінювання певних довжин хвиль або частот. Деякі частоти потрапляють в заборонену зону, запобігаючи проходженню електромагнітних хвиль через кристал. Фотонні кристали існують трьох типів: одновимірні, двовимірні та тривимірні. Структуру фотонного кристала можна спростити, розглядаючи його як складену з шарів матеріалів, що чергуються, з різними коефіцієнтами ізоляції. Ці матеріали демонструють зміни показників заломлення лише в одному напрямку, залишаючись однорідними в усіх інших напрямках. І навпаки, двовимірні фотонні кристали мають періодичність вздовж двох осей, але зберігають послідовний візерунок вздовж третьої осі. Тривимірні фотонні кристали мають також характерні властивості, такі як фотонні заборонені зони, дефектні моди та поверхневі стани. Вони також мають періодичну структуру вздовж трьох осей.

1.2 Фотонно-кристалічні біосенсори

Біосенсори знаходять різноманітне застосування, зокрема, у виявленні патогенних мікроорганізмів у різних середовищах, таких як повітря, вода чи їжа. Застосування поширюється на мініатюрні портативні пристрої всередині людського тіла, моніторинг життєво важливих показників, лікування захворювань та ідентифікацію певних сигналів у надзвичайних ситуаціях. Універсальність фотонно-кристалічних біосенсорів, розроблених у мікро- та нанорозмірах, сприяє їх широкому поширенню. Ці біосенсори використовують фотонні кристали для оцінки різних фізичних властивостей, таких як показник заломлення, температура, вологість та тиск, шляхом аналізу спектру відбитого світла, та того, що пройшло через структуру. Три основні компоненти біосенсора включають генератор світла, фотонно-кристалічну структуру та детектор.

Вимірний параметр викликає зміну структури фотонно-кристалічних біосенсорів, що призводить до зсуву показника заломлення. Як наслідок, змінюється діапазон частот сигналу. Існує два методи розрахунку цього значення:

- 1) резонансне зміщення довжини хвилі сигналів;
- 2) зміна інтенсивності сигналів.

Метод флуоресцентного детектування та метод детектування за допомогою мітки є прикладами методів детектування оптичних датчиків. У режимі флуоресценції цільові молекули та біоідентифікація будуть позначені тим самим флуоресцентним маркером, що й барвник. Рівень флуоресценції вказує як на існування цільової молекули, так і на силу взаємодії між цільовою молекулою та молекулами біологічного розпізнавання. Процес мічення є досить складним при використанні цього підходу, що є одним з основних недоліків системи. З іншого боку, методи без мітки дозволяють молекулам залишатися у своїй природній формі та структурі, водночас контролюючи зміни показника заломлення через молекулярні взаємодії.

1.2.1 Одновимірні фотонно-кристалічні біосенсори

Резонансна умова в одновимірному фотонно-кристалічному біосенсорі визначається законом Брегга, який пов'язує довжину хвилі падаючого світла λ з просторовим періодом кристала d та ефективним показником заломлення керованої моди n_{eff} :

$$m\lambda = 2dn_{eff}, \quad (1.1)$$

де m – порядок резонансу (ціле число).

Чутливість S вимірює зміну резонансної довжини хвилі відносно змін показника заломлення навколишнього середовища. Її можна виразити таким чином:

$$S = \frac{\partial \lambda_{res}}{\partial n}, \quad (1.2)$$

де λ_{res} – резонансна довжина хвилі;

n – показник заломлення навколишнього середовища.

Добротність Q характеризує різкість резонансного піку та обернено пропорційний ширині смуги пропускання $\Delta\lambda$ резонансу. Вона визначається за формулою:

$$Q = \frac{\lambda_{res}}{\Delta\lambda}. \quad (1.3)$$

Вища добротність вказує на вузький резонансний пік. Ці рівняння підсумовують основні принципи, що керують одновимірними фотонно-кристалічними біосенсорами. Необхідно точно налаштовувати конструктивні характеристики, такі як періодичність та показник заломлення, щоб підвищити чутливість та селективність відповідно до конкретних застосувань. Включення одновимірних фотонно-кристалічних біосенсорів у компактні та адаптовані сенсорні платформи являє собою потенційний шлях для розвитку біоаналітичних методологій. Зокрема, у роботі [8] описано біосенсор, що використовує одновимірний фотонний кристал для моніторингу рівня глюкози в крові. Схема сенсорного пристрою представлена на рис. 1.1. Пристрій складається з двох шарів, що чергуються, та центрального порожнистого шару, який повністю заповнений кров'ю.

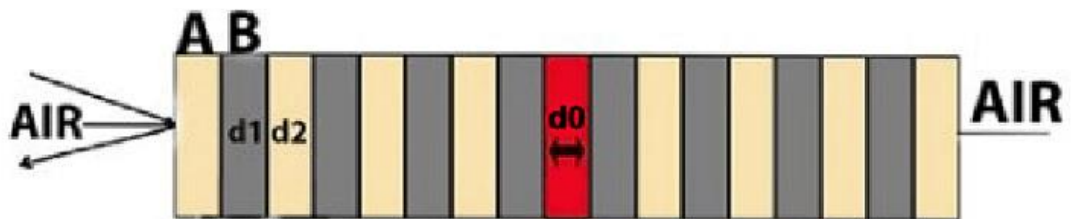


Рисунок 1.1 – Схема сенсорної структури на основі одновимірного фотонного кристалу

Обчислювальний аналіз цієї конструкції показує появу електромагнітних мод у фотонних заборонених зонах спектра пропускання, що пояснюється шаром, заповненим кров'ю. Частота цих електромагнітних мод залежить від концентрації глюкози в крові. Шари, що чергуються, що оточують порожнину С, складаються з двох матеріалів, А та В. Матеріал А має показник заломлення $n_1 = 1,45$ та товщину d_1 , тоді як матеріал В має показник заломлення $n_2 = 3,86$ та товщину d_2 . $D = d_1 + d_2$ визначається як період фотонного кристала. Дефектний шар порожнини буде заповнений аналітом з комплексною діелектричною проникністю ϵ_0 та товщиною d_0 . Зі зміною концентрації глюкози в крові гілка дефекту зміщується в межах проміжку. Щоб забезпечити наявність чіткого та ізольованого піку в проміжку для кожної концентрації, важливо ретельно вибрати товщину порожнини крові d_0 . Оптимальна товщина, яка задовольняє цим умовам, становить $d_0 = 0,27D$, і слід підтримувати d_0 на цьому заданому значенні.

Зміна концентрації глюкози в крові призводить до зміщення піку відбиття в межах забороненої зони періодичної структури (рис. 1.2).

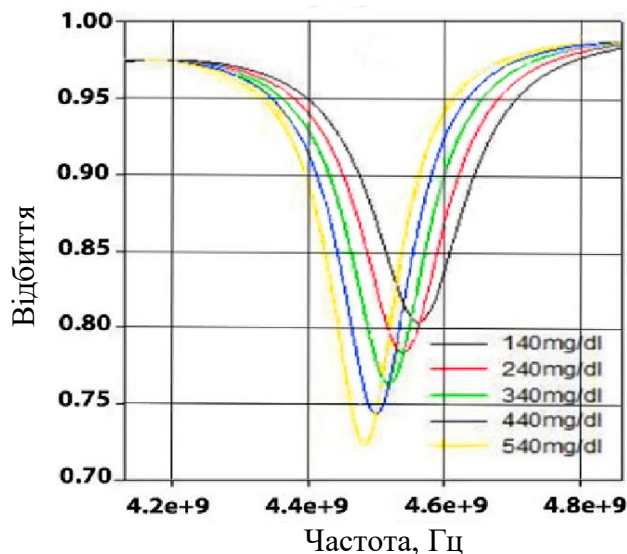


Рисунок 1.2 – Частотна залежність відбиття для різних значень концентрації глюкози в крові

Збільшення концентрації глюкози призводить до зміщення піку відбиття в бік нижчих частот. Це означає, що кожна конкретна концентрація глюкози в крові відповідає окремій частоті. Зміна довжини хвилі залежить від концентрації глюкози в крові. Зображені дані показують, що зі зростанням концентрації глюкози в крові довжина хвилі також збільшується.

Біосенсор, що використовує одновимірний фотонний кристал і спирається на показник заломлення, був описаний у роботі [9]. Цей специфічний біосенсор призначений для виявлення плазми крові. На рис. 1.3 зображено точку введення зразка крові, розташовану в дефекті, створеному між шарами графену. Запропонована структура має таку схему чергування шарів: $(\text{SnS}/\text{Наноккомпозит}/\text{SiO}_2)^N/\text{Графен}/D/\text{Графен}/(\text{SnS}/\text{Наноккомпозит}/\text{SiO}_2)^N$, де D позначає дефектний шар, який має бути заповнений зразком крові, а кількість періодів $N = 5$. Сульфід олова (SnS) обраний як матеріал з високим показником заломлення через його низьке пропускання в діапазоні оптичних частот від 500 нм до 3000 нм. SiO_2 обраний як матеріал з низьким показником заломлення та експериментально ущільнюється для утворення тонкошарової плівки. Товщина шару SnS позначена як $d_A = 100$ нм, з відповідним показником заломлення, позначеним як n_A , який дорівнює 2,6.



Рисунок 1.3 – Схема розташування шарів сенсорної структури для аналізу крові

Спостереження показують, що заборонена зона охоплює як спектральні області ліворуч, так і праворуч від 750 нм до 1250 нм, де пропускання мод

утруднене. Резонансні зсуви спостерігалися, коли концентрація плазматичних клітин у наданих зразках крові змінювалася в діапазонах від 10 г/л до 50 г/л, від 20 г/л до 30 г/л та від 40 г/л до 50 г/л відповідно. Для виконання обчислень необхідно використовувати метод матриці переносу (ТММ). Для покращення продуктивності зондування виконуються два типи розрахунків пропускання. Спочатку дослідження включає вивчення потужності пропускання T при різних коефіцієнтах заповнення f нанокompозитного матеріалу при збереженні постійної товщини графенового шару d_G . Моді поширення ілюструють існування дефектної області в центральній структурі з графеновими шарами, що покривають обидві сторони. У випадку, коли $f = 0$, нанокompозитний шар складається виключно з SiO_2 , що призводить до незначного пропускання. Потім розрахунок пропускання повторюється по всій інфрачервоній області для ідентифікації зразків крові з різною концентрацією для кожного коефіцієнта заповнення ($f = 0; 0,3; 0,5; 0,7$). Результати розрахунків представлено на рис. 1.4.

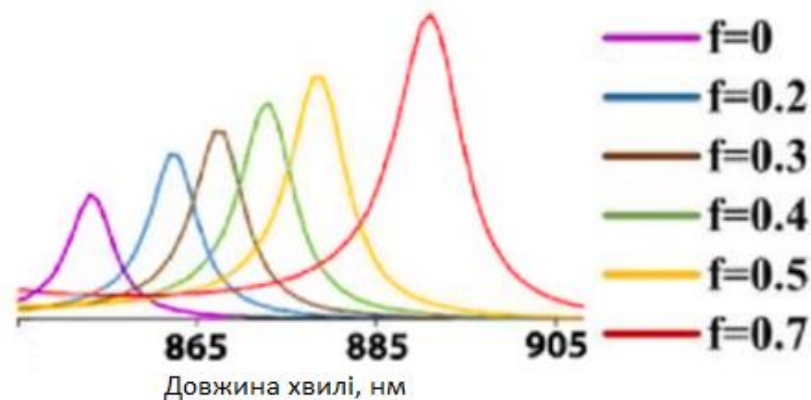


Рисунок 1.4 – Спектральні характеристики сенсора для різних значень коефіцієнту заповнення

Одновимірна бінарна фотонна кристалічна структура з верхнім дефектним шаром розроблена для виявлення концентрації гемоглобіну в аналітах крові [10]. Спочатку оптимізована структура, позначена як субстрат|(BA) N|D|аналіт , розроблена зі склом як підкладкою з показником заломлення 1,5 (рис. 1.5).

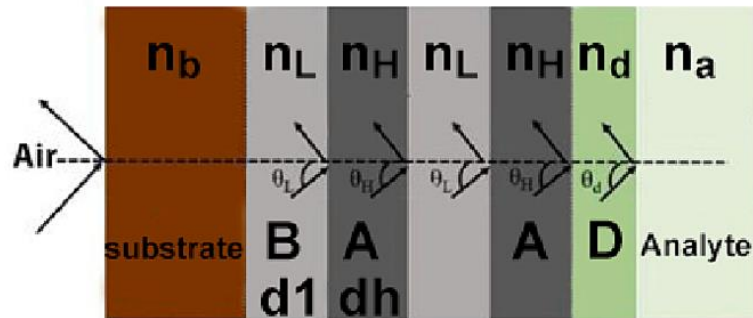


Рисунок 1.5 – Схема багатошарової структури біосенсора

Діоксид титану TiO_2 та діоксид кремнію SiO_2 служать матеріалами з високим (шар «А») та низьким (шар «В») показником заломлення, з показниками заломлення приблизно 2,2 та 1,46 відповідно, розрахованими за допомогою наближення Селлмейєра. Ці шари зібрані в конфігурацію чвертьхвильового стеку, що призводить до загальної товщини приблизно 128 нм та 85 нм відповідно для центральної довжини хвилі 750 нм.

Показник заломлення гемоглобіну крові наведено в табл. 1.1 для різних концентрацій та діапазонів довжин хвиль. Зі збільшенням концентрації гемоглобіну відбувається відповідне збільшення показника заломлення, що демонструє зміни на всіх трьох довжинах хвиль у видимому спектрі.

Таблиця 1.1 – Значення показника заломлення для різних концентрацій гемоглобіну у крові.

Концентрація гемоглобіну, г/л	Показник заломлення на довжині хвилі 632,8 нм	Показник заломлення на довжині хвилі 550 нм	Показник заломлення на довжині хвилі 380 нм
0	1,34265	1,34711	1,35588
10	1,3446	1,34905	1,35781
20	1,34654	1,35099	1,35975
30	1,34848	1,35293	1,36167
40	1,35042	1,35488	1,3636
50	1,35236	1,35682	1,36553
60	1,35431	1,35876	1,36746
70	1,35625	1,3607	1,36939
80	1,35819	1,36264	1,37132
90	1,36013	1,36459	1,37325
100	1,36207	1,36653	1,37518

Розглянемо бінарну багатошарову структуру фотонного кристала, створену з періодичними шарами, позначеними як «А» та «В». У цьому контексті «А» позначає матеріал з високим показником заломлення (n_H), тоді як «В» являє собою матеріал з низьким показником заломлення (n_L), як показано на рис. 1.6. Ця структура демонструє періодичність у напрямку «z», з періодом одного стека, позначеним як Λ . Отже, профіль показника заломлення можна виразити наступним чином:

$$n(z) = \begin{cases} n_L, & 0 < z < dl \\ n_H, & dl < z < dl + dh \end{cases}, \quad n(z + \Lambda) = n(z). \quad (1.4)$$

Тут вісь «z» перпендикулярна до межі розділу багатошарової структури, а dl та dh представляють фізичні товщини шарів «В» та «А» відповідно.

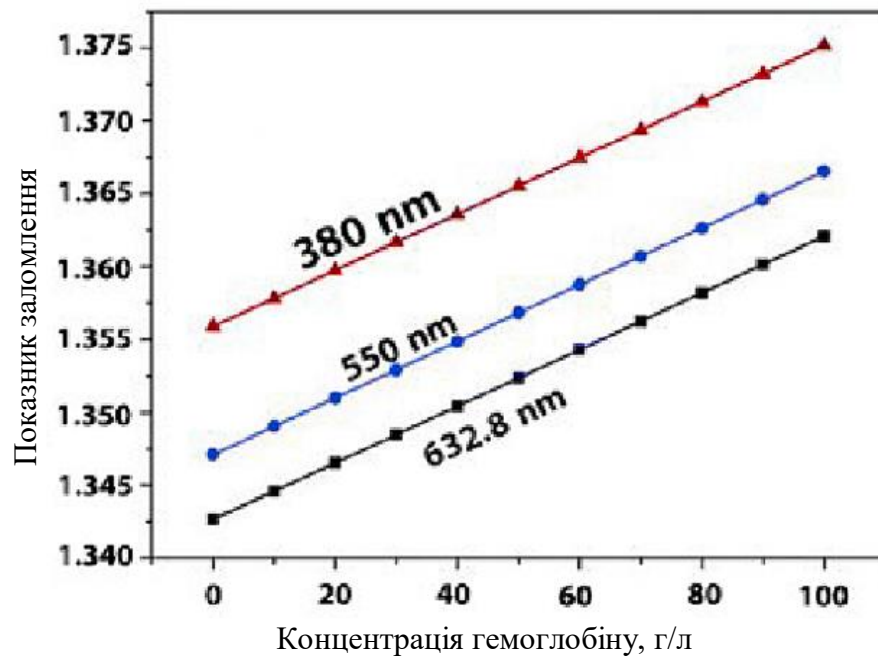


Рисунок 1.6 – Залежності показника заломлення гемоглобіну від його концентрації для різних значень довжини хвилі

Оптична товщина структури обрана для забезпечення конструктивної інтерференції відбитих хвиль на кожній межі розділу. Крім того, шляхом оптимізації властивостей дефектного шару поверхнева мода обмежується саме на верхній межі розділу дефектного шару та аналіту. Збудження блохівських поверхневих хвиль може бути досягнуто для різних довжин хвиль падіння, як показано на рис. 1.6, де показано вплив різних значень dD на кут збудження цих хвиль для довжин хвиль падіння 380; 550; 632,8 нм. Очевидно, що для заданого dD кут збудження зміщується до червоного кінця спектра для нижчих довжин хвиль. Збільшення dD від 150 нм до 240 нм призводить до загальної зміни кута збудження приблизно на 17 %, 19 % та 9% для довжин хвиль падіння 632,8; 550; 400 нм відповідно. Примітно, що при різних кутах падіння ці довжини хвиль обмежені верхньою межею розділу. Для значення $dD = 165$ нм запропонована структура генерує блохівські хвилі для довжин хвиль 632,8; 550; 400 нм при кутах падіння $42,26^\circ$; $46,48^\circ$ та $58,08^\circ$ відповідно.

Рис. 1.6 показує, що збільшення концентрації гемоглобіну має лінійний вплив на його показник заломлення. Крім того, для певної концентрації гемоглобіну показник заломлення зменшується зі збільшенням значень довжин хвиль падіння, що тісно пов'язано з типовим дисперсійним співвідношенням Коші.

Запропонована конфігурація передбачає включення дефектного шару «D» між двома ідентичними структурами одновимірного фотонного кристалу. Скло ВК7 з показником заломлення 1,52 використовується як підкладка для оптимізації запропонованої структури, яка відповідає шаблону підкладка|(BA)^N|D|(BA)^N|повітря. Об'ємний кремній (Si) служить матеріалом з високим показником заломлення (шар «A»), тоді як пористий кремній (P-Si) з 50 % пористістю обраний як матеріал з низьким показником заломлення (шар «B»), що призводить до показників заломлення приблизно 3,45 та 2,34 для Si та P-Si відповідно. Структурні параметри точно налаштовані для досягнення максимального коефіцієнта відбиття навколо центральної довжини хвилі 1550 нм. Для вимірювання кількості гемоглобіну у зразку було розроблено біосенсор, виготовлений з одновимірного фотонного кристала (рис. 1.7).

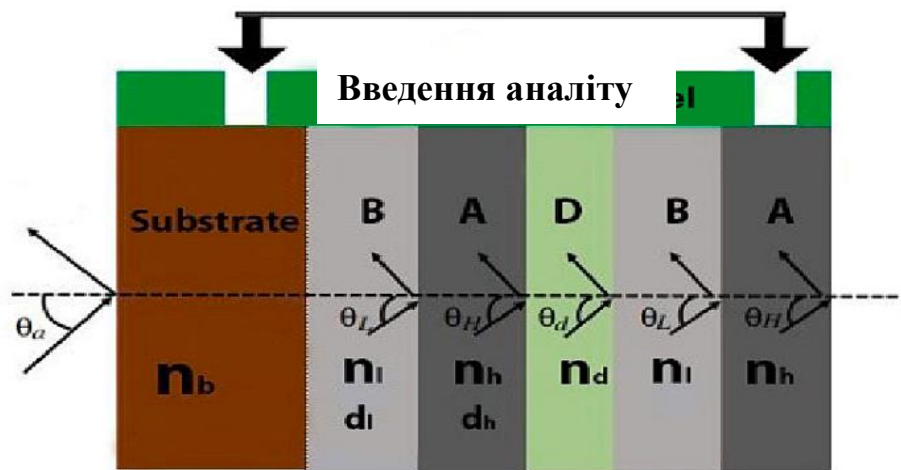


Рисунок 1.7 – Схема фотонно-кристалічного сенсора

Кремній розташовано шарами, що чергуються, утворюючи каркас цієї структури. Чутливість цього датчика становить 323 нм/RIU (0,05 нм/(г/л)), а коефіцієнт якості (FOM) – 517 RIU⁻¹.

Чутливість при трьох різних значеннях пористості наведена в таблиці 1.2. Згідно з даними, наведеними в таблиці, збільшення пористості на 10 % призводить до підвищеного рівня чутливості. Зокрема, довжина хвилі 1550 нм вказує на дефект у зразку повітря.

Таблиця 1.2 – Експлуатаційні характеристики біосенсора для різних значень концентрації цукру

Концентрація цукру крові, мг*дл ⁻¹	Чутливість, нм/RIU	Показник якості сенсора*10 ⁶ , RIU	Добротність*10 ⁶
0			3,566
100	1450	6,876	3,563
200	1480	7,008	3,558
300	1085	5,135	3,557
400	1158	5,435	3,528
500	1207	5,979	3,539

На рис. 1.8 показано спектральні характеристики сенсорної структури з різними значеннями концентрації гемоглобіну. Дефектний шар просякнутий різними аналітами, кожен з яких має показник заломлення від 1,1 до 1,4. Ця зміна викликає зсув резонансної довжини хвилі в межах фотонної забороненої зони періодичної структури.

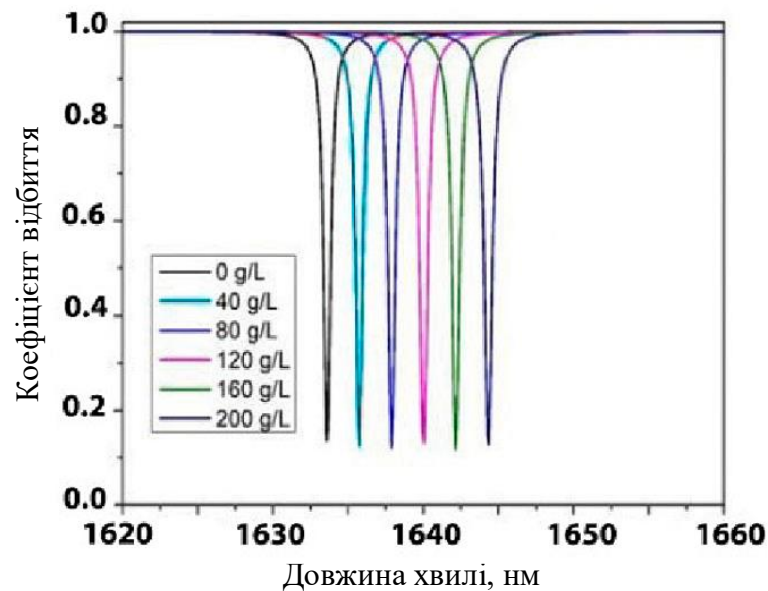


Рисунок 1.8 – Спектральні залежності коефіцієнту відбиття для різних значень концентрації гемоглобіну

Використовуючи матричний метод, було запропоновано біосенсор, що використовує одновимірний фотонний кристал, для виявлення рівня креатиніну в крові [11]. Конструкція датчика включає спеціальний простір для введення аналітів або креатиніну, що містить шари MgF_2 та CeO_2 . Цільове застосування цієї структури – аналіз зразків сироватки крові людини для кількісного визначення рівня фізіологічного креатиніну. Схема сенсорного пристрою зображена на рис. 1.9.

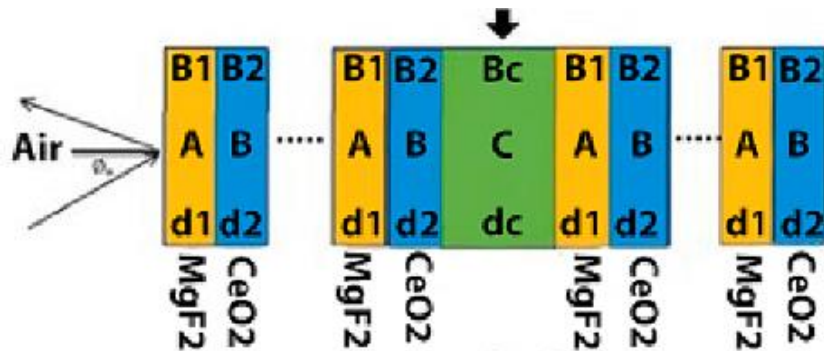


Рисунок 1.9 – Схема фотонно-кристалічного сенсору

У числових розрахунках параметри матеріалу для багатошарових стеків включають шар А (MgF_2) та шар В (CeO_2) з діелектричними властивостями. Передбачувана товщина та показник заломлення для обох шарів встановлені як $d_A = d_B = 0,1$ мм та $n_A = 1,37$, $n_B = 2,4$ відповідно. Товщина зразка креатиніну крові прийнята рівною 230 нм.

1.2.2 Біосенсор для визначення характеристик крові

Рис. 1.10 ілюструє конструкцію фотонно-кристалічного датчика, що містить шари Si/SiO_2 , з рідиною, що покриває центральний шар як чутливий елемент. Цю структуру було спеціально розроблено для кількісного визначення рівня цукру в крові у видимій області [12]. Для оптимізації продуктивності функціональність датчика була покращена шляхом регулювання товщини шарів та кута падіння хвилі. Датчик демонструє чутливість у діапазоні від 0 нм/RIU до 500 нм/RIU при довжині хвилі 1100 нм для вимірювання концентрації цукру в крові. Крім того, розрахований коефіцієнт якості становить $3,539 \times 10^6$, а межа виявлення датчика становить $8,8 \times 10^{-9}$.

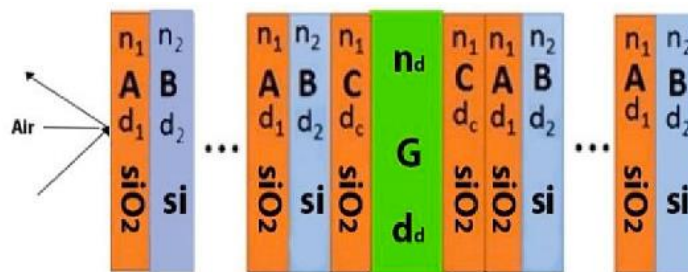


Рисунок 1.10 – Схема фотонно-кристалічного сенсору для визначення рівня цукру у крові

На рис. 1.11 представлено залежність чутливості сенсора від товщини дефектного шару, в якому розміщується аналіт. Використання SiO_2 та Si базується на їх значному контрасті показника заломлення та мінімальному поглинанні у відповідному діапазоні довжин хвиль.

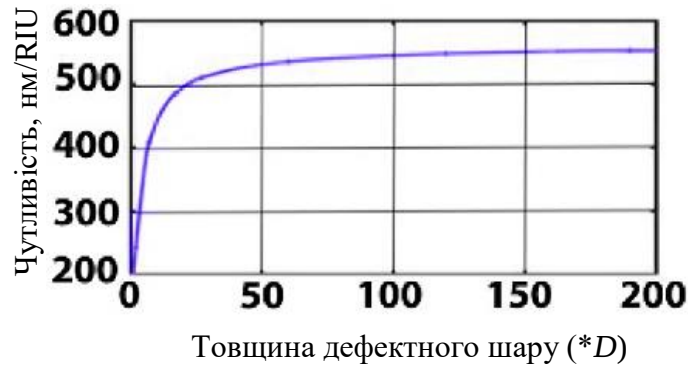


Рисунок 1.11 – Залежність чутливості сенсора від товщини дефектного шару

Шари SiO_2 та Si мають товщину $d_1 = 0,11$ мкм та $d_2 = 0,06$ мкм відповідно. Показник заломлення SiO_2 становить 1,46, а показник заломлення Si – 3,7. Сумарний період кристалічної решітки D дорівнює 0,17 мкм. Показник заломлення цукру в крові, позначений як n_d , змінюється залежно від концентрації кров'яного цукру у воді, що представлено як $C(\text{gl}^{-1})$.

Робочі спектральні характеристики сенсорного пристрою представлені на рис. 1.12 для товщини дефектного шару $d_d = 60D$ та різних значень концентрації цукру у крові.

Видно, що збільшення концентрації цукру у крові призводить до зсуву резонансного піку проходження, що розташований в фотонній забороненій зоні одновимірного фотонного кристалу.



Рисунок 1.12 – Залежність коефіцієнту проходження сенсора від довжини хвилі для різних значень концентрації цукру

В таблиці 1.3 наведені результати розрахунків основних характеристик біосенсора. Очевидно, що зі зростанням рівня цукру в крові відбувається відповідне зниження чутливості пристрою. І навпаки, показник якості та добротності зазнали відносно незначного зниження.

Таблиця 1.3 – Експлуатаційні характеристики біосенсора для різних значень концентрації цукру

Концентрація цукру крові, мг*дл ⁻¹	Чутливість, нм/RIU	Показник якості сенсора*10 ⁶ , RIU	Добротність*10 ⁶
0	—	—	3,566
100	1450	6,876	3,563
200	1480	7,008	3,558
300	1085	5,135	3,557
400	1158	5,435	3,528
500	1207	5,979	3,539

Цей результат пояснюється взаємодією між двома змінними. Коли концентрація цукру в крові зміщується від $C = 0 \text{ г*л}^{-1}$ до 5 г*л^{-1} (еквівалентно від 0 мг*дл^{-1} до 500 мг*дл^{-1}), відповідний показник заломлення зазнає переходу від 1,3323 до 1,3329, що вказує на діапазон, пов'язаний з діабетом. Підвищення концентрації цукру в крові викликає зсув положення резонансної дефектної моди в бік довших довжин хвиль.

Для детектування гемоглобіну крові була також запропонована конфігурація фотонно-кристалічного біосенсора, яка включає шари кремнію, перемежовані сегментами гемоглобіну крові [13]. Структурні характеристики залежать як від поляризації, так і від товщини цих шарів. Досягнута чутливість становить 167 нм/RIU для кута падіння хвилі 45° , а коефіцієнт якості вимірюється на рівні $0,63 \text{ RIU}^{-1}$. Досліджуються характеристики пропускання видимого світла практично аналогічної конструкції, зосереджуючись на дефектному шарі гемоглобіну товщиною d_d та показником заломлення n_d , розташованому всередині бінарного фотонного кристала з N періодів.

На рис. 1.13 представлені результати розрахунку спектральних характеристик проходження для різних значень концентрації гемоглобіну, розміщеного в дефектному шарі одновимірної фотонно-кристалічної структури.

Очевидно, що резонансна довжина хвилі зміщується праворуч зі збільшенням концентрації гемоглобіну, що узгоджується зі зростанням показника заломлення. Отже, положення резонансного пропускання служить засобом для оцінки концентрації гемоглобіну у зразку.

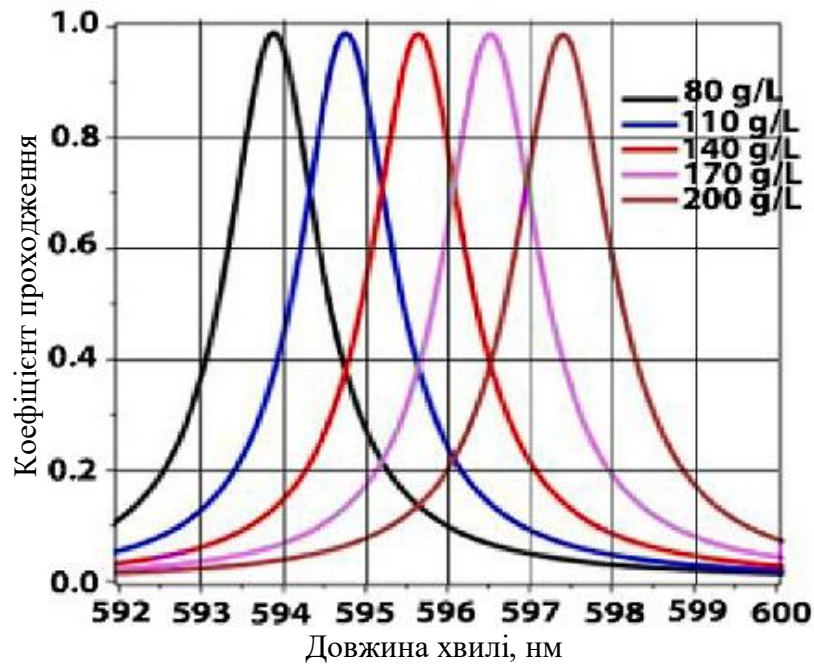


Рисунок 1.13 – Коефіцієнт проходження як функція довжини хвилі для різних концентрацій гемоглобіну у крові

Модифікація параметрів сенсора включає введення аналіту в центральний шар кремнієво-титанової структури, призначеної для ідентифікації ракових клітин та плазми крові. У цій структурі чутливість біосенсора визначена на рівні 71,25 нм/RIU з товщиною шару аналіту 100 нм. Значення чутливості можна збільшити до 161 нм/RIU, регулюючи товщину шару аналіту до 300 нм.

2 МОДЕЛЮВАННЯ СЕНСОРА НА ОСНОВІ ОДНОВИМІРНОГО ФОТОННОГО КРИСТАЛУ

Оптичні біосенсиори стали перспективними пристроями завдяки своїй високій чутливості, специфічності та здатності виявляти незначні біохімічні зміни. Серед них виділяються біосенсиори на основі фотонних кристалів завдяки своїй унікальній здатності керувати світлом через періодичні діелектричні структури, що дозволяє точно контролювати фотонні заборонені зони. Введення дефектного шару в фотонний кристал дозволяє генерувати локалізовані резонансні моди, які є дуже чутливими до змін показника заломлення в аналіті, який розташовується в дефектному шарі. Ракові клітини демонструють відмінні значення показника заломлення порівняно з нормальними клітинами через підвищену ядерну щільність та вміст цитоплазматичного білка, що робить показник заломлення ідеальним біомаркером для виявлення [14]. Наприклад, клітини раку молочної залози (MDA-MB-231) демонструють показник заломлення 1,399, тоді як нормальні клітини – 1,35.

Використовуючи цей контраст показників заломлення, одновимірні фотонні кристали досліджувалися для різноманітних біосенсорних застосувань. Однак існуючі конструкції часто стикаються з компромісами між чутливістю, складністю виготовлення та спектральною роздільною здатністю. Досягнення в галузі фотонно-кристалічних біосенсорів продемонстрували їхній потенціал для виявлення раку. В роботі [15] повідомляється про сенсор на основі Si/SiO₂ з помірною чутливістю 98,92 нм/RIU, тоді як в [16] досягли 290 нм/RIU, використовуючи багат шарові матеріали MgF₂/ZnSe з графеном. Примітно, що багато існуючих конструкцій покладаються на сполучні призми для збудження поверхневих плазмонів або посилення взаємодії світла з аналітом, що збільшує складність виготовлення та вартість. На противагу цьому, досліджуваний біосенсор працює без сполучної призми, що дозволяє безпосередньо взаємодіяти між фотонно-кристалічною структурою та аналітом. Ця безпризменна архітектура спрощує конструкцію,

зменшує займану площу та підвищує практичність для медичних застосувань у місцях надання медичної допомоги. Незважаючи на певний прогрес, ці конструкції демонструють обмежену чутливість для розрізнення тонких відмінностей у виявленні різниці між підтипами раку. Крім того, залишаються такі проблеми, як вузькі робочі діапазони довжин хвиль, кутова залежність та недостатня взаємодія світла з аналітом. Щоб усунути ці прогалини, у даній кваліфікаційній роботі пропонується високочутливий фотонно-кристалічний біосенсор, що складається з шарів германію (Ge) та фториду літію (LiF), що чергуються. Дефектний шар, інфільтрований аналітами ракових клітин, індукує червоне зміщення резонансної довжини хвилі в межах фотонної забороненої зони, пропорційне відповідній зміні показника заломлення аналіту. Сенсор досягає покращеної взаємодії з речовиною та високої чутливості шляхом оптимізації таких параметрів, як товщина дефекту, кут падіння та центральна довжина хвилі. Крім того, досліджуваний біосенсор на основі LiF/Ge фотонного кристалу спеціально використовує контраст з високим показником заломлення та оптимізовану конфігурацію дефектів для досягнення високої чутливості в розрізненні підтипів раку.

Структура біосенсора «повітря/(AB)^{N/2}/Дефект/(AB)^{N/2}/Підкладка» використовує шари LiF та Ge, розроблені з використанням чвертьхвильової умови Брегга при $\lambda_c = 1700$ нм. Теоретичний аналіз за допомогою методу матриці переносу (ТММ) показує, що поперечна електрична (ТЕ) поляризація забезпечує сильніше обмеження поля та стабільні характеристики фотонної забороненої зони порівняно з поперечними магнітними (ТМ) модами [17]. Ключові показники ефективності: чутливість (S) та добротність (Q) оцінюються для підтвердження здатності сенсора диференціювати клітини раку молочної залози, базальних клітин та клітин раку шийки матки.

2.1 Теоретична модель багатошарової періодичної структури

У даній кваліфікаційній роботі досліджуються три типи ракових клітин: ракові клітини молочної залози, базальні клітини та клітини шийки матки, отримані з крові або рідких зразків ураженої анатомічної області. Експериментальні дані показують, що ракові клітини мають більші показники заломлення, ніж нормальні клітини, через підвищений вміст білка. Значна різниця в показниках заломлення робить його найбільш придатним біофізичним показником для ефективного виявлення ракових клітин.

Структура запропонованого біосенсора на основі одновимірного фотонного кристалу виконана за схемою «повітря/(AB)^{N/2}/Дефект/(AB)^{N/2}/підкладка», де А та В представляють шари фториду літію (LiF) та германію (Ge), що чергуються, відповідно (рис. 2.1).

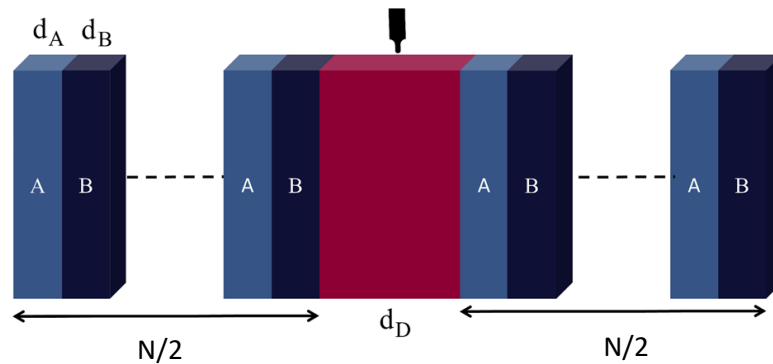


Рисунок 2.1 – Схема досліджуваного фотонно-кристалічного біосенсора

Зокрема, дефектний шар діє як оптичний резонатор, що дозволяє резонансні режими передачі, які є дуже чутливими до значення показника заломлення інфільтрованого аналіту. Зі збільшенням показника заломлення (наприклад, від здорових до ракових клітин) ефективна довжина оптичного шляху збільшується, що призводить до червоного зміщення резонансного піку відповідно до умови

стоячої хвилі Брегга. Як показано на рис. 2.1, дефектний шар вводиться для взаємодії зі зразками ракових клітин, що дозволяє виявляти навіть незначні зміни показника заломлення. Дефектний шар буде заповнений клітинами крові як аналітами.

Залежні від довжини хвилі показники заломлення LiF та Ge розраховуються за допомогою рівнянь Селлмейєра [18]:

$$n_{LiF}^2(\lambda) = 1 + \frac{A\lambda^2}{\lambda^2 - B^2} + \frac{C\lambda^2}{\lambda^2 - D^2}, \quad (2.1)$$

$$n_{Ge}^2(\lambda) = E + \frac{F\lambda^2}{\lambda^2 - G} + \frac{H\lambda^2}{\lambda^2 - I}, \quad (2.2)$$

де коефіцієнти мають такі значення: $A = 0,925$; $B = 0,07376$; $C = 6,96747$; $D = 32,790$; $E = 9,28743$; $F = 6,73276$; $G = 0,43358$; $H = 0,29259$ та $I = 13512,6$ при 297 К. Коефіцієнт заломлення шарів LiF та Ge на центральній довжині хвилі 1700 нм, отриманий з їхніх рівнянь Селлмейєра, що залежать від довжини хвилі, становить $n_{LiF} = 1,3815$ та $n_{Ge} = 4,15$ відповідно. Ці значення розраховуються спеціально при $\lambda_c = 1700$ нм, щоб гарантувати, що довжина хвилі для оцінки показника заломлення відповідає розрахунковій довжині хвилі чвертьхвильової структури Брегга, що вимагається для точного визначення товщини шару. Товщини шарів LiF (d_A) та Ge (d_B) потім визначаються за допомогою чвертьхвильової умови Брегга:

$$d = \lambda_c / 4n, \quad (2.3)$$

де $\lambda_c = 1700$ нм – центральна довжина хвилі, а n вказує показник заломлення шарів LiF та Ge, обраних для оцінки.

Це дає такі значення товщин шарів: $d_A = 307,4$ нм, $d_B = 102,4$ нм, а товщина дефектного шару розраховується як $d_f = f(d_A + d_B)$, що призводить до $d_f = 409,8$ нм,

коли f дорівнює одиниці. Тут f розглядається як коефіцієнт множення товщини дефектного шару. Для дослідження спектру пропускання запропонованої структури використовується метод матриці переносу [19]. Характеристична матриця для k -го шару визначається таким чином:

$$M_k = \begin{pmatrix} \cos(\varphi_k) & -i \frac{\sin(\varphi_k)}{q_k} \\ -iq_k \sin(\varphi_k) & \cos(\varphi_k) \end{pmatrix}, \quad (2.4)$$

де $\varphi_k = 2\pi n_k d_k \cos(\theta_k)/\lambda$ – фазовий зсув;

n_k та d_k – показник заломлення та товщина k -го шару;

θ_k – кут поширення, розрахований за законом Снелліуса:

$$n_k \sin(\theta_k) = n_0 \sin(\theta_0). \quad (2.5)$$

Біосенсор можна використовувати для роботи з випромінюванням як з ТЕ, так і з ТМ поляризаціями. Для більших кутів падіння дефектна мода, розташована у фотонній забороненій зоні, демонструє зсув у синій бік. З іншого боку, для ТМ-поляризації властивості фотонної забороненої зони зміщуються в бік довшої довжини хвилі (червоний зсув), що полегшує виявлення біомолекул. Аналіз чутливості показав, що вплив розміру та форми лінзи на чутливість був сильнішим для ТЕ-режимів, ніж для ТМ-режимів. Крім того, для одновимірного фотонного кристалу ТЕ-режим завжди має ширшу заборонену зону, ніж хвиля ТМ-режиму. Тому в цій роботі для спрощення використовується ТЕ-поляризація хвиль для розрахунку чутливості біосенсора. Для ТЕ-поляризації ефективний показник заломлення виражається як [20]:

$$q_k = n_k \cos(\theta_k). \quad (2.6)$$

Результуюча матриця передачі структури тоді формулюється таким чином:

$$M_T = (M_A M_B)^{N/2} M_D (M_A M_B)^{N/2} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix}, \quad (2.7)$$

де M_A , M_B та M_D відповідають характеристичним матрицям Ge, LiF та дефектного шару відповідно. Амплітудний коефіцієнт пропускання t розраховується як:

$$t = \frac{2q_0}{(M_{11} + M_{12}q_s)q_0 + (M_{21} + M_{22}q_s)}, \quad (2.8)$$

де $q_0 = n_0 \cos(\theta_0)$ (на вході структури) та $q_s = n_s \cos(\theta_s)$ (на виході структури). Енергетичний коефіцієнт пропускання T отримується таким чином:

$$T = \frac{q_s}{q_0} |t|^2. \quad (2.9)$$

Спектри пропускання розраховувалися в пакеті комп'ютерної алгебри MathCAD. Продуктивність сенсорного пристрою кількісно визначалася за допомогою чутливості S та добротності Q :

$$S = \frac{\Delta\lambda_R}{\Delta n}, \quad (2.10)$$

$$Q = \frac{\lambda_R}{FWHM}, \quad (2.11)$$

де $\Delta\lambda_R$ – зсув резонансної довжини хвилі;

Δn – зміна показника заломлення;

FWHM – повна ширина резонансного піку на рівні половинної потужності.

Ці показники дозволяють оцінити здатність сенсора розрізняти здорові та ракові клітини на основі їхніх різних показників заломлення. Товщина дефектного шару оптимізована для покращення взаємодії світла з речовиною, забезпечуючи високу чутливість та специфічність для виявлення раку. Запропонована конструкція використовує TE поляризовані хвилі завдяки їхньому кращому обмеженню поля та стабільним характеристикам фотонної забороненої зони порівняно з режимами ТМ. Підкладкою є скло з показником заломлення $n_s = 1,517$. У якості оточуючого середовища обрано повітря з показником заломлення $n_0 = 1,0$.

Вибір LiF та Ge для багат шарового стеку ґрунтується на їхньому високому контрасті показників заломлення ($\Delta n \approx 2,77$ при $\lambda_c = 1700$ нм), що забезпечує широку фотонну заборонену зону та сильне обмеження дефектних мод. LiF є діелектриком з низьким показником заломлення, низькими втратами та високим пропусканням у ближньому інфрачервоному діапазоні, що робить його придатним для мінімізації поглинання. Ge, з іншого боку, забезпечує дуже високий показник заломлення з відносно низькою дисперсією в цільовому діапазоні довжин хвиль, що покращує локалізацію електромагнітного поля в дефектній порожнині.

На рис. 2.2 представлено результати розрахунків спектру коефіцієнту проходження за умови відсутності аналіту в дефектному шарі структури. Тут реалізується доволі широка заборонена зона, в межах якої випромінювання повністю відбивається від багат шарової структури.

Діапазон довжин хвиль, який відповідає фотонній забороненій зоні, є робочим діапазоном фотонно-кристалічного сенсорного пристрою. Саме в цьому діапазоні відбувається формування власних мод Бреггівського резонатора, що мають досить велику добротність для забезпечення необхідної чутливості сенсора до зміни детектованих параметрів.

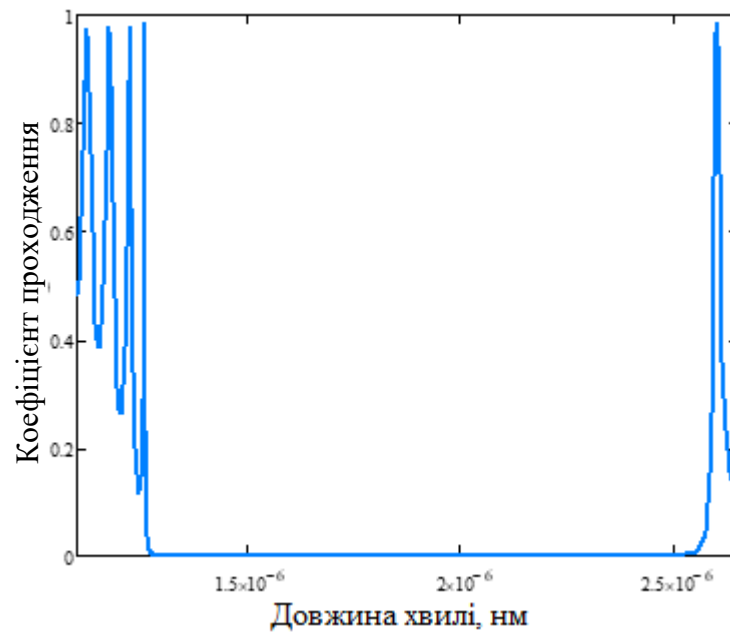


Рисунок 2.2 – Спектральна характеристика сенсора за умови відсутності аналіту

Рисунок 2.3 показує результати розрахунків для випадку, коли дефектний шар одновимірної фотонно-кристалічної структури сенсора заповнений здоровими клітинами крові з відповідною діелектричною проникністю. В цьому випадку в межах фотонної забороненої зони формується резонансний пік проходження, який зазвичай називається дефектним. Положення цього піку на осі довжин хвиль визначається матеріальними параметрами аналіту та конфігурацією дефектного шару структури.

Тут розглядалася ситуація нормального падіння хвилі на одновимірний фотонний кристал. Загальна кількість періодів структури $N = 10$. Ширина дефектного шару дорівнює періоду структури, тобто сумі товщин шарів LiF та Ge.

Зрозуміло, що зміна як кута падіння хвилі на багат шарову структуру, так і ширини дефектного шару безпосередньо впливають на електродинамічні характеристики досліджуваної структури.

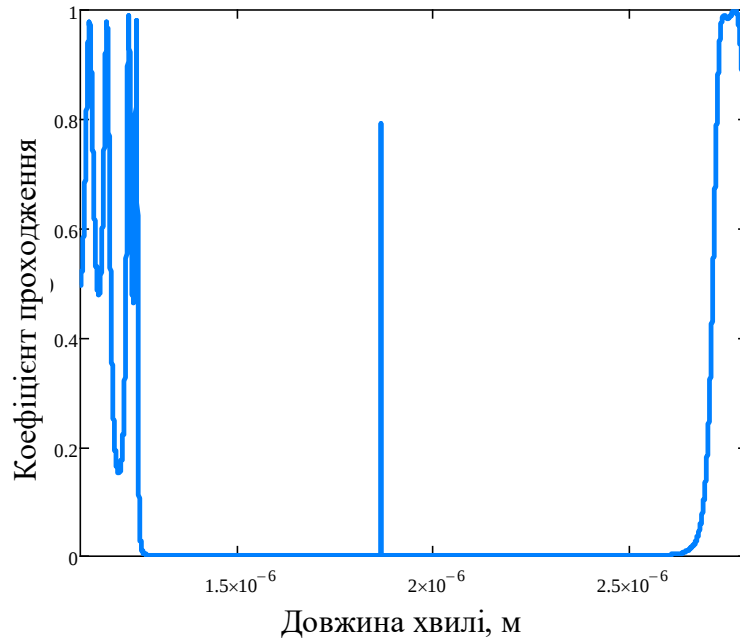


Рисунок 2.3 – Спектральна характеристика сенсора за умови заповнення дефектного шару здоровими клітинами крові

Зрозуміло, що зміна показника заломлення аналіту, розташованого в дефектному шарі, буде призводити до зсуву дефектного резонансного піку уздовж осі довжин хвиль. Саме це явище використовується у фотонно-кристалічних сенсорах для визначення різноманітних фізичних параметрів аналітів.

2.2 Аналіз результатів розрахунків

2.2.1 Виявлення ракових клітин

Запропонований фотонно-кристалічний біосенсор виявляє ракові клітини, використовуючи різницю показників заломлення між нормальними та раковими клітинами. Ракові клітини демонструють підвищений показник заломлення через збільшення ядерної щільності та цитоплазматичного складу порівняно зі здоровими клітинами. Ця різниця викликає вимірюваний червоний зсув резонансної довжини

хвилі λ_R , що розташовується в межах фотонної забороненої зони, як показано на рисунку 2.4.

Коли нормальні клітини ($n = 1,35$) замінюються раковими клітинами (базальні: $n = 1,38$; шийки матки: $n = 1,392$; молочної залози: $n = 1,399$) у дефектному шарі, резонансний пік зміщується в бік довших довжин хвиль. Наприклад, результати розрахунків показують червоне зміщення на майже 19,8 нм для базальних клітин ($\Delta\lambda_R = 1884,8$ нм) порівняно з нормальними клітинами ($\lambda_R = 1865,02$ нм), що узгоджується з умовою стоячої хвилі Брегга:

$$\sigma = m\lambda_c = n_{\text{eff}}\rho, \quad (2.12)$$

де збільшення n_{eff} (ефективного показника заломлення) вимагає пропорційного збільшення λ_R для підтримки оптичної різниці ходу σ .

Важливо зазначити, що цей аналіз передбачає безвтратні діелектричні шари, тобто показники заломлення LiF та Ge вважаються чисто дійсними. На практиці обидва матеріали демонструють скінченні діелектричні втрати, представлені невеликою, але ненульовою уявною складовою показника заломлення, що призводить до поглинання та розсіювання в межах багат шарового стеку.

Ці втрати проявляються як розширення резонансного піку та відповідне зменшення показника якості сенсора, навіть якщо чутливість залишається практично незмінною.

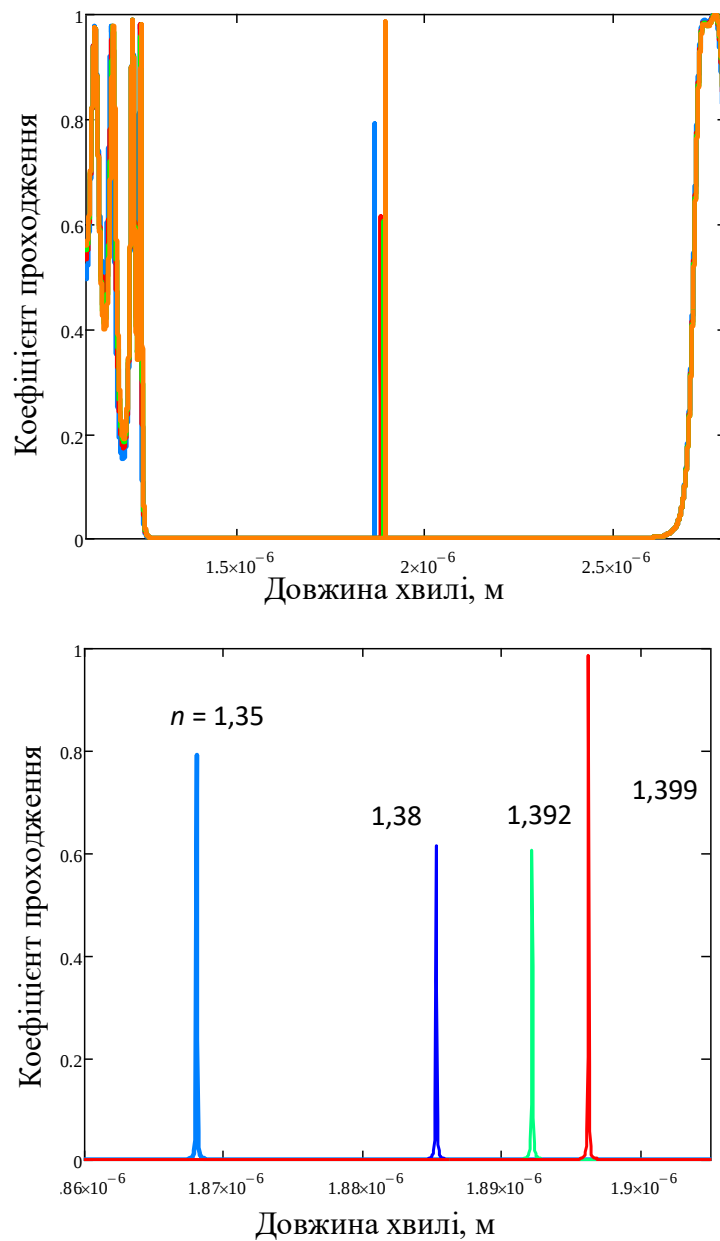


Рисунок 2.4 – Спектральні характеристики сенсора для значень показника заломлення аналіту 1,35 (здорові клітини); 1,38 (базальний рак; 1,392 (рак шийки матки); 1,399 (рак молочної залози)

Щоб пом'якшити ці ефекти у виготовленому пристрої, необхідний ретельний контроль якості матеріалу, включаючи високочисті прекурсори, оптимізовані умови осадження (наприклад, розпилення або хімічне осадження з парової фази при

низькому забрудненні киснем) та відпал після осадження для зменшення шорсткості поверхні.

Застосування цих заходів може суттєво мінімізувати втрати на поглинання та допомогти підтримувати значення показника якості сенсора близькими до тих, що передбачені ідеалізованою моделлю.

2.2.2 Вплив зміни кута падіння

Кут падіння θ_0 хвилі на фотонно-кристалічну структуру критично впливає на ефективність сенсора, модулюючи довжину оптичного шляху та обмеження дефектної моди. На рис. 2.5 представлені результати розрахунків спектральних характеристик сенсора для кутів падіння 30° , 60° та 80° . Видно, що загальні закономірності зсуву дефектних піків пропускання зберігаються для різних кутів падіння. При цьому відбувається зсув цих піків у бік менших довжин хвиль із збільшенням кута падіння.

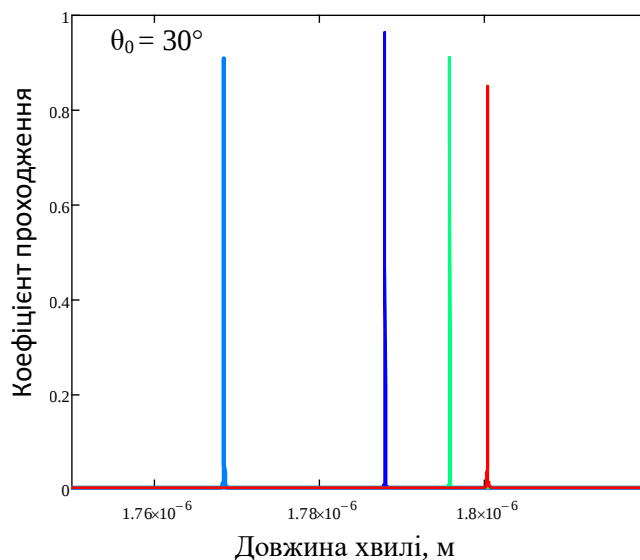


Рисунок 2.5 – Спектральні характеристики сенсора для різних кутів падіння

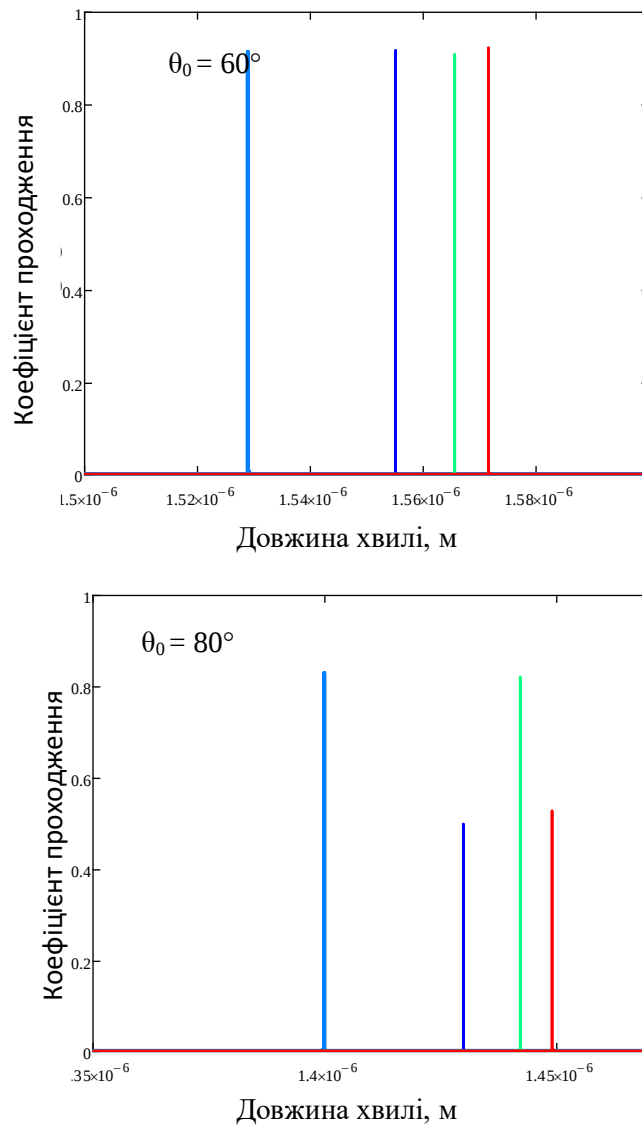


Рисунок 2.5, аркуш 2

Результати розрахунків чутливості сенсора для різних кутів падіння хвилі на фотонний кристал представлені у таблиці 2.1.

На рис. 2.6 показана залежність чутливості сенсора від кута падіння θ_0 , побудована за даними таблиці 2.1.

Таблиця 2.1 – Чутливість фотонно-кристалічного сенсора для різних значень кута падіння хвилі на структуру

Кут падіння, градуси	Чутливість сенсора, нм/RIU
0	560
10	565
20	607
30	614
40	643
50	686
60	731
70	772
80	800

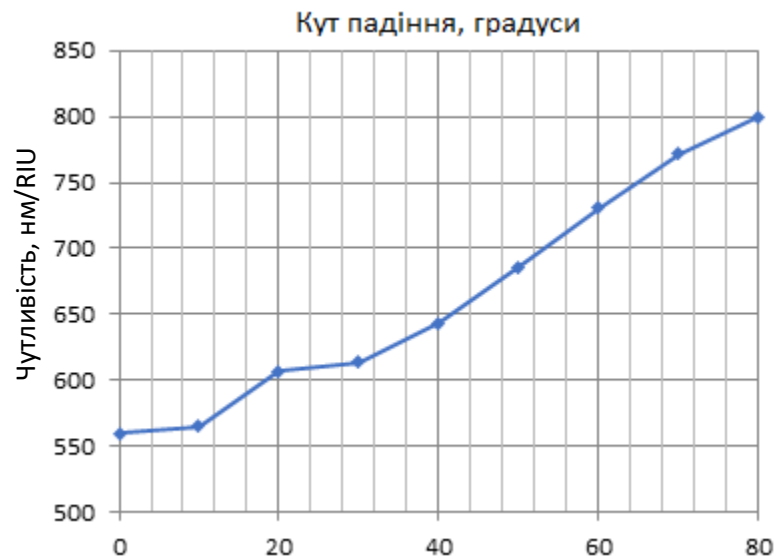


Рисунок 2.6 – Залежність чутливості сенсора від кута падіння світла на структуру.

Збільшення θ_0 від 0° до 80° підвищує чутливість від 560 нм/RIU до 800 нм/RIU, як показано в таблиці 2.1. Це покращення впливає із закону Брегга-Снелліуса:

$$n\lambda_R = 2N\sqrt{n_{eff}^2 - \sin^2 \theta_0} . \quad (2.13)$$

При майже прямому куті член $(n_{eff}^2 - \sin^2 \theta_0)^{1/2}$ зменшується, що вимагає менших значень λ_R (синього зсуву) та посилення взаємодії світла з аналітом. Результируюче обмеження поля загострює резонансний пік, де більші кути зменшують ширину резонансного піку та підвищують добротність сенсора. Хоча чутливість досягає максимуму при 80° , зменшення ширини піку обернено підвищує добротність $Q = \lambda_R / \text{FWHM}$.

Однак, хоча кут падіння 80° забезпечує найвищу чутливість, він також вводить сильну кутову залежність, що може створювати проблеми для стабільного вирівнювання в практичних застосуваннях. Це обмеження можна пом'якшити, використовуючи колімований промінь з точним кутовим контролем.

2.3 Вплив кількості періодів на характеристики сенсора

Кількість періодів N одновимірного фотонного кристалу визначає крутість країв фотонної забороненої зони та інтенсивність резонансної моди, безпосередньо впливаючи на роздільну здатність та чутливість сенсора. На рис. 2.7 представлено результати розрахунків спектральних характеристик сенсора для значення при $N = 8$ (коефіцієнт множення $f = 1$, нормальне падіння). Порівняння з рис. 2.4 він показує розширення дефектних резонансних піків для всіх значень показника заломлення аналіту. Це свідчить про зниження добротності резонатора, що є цілком закономірним результатом.

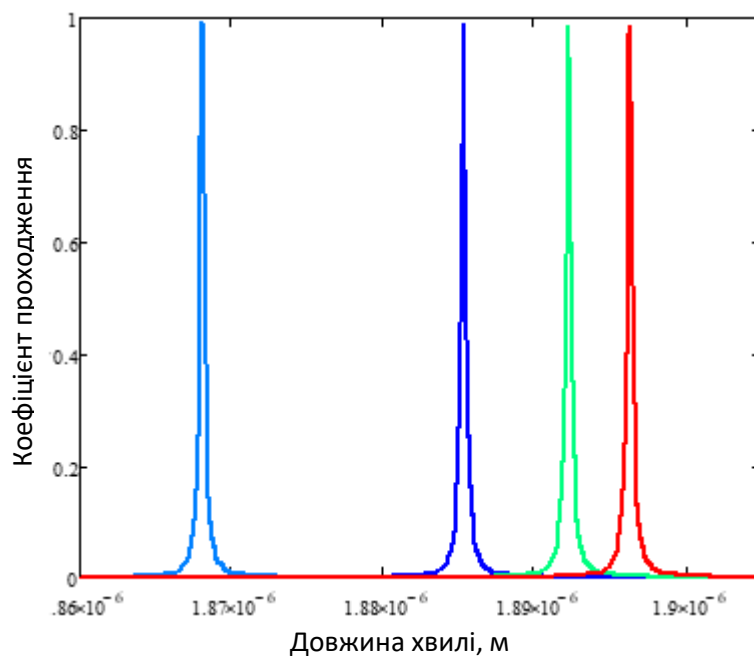


Рисунок 2.7 – Спектральні характеристики сенсора для $N = 8$

Це підтверджується результатами розрахунків, проведених для випадку $N = 12$, які представлені на рис. 2.8.

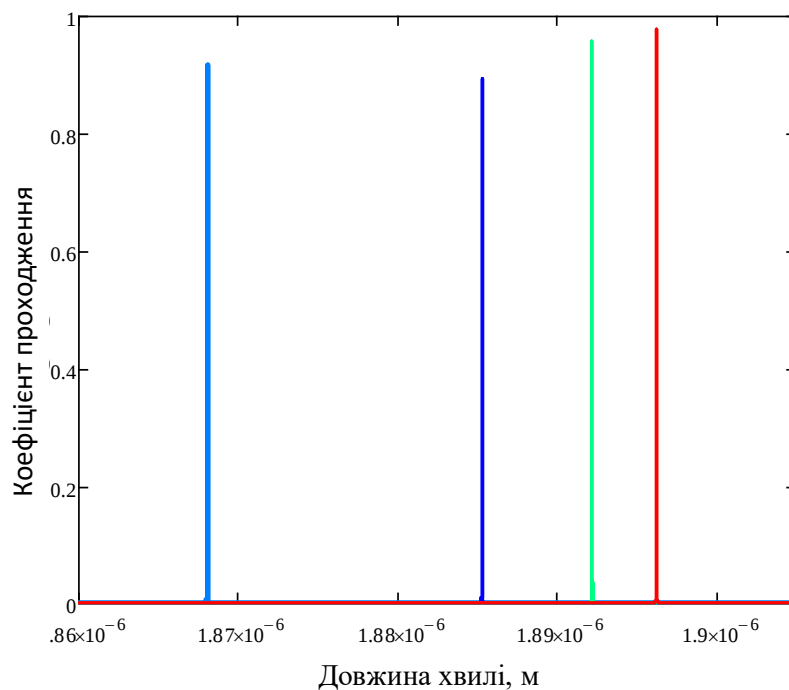


Рисунок 2.8 – Спектральні характеристики сенсора для $N = 12$

Слід відзначити, що, хоча більше значення N незначно покращує коефіцієнт якості сенсора завдяки більш крутим краям забороненої зони, але це ускладнює виготовлення та збільшує площу датчика.

Результати розрахунків показують, що, хоча при зменшенні кількості періодів структури ($N = 8$) відбувається суттєве розширення резонансних піків (майже на порядок) порівняно із випадком $N = 12$, але чутливість залишається стабільною, яка становить $\sim 559 \text{ нм RIU}^{-1}$. Це узгоджується із законом Брегга, де додаткові періоди посилюють відбивну здатність, але насичують взаємодію світла з аналітом.

2.4 Вплив зміни товщини дефектного шару на характеристики сенсора

Товщина дефектного шару d_f критично змінює об'єм взаємодії світла з аналітом та резонансний зсув довжини хвилі. Збільшення коефіцієнта множення f , який визначає ширину дефектного шару, призводить до підвищення чутливості сенсорного пристрою. Це пов'язано з тривалою взаємодією світла з аналітом, оскільки товстіші дефекти збільшують довжину оптичного шляху p в умовах Брегга:

$$\sigma = m\lambda_c = n_{\text{eff}} p, \quad (2.14)$$

де σ – оптична різниця ходу;

m – ціле число;

λ_c – центральна довжина хвилі джерела світла;

p – геометрична довжина шляху;

n_{eff} – ефективний показник заломлення.

На рис. 2.9 представлені результати розрахунків спектральних характеристик сенсору для значення $f = 2$. Тобто, в цьому випадку ширина дефектного шару структури збільшена у два рази порівняно із попередніми розрахунками. Інші

параметри структури залишаються незмінними ($N = 10$, нормальне падіння). В цьому випадку наявність клітин базального раку призводить до зсуву резонансної довжини хвилі від 1566 нм до 1585 нм, тобто майже на 20 нм. В попередньому випадку ($f = 1$) цей зсув складав 15 нм (див. рис. 2.4). Це свідчить про підвищення чутливості сенсора при збільшенні товщини дефектного шару, тобто області, де розташовується аналіт.

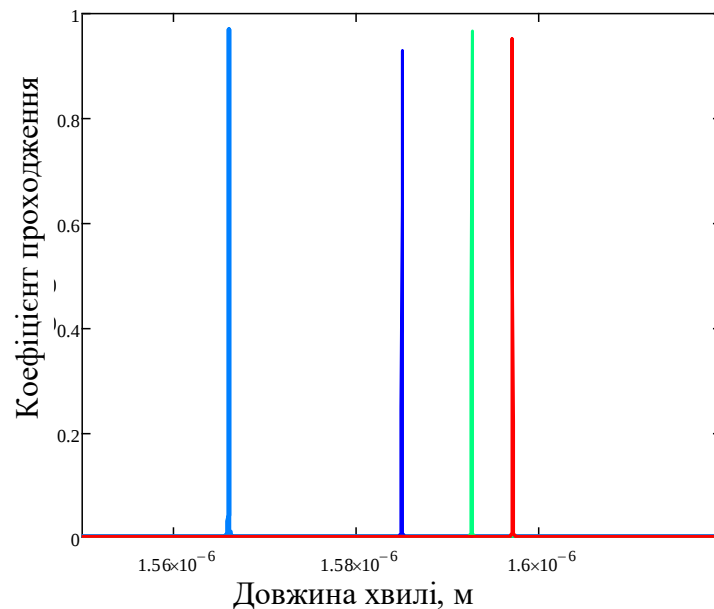


Рисунок 2.9 – Спектральні характеристики сенсора для $f = 2$

На рис. 2.10 представлені результати розрахунків спектральних характеристик для значення коефіцієнту множення $f = 4$. Видно, що в цьому випадку в межах забороненої зони реалізуються два піки проходження. Це цілком зрозумілий результат, оскільки при збільшенні розмірів резонатор стає багатомодовим.

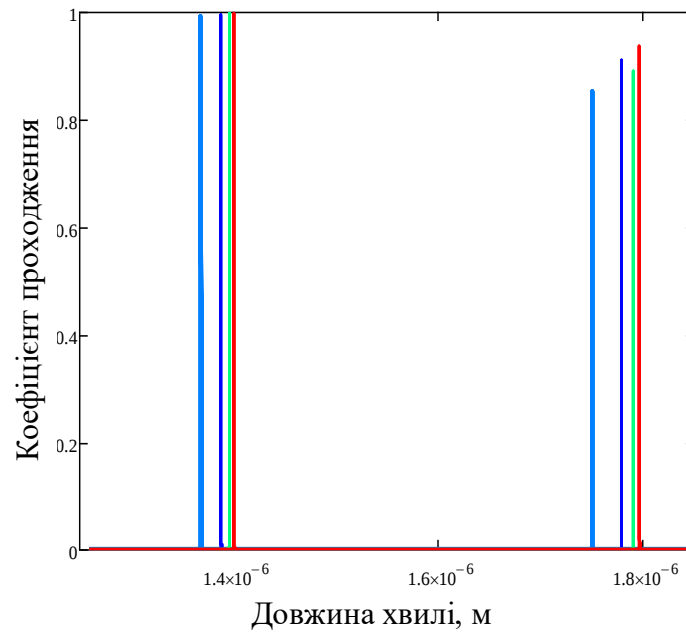


Рисунок 2.10 – Спектральні характеристики сенсора для $f = 4$

Слід відзначити, що з рисунку видно збільшення зсуву резонансних довжин хвиль для ракових клітин відносно здорових для більш високочастотної моди резонатора. Це відповідає збільшенню чутливості сенсорного пристрою.

Можна передбачити, що подальше збільшення коефіцієнту множення f призведе до збільшення кількості дефектних мод в межах забороненої зони одновимірного фотонного кристалу. Результати розрахунків для $f = 6$, представлені на рис. 2.11, підтверджують це.

Тут видно реалізацію чотирьох дефектних мод в межах фотонної забороненої зони. Як і в попередньому випадку, можна зазначити про підвищення чутливості при збільшенні частоти цих мод.

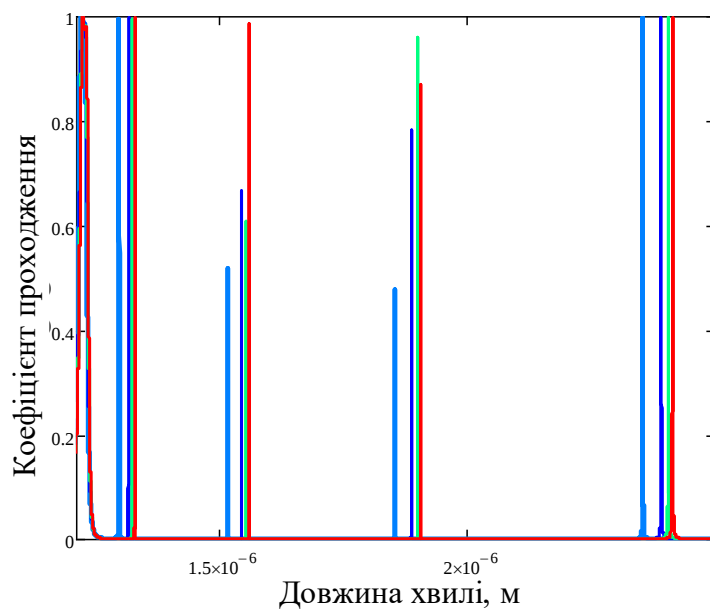


Рисунок 2.11 – Спектральні характеристики сенсора для $f = 6$

Для ілюстрації цього результату на рис. 2.12 представлено спектральні характеристики для третьої дефектної моди у збільшеному масштабі.

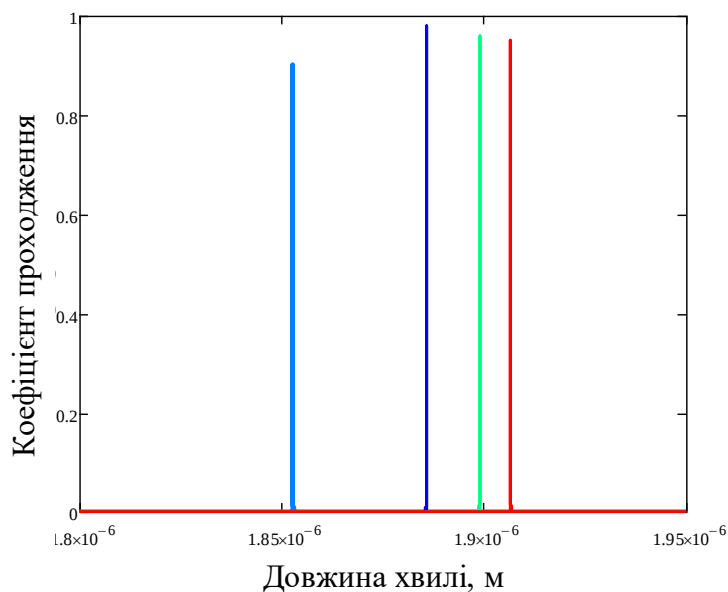


Рисунок 2.12 – Спектральні характеристики для третьої моди сенсора

З рисунку видно, що наявність клітин базального раку призводить до зсуву резонансної довжини хвилі з 1855 нм до 1884 нм, тобто практично на 30 нм. Отже, спостерігається майже двократне підвищення чутливості сенсора при збільшенні товщини дефектного шару, заповненого аналітом, у шість разів.

Слід відзначити, що коефіцієнти проходження для резонансних піків на рис. 2.12 мають більші значення, ніж на рис. 2.11, хоча параметри структури не змінювалися. Це обумовлено зменшенням кроку при зміні довжини хвилі випромінювання в межах більш вузького діапазону на рис. 2.12. З цього можна зробити висновок про високу добротність резонансних піків, яка в цьому випадку сягає кількох десятків тисяч.

Крім того, порівняння рис. 2.12 з рис. 2.4 показує на збільшення зсуву резонансних довжин хвиль і для інших типів раку. Наприклад, для раку молочної залози відбувається збільшення цього зсуву від 28 нм до 55 нм, тобто також майже у два рази.

Таким чином, через належний вибір параметрів та розмірів сенсорного пристрою можна досить суттєво підвищити його чутливість при детектуванні різновидів онкологічних захворювань.

ВИСНОВКИ

Проведено аналітичний огляд науково-технічної літератури з питань, які стосуються побудови, фізичних принципів функціонування та експлуатаційних характеристик біологічних сенсорів на основі одновимірних фотонних кристалів, тобто багатошарових періодичних структур.

Побудовано фізичну та математичну моделі сенсорної структури на основі Бреггівського резонатора для визначення показника заломлення аналіту, розташованого в дефектному шарі структури, тобто в порожнині резонатора. Математична модель побудована на основі добре відомого та апробованого матричного методу, що широко використовується для обчислення характеристик одновимірних фотонних кристалів.

Розрахунки спектральних характеристик сенсорної структури проведені із застосуванням системи комп'ютерної алгебри MathCAD.

Проаналізовано вплив параметрів фотонно-кристалічної структури (кількості періодів та ширини дефектного шару) на основні експлуатаційні характеристики біологічного сенсора.

ПЕРЕЛІК ДЖЕРЕЛ ПОСИЛАННЯ

1. Serajmohammadi S., Alipour-Banaei H., Mehdizadeh F. A novel proposal for all optical 1-bit comparator using nonlinear PhCRRs. *Photonics Nanostruct. Fundam. Appl.* 2019. Vol. 34, P. 19–23.
2. Parandin F. Ultra-compact and low delay time all optical half adder based on photonic crystals. *Opt Quant Electron.* 2023. Vol. 55, 398.
3. Schlenke P. Novel aspects in manufacture, storage, and transfusion of blood components. *Transfus. Med. Hemother.* 2019. Vol. 46 (4). P. 221–223.
4. Krupin O., Wang C., Berini P. Selective capture of human red blood cells based on blood group using long-range surface plasmon waveguides. *Biosens. Bioelectron.* 2014. Vol. 53. P. 117–122.
5. Borlongan C.V., Hadman M., Sanberg C.D., Sanberg P.R. Central nervous system entry of peripherally injected umbilical cord blood cells is not required for neuroprotection in stroke. *Stroke.* 2004. Vol. 35 (10), P. 2385–2389.
6. Marukian S., Jones C.T., Andrus L., Evans M.J., Ritola K.D., Charles E.D., Rice C.M., Dustin L.B. Cell culture-produced hepatitis C virus does not infect peripheral blood mononuclear cells. *Hepatology.* 2008. Vol. 48 (6), P. 1843–1850.
7. Muzykantov V.R. Drug delivery by red blood cells: vascular carriers designed by mother nature. *Expert Opinion.* 2010. Vol. 7. P. 403–427.
8. Bouzidi A., Bria D., Falyouni F., Akjouj A., L'éveque G., Azizi M., Berkhli H. A biosensor based on one-dimensional photonic crystal for monitoring blood glycemia. *Journal of Materials and Environmental Sciences.* 2017. Vol. 8. P. 3892–3896.
9. Hala J., El-Khozondar P., Mahalakshmi P., El-Khozondar J.R., Ramanujam N.R., Amirie I.S., Yupapin P. Design of one-dimensional refractive index sensor using ternary photonic crystal waveguide for plasma blood samples applications. *Physica E.* 2019. Vol. 111, P. 29–36.

10. Goyal A.K., Pal S. Design analysis of Bloch surface wave based sensor for haemoglobin concentration measurement. *Appl. Nanosci.* 2020. Vol. 10, P. 3639–3647.
11. Aly A.H., Mohamed D., Mohaseb M.A., El-Gawaad N.S.A., Trabelsi Y., Biophotonic sensor for the detection of creatinine concentration in blood serum based on 1D photonic crystal. *RSC Adv.* 2020. Vol. 10, P. 31765–31772.
12. Aly A.H., Zaky Z.A., Shalaby A.S., Ahmed A.M., Vigneswaran D., Theoretical study of hybrid multifunctional one-dimensional photonic crystal as a flexible blood sugar sensor. *Phys. Scr.* 2020. Vol. 95, 035510.
13. Abadla M.M., Elsayed H.A. Detection and sensing of hemoglobin using one-dimensional binary photonic crystals comprising a defect layer. *Appl. Opt.* 2020. Vol. 59, P. 418–424.
14. Malek C., Al-Dossari M., Awasthi S.K. et al. High performance biosensor composed of 1D defective photonic crystal for sensing and detection of distinguished blood components. *Opt Quant Electron.* 2023. Vol. 55, 196.
15. Aly A.H., Awasthi S.K., Mohamed A.M., Matar Z.S., Mohaseb M.A., Al-Dossari M., Tammam M.T., Zaky Z.A., Amin A.F., Sabra W. Detection of Reproductive Hormones in Females by Using 1D Photonic Crystal-Based Simple Reconfigurable Biosensing Design. *Crystals*, 2021. Vol. 11. 1533.
16. Panda A., Pukhrambam P.D., Wu F. et al. Graphene-based 1D defective photonic crystal biosensor for real-time detection of cancer cells. *Eur. Phys. J. Plus.* 2021. Vol. 136, 809.
17. Nitu K., Anshu D. V., Suneet K. A., Laxmi S., Arafa H. A. Tunable photonic bandgap and reflection phase shift properties of 1D binary photonic crystal consisting of double negative and magnetic cold plasma materials. *Phys. Plasmas.* 2022. Vol. 29(4). 042110.

18. Barnes N. P., Piltch M. S. Temperature-dependent Sellmeier coefficients and nonlinear optics average power limit for germanium. J. Opt. Soc. Am. 1979. Vol. 69. P. 178-180.
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.
20. Nayan M.F., Raihan M.A., Ahmed T. et al. High Sensitivity One-Dimensional Photonic Crystal Sensor Design for Waterborne Bacteria Detection. Sens Imaging, 2025. Vol. 26. 6.