

УДК 544.653.23; 535-92; 53.082.531

МОДЕЛИРОВАНИЕ ОПТИЧЕСКОГО БИОСЕНСОРА
НА ОСНОВЕ НАНОСТРУКТУРИРОВАННОГО АНОДНОГО ОКСИДА НИОБИЯ

Гога А.В.

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники,
Минск, Республика Беларусь, a.goga@bsuir.by

Аннотация: В работе проведено оптическое моделирование фотонного кристалла на основе наноструктурированного анодного оксида ниобия в качестве биосенсора биотина-стрептоидина и глюкозы в крови, дана оценка его эффективности, подобраны оптимальные морфологические параметры.

Ключевые слова: экспресс-анализ, FDTD-моделирование, отражение, 2D фотонный кристалл, массив нанопроводов, био-чип.

I. ВВЕДЕНИЕ

Использование наноструктурированных материалов для детектирования биомолекул позволяет добиться повышения эффективности анализа при снижении его стоимости. Одним из перспективных направлений «label-free» — являются биосенсоры на основе 2D фотонных кристаллов (ФК), созданных из массива наностолбиков. Принцип работы таких ФК заключается в смещении положения пика отражения при заполнении средой, содержащей биомолекулы, пространства между наностолбиками, что приводит к изменению показателя преломления в межстолбиковом пространстве [1, 2]. Минусом таких ФК, сформированных, как правило, на основе кремния и его диоксида, является использование технологии фотолитографии, что приводит к удорожанию технологии, а также при уменьшении шага решетки ФК повышает требования к оборудованию или вовсе делает создание таких наноструктур невозможным. Решением данной проблемы может быть использование самоорганизованных систем, таких как анодные наноструктурированные оксиды вентильных металлов, например, ниобия. Уже исследованы оптические свойства таких систем, обладающих исключительной термической стабильностью и химической инертностью. Для оптимизации морфологических и оптических свойств биосенсоров на их основе удобно использовать FDTD моделирование, что позволит сократить стадию экспериментального подбора оптимальных параметров ФК. Известно, что ФК на основе наноструктурированного анодного оксида ниобия обладает достаточной сходимостью результатов оптического симулирования и свойств реальных структур [3].

Таким образом, целью настоящей работы является оптическое моделирование ФК на основе наноструктурированного анодного оксида ниобия в качестве биосенсора биотина-стрептоидина и глюкозы в крови человека, дана оценка его эффективности, подобраны оптимальные морфологические параметры.

II. МЕТОДИКА МОДЕЛИРОВАНИЯ

Все характеристики были рассчитаны путем решения уравнений Максвелла с использованием метода конечной разности во временной области (FDTD) на базе программного комплекса Ansys Lumerical.

При создании модели ФК использовали следующие допущения:

1. Морфологические параметры массива наностолбиков ниобия были выбраны исходя из реальных получаемых структур при анодировании двухслойных систем Al/Nb в 0.4 М водных растворах щавелевой (первый тип) и малоновой (второй тип) кислот при плотности тока 6 мА/см².
2. В качестве подложки используется кремниевая пластина, так как это наиболее доступная подложка для напыления исходных систем Al/Nb.
3. Происходит полное заполнение биоактивной средой массива наностолбиков.
4. Чувствительность биосенсора определялась смещением главного пика отражения относительно его положения при заполнении пустот между наностолбиками ФК воздухом.
5. Индекс преломления биоактивных материалов принимали равным таковому для растворенных в крови человека биотина-стрептоидина и глюкозы [1].

Область симуляции составляла 1,5×1,5 мкм² в плоскости x – y и 0,7 мкм в направлении z – координаты. В качестве граничных условий области симуляции по x – y – z координатам выбраны идеально сочетающиеся слои (perfectly matched layers – PML). Минимальное количество слоев PML – 13. В качестве источника выступал дипольный источник излучения с углом падения 10° в диапазоне длин

волн 200–550 нм, который выбран исходя из доступного диапазона для спектрофотометра МС–121. Шаг вычисления составил 0,25 нм, время симуляции 1000 фс. Экран детектирования падающего излучения (пропускания) расположен по x – координате. Значения комплексного показателя преломления для оксида ниобия были взяты из открытых баз данных [4]. При построении модели ФК на основе массива наностолбиков оксида ниобия были использованы морфологические параметры реального наноструктурированного анодного оксида ниобия, который возможно сформировать анодированием двухслойной системы Al/Nb на кремнии. Методика формирования подобных наноструктур включает следующие основные этапы: анодирование верхнего слоя алюминия с формированием пористой матрицы оксида алюминия, которая задает морфологию массива наностолбиков оксида ниобия, реанодирование – на данном этапе происходит задание высоты наностолбиков, травление с целью удаления анодного оксида алюминия. В результате получается следующая структура наноструктурированного анодного оксида ниобия (снизу вверх): кремниевая подложка, оставшийся металлический подслой ниобия, сплошной оксидный слой и массив наностолбиков оксида ниобия. Итоговая структура для моделирования представлена на рис. 1.

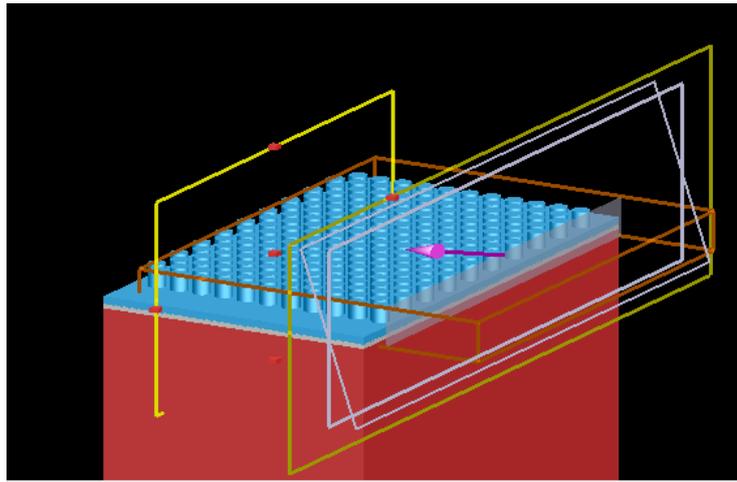
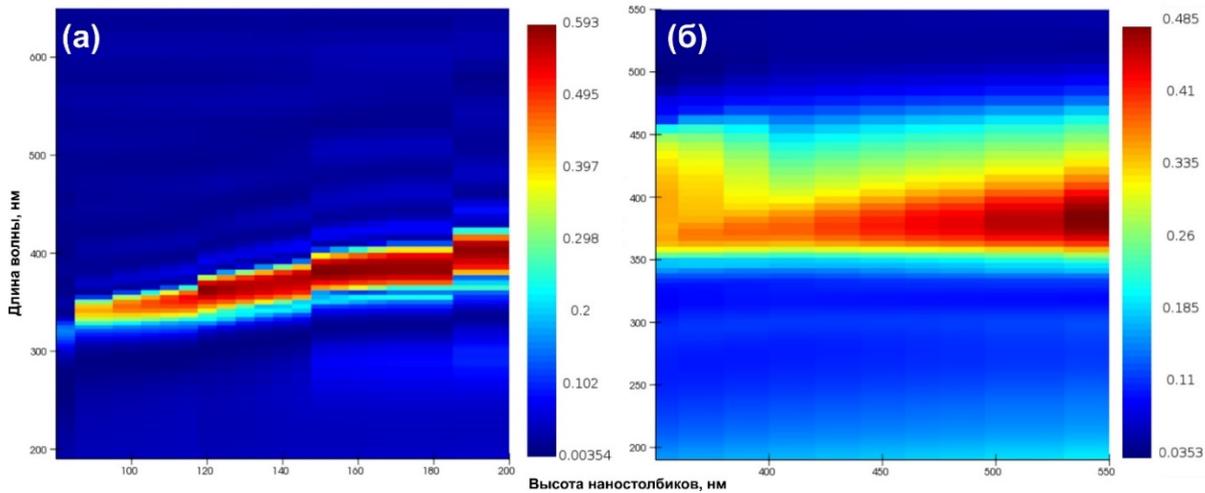


Рисунок 1. Полное изображение массива наностолбиков оксида ниобия, построенное для моделирования в среде программного комплекса Ansys Lumerical

III. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Для упрощения расчётов толщину сплошных слоев приняли постоянной и равной 30 нм для металлического слоя, а для сплошного слоя оксида ниобия равной 100 нм. Данное допущение было сделано исходя из того, что на кремниевой подложке проще получать структуры с остаточным металлическим слоем. Прежде, чем переходить к оптическому моделированию в средах с разным показателем преломления, был проведен подбор оптимальных морфологических параметров. Развертка параметров происходила по высоте наностолбиков оксида ниобия, т. к. это наиболее управляемый параметр. Диаметр и межстолбиковое расстояние для массива наностолбиков оксида ниобия принимали постоянными, упаковка ФК гексагональная. Первый тип наностолбиков соответствует структурам, получаемым в щавелевой кислоте, при этом в данном случае выбор морфологических параметров был сделан так, чтобы непосредственное расстояние между столбиками составило порядка 20 нм. Так как длина цепочки биотина-стрептовидина составляет 10 нм, то происходит полное заполнение межстолбикового пространства. Для первого типа наностолбиков межстолбиковое расстояние (между центрами соседних столбиков) и диаметр составили 77 нм и 27 нм, соответственно. Для второго типа ФК межстолбиковое расстояние и диаметр составили 180 нм и 80 нм, соответственно. Второй тип соответствует наностолбикам анодного оксида ниобия, получаемым в малоновой кислоте. На рис. 2 показано распределение интенсивности отражения в зависимости от высоты наностолбиков для выбранного диапазона длин волн. Для первого типа развертка показана без сплошных слоев, чистый ФК, без дополнительных слоев и подложки кремния. Видно, что при этом улучшается добротность спектра отражения, которая выше, чем для второго типа наностолбиков. Однако видно, при моделировании с дополнительными слоями, пик сильно «смазывается» и смещается в ультрафиолетовую область, что также будет показано ниже на рис. 3. Для второго типа наилучший спектр наблюдается для высоты столбиков в диапазоне длин волн 500–550 нм. Наблюдается следующая тенденция: чем выше наностолбики, тем лучше спектр отражения, однако для первого типа столбиков невозможно значительное увеличение высоты, так как при высоком аспектном соотношении повышается склонность к падению наностолбиков.



а – развертка по высоте для первого типа наностолбиков;
б – развертка по высоте для второго типа наностолбиков

Рисунок 2. Распределение интенсивности отражения в зависимости от высоты наностолбиков в диапазоне длин волн от 200 до 550 нм

На рис. 3 показан спектр отражения для двух типов ФК в средах с разным показателем преломления. Видно, что главный пик отражения для первого типа ФК, не позволяет его использовать для «label-free» биосенсора. Для второго типа ФК с высотой 550 нм, при выбранной морфологии пик отражения составил 0,46 отн. ед. на длине волны 386 нм. Для данного типа ФК было проведено оптическое моделирование для биотина-стрептовида и глюкозы в крови с разными концентрациями и соответствующими индексами преломления среды. Для биотина-стрептовида значения показателя преломления составили 1,45 и 1,46, а для глюкозы 1,337 и 1,339. При изменении показателя преломления до 1,46 смещение пика составило более 50 нм, при 1,339 до 40 нм. При незначительном изменении показателя преломления, детектирование смещения пика возможно только при использовании спектрофотометра. Однако смещение пика отражения на 50 нм и переход максимума в видимый диапазон допускает визуальное наблюдение изменения цвета на поверхности при заполнении межстолбикового пространства. Конечно, применение массива наноструктурированного анодного оксида ниобия в качестве оптического биосенсора биотина-стрептовида и глюкозы практически нецелесообразно. Однако полученный результат позволяет допустить применение данной структуры для детектирования олигонуклеотидов и вирусов путем иммобилизации биоспецифичных групп на поверхности и придания ей тем самым исключительных селективных свойств.

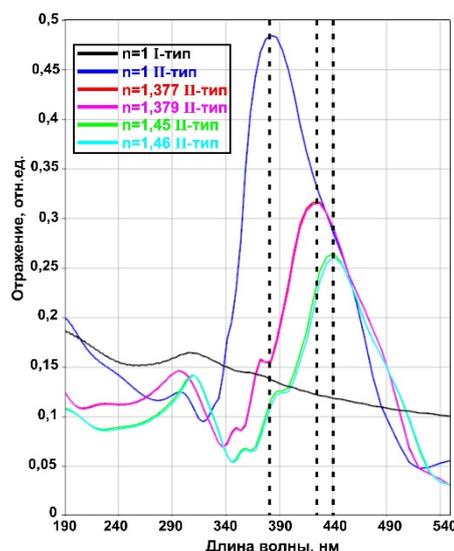


Рисунок 3. Спектральные характеристики биосенсора первого и второго типа при заполнении средами с показателями преломления 1,337 и 1,339 для глюкозы, 1,45 и 1,46 для биотина-стрептовида

IV. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе путем оптического моделирования фотонного кристалла на основе наноструктурированного анодного оксида ниобия была обоснована возможность его использования в качестве биосенсора биотина-стрептоведина и глюкозы. Получены следующие основные результаты:

- выбранная морфология для фотонного кристалла на основе наноструктурированного анодного оксида ниобия, условно сформированного в щавелевой кислоте с расстоянием между столбиками 25 нм, не позволяет получить биосенсор с достаточной чувствительностью;
- фотонный кристалл на основе наноструктурированного анодного оксида ниобия, условно сформированный в малоновой кислоте, с высотой наностолбиков 550 нм может быть использован в качестве биосенсора;
- главный пик отражения биосенсора составил 0,46 отн. ед. на длине волны 386 нм, смещение пика отражения при заполнении средой с индексами преломления 1,339 и 1,46 составили 40 и 50 нм, соответственно.

БЛАГОДАРНОСТЬ

Исследование осуществлено при финансовой поддержке Государственной программы научных исследований «Конвергенция-2025» по теме 1.10.7 «Разработка процессов управляемого воспроизводимого формирования высокоупорядоченных иммобилизирующих наноструктур методами анодного окисления для химической модификации».

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Yashaswini, P. R. Performance analysis of photonic crystal based biosensor for the detection of bio-molecules in urine and blood / P. R. Yashaswini; H. N. Gayathri; P. C. Srikanth // Mater. Today Proc. 2023, Vol. 80, Part 3. P. 2247–2254.
- [2] Label-free detection of DNA hybridization using nanopillar arrays based optical biosensor / J. Chen [et.al.] // Sensors and Actuators B: Chemical. 2013. V. 194. P. 10–18.
- [3] Pligovka, A. Properties of Porous Alumina Assisted Niobia Nanostructured Films—Designing 2-D Photonic Crystals Based on Hexagonally Arranged Nanocolumn / A. Pligovka, A. Poznyak, M. Norek // Micromachines. 2021. Vol. 12, No 6. Art. No 589.
- [4] Refractive index [Electronic Resource] // Mode of access: <https://refractiveindex.info> // Date of access: 01.10.2024.

MODELING OF OPTICAL BIOSENSOR BASED ON NANOSTRUCTURED ANODIC NIOBIUM OXIDE

A. Hoha

Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, Minsk, Republic of Belarus,
a.goga@bsuir.by

Abstract: Optical stimulation of photonic crystal based on nanostructured anodic niobium oxide as a biosensor of biotin-streptavidin and blood glucose was performed. Efficiency of biosensor was evaluated, and optimal morphological parameters were obtained.

Keywords: label-free, FDTD modeling, 2D-photonic crystal, reflection, arrays of nanocolumns, bio-chip.