stosunek kontrastu do szumu jako kryterium jakości BIOsensorów wykorzystujących zjawisko rezonansu plazmonowego

w metalicznych nanocząstkach

Teresa Staniszewska\*, Maciej Szkulmowski, Seweryn Morawiec

# Instytut Fizyki, Uniwersytet Mikołaja Kopernika, ul. Grudziądzka 5, 87-100 Toruń

\*autor korespondencyjny: teresa@doktorant.umk.pl

Zjawisko zlokalizowanego powierzchniowego rezonansu plazmonowego (*Localized Surface Plasmon Resonance – LSPR*) zachodzące w nanoczastkach metalicznych wykazuje duży potencjał w konstrukcji biosensorów zdolnych do wykrywania pojedynczych biomolekuł. Dzięki temu, że widmo rezonansowe nanocząstki zmienia się na skutek zmiany współczynnika załamania w jej najbliższym otoczeniu, możliwa jest detekcja molekuł niewykazujących luminescencji podczas przyłączania do nanocząstki.

Dla zwiększenia czułości biosensorów niezbędna jest optymalizacja kształtu i wymiarów stosowanych nanocząstek. Tradycyjnie używane kryteria jakości (*Figure of Merit – FOM*) nie uwzględniają występowania szumu, a jedynie parametry widma: szerokość i przesunięcie rezonansu, lub względną zmianę przekroju czynnego. W niniejszej pracy, wprowadziliśmy alternatywne, uniwersalne kryterium jakości - stosunek kontrastu do szumu (*contrast-to-noise ratio - CNR*). Przez kontrast należy tu rozumieć zmianę mierzonego sygnału na skutek przyłączenia pojedynczej molekuły analitu do nanocząstki. Założyliśmy, że detekcja jest ograniczona szumem śrutowym.

Przy zastosowaniu przybliżenia dyskretnych dipoli (*discrete dipole approximation*) przeanalizowaliśmy zmiany widma złotych nanoprętów (*nanorod*) na skutek przyłączenia pojedynczej molekuły analitu w środowisku odpowiadającym warunkom eksperymentalnym. Zbadaliśmy nanopręty o szerokości 10-40 nm i stosunku długości do szrokości (*aspect ratio*) od 2 do 5. Nanopręty pokryte są dielektryczną otoczką symulująca funkcjonalizację i pasywację powierzchni, oraz umieszczone na granicy wody i szkła. Analit modelowany jest jako dielektryczna kulka o średnicy 5 nm.

 Znaleźliśmy optymalne wymiary dla biosensorów wykorzystujących rozpraszanie (pomiary przesunięcia widma oraz pomiary natężenia rozpraszania dla stałej długości fali na zboczu widma) oraz absorpcję (metoda fototermiczna). W przypadku źródła światła o stałej, niskiej mocy optymalne rozmiary nanopręta są zbliżone dla wszystkich wyżej wspomnianych metod i wynoszą ok. 20 x 80 nm. Przy założeniu wysokiej mocy, ograniczonej przez wzrost temperatury nanocząstki o 1⁰C, najkorzystniejsze wymiary dla przypadku rozpraszania pozostają podobne (17 x 71 nm), natomiast dla metody fototermicznej przyjmują wartość 10 x 41 nm.

 Dodatkowo dla nanopręta o wymiarach 20 x 80 nm przeanalizowaliśmy wpływ parametrów analitu i otoczki na CNR. Właściwościami o dużym znaczeniu okazały się być wielkość, kształt, położenie i współczynnik załamania analitu oraz grubość otoczki.