

基于粒子群优化的生物传感器灵敏度特性分析

陈 颖^{1,2} 王文跃^{1,2} 毕卫红³

¹ 燕山大学电气工程学院自动化仪表系, 河北 秦皇岛 066004
² 燕山大学测试计量技术及仪器河北省重点实验室, 河北 秦皇岛 066004
³ 燕山大学河北省特种光纤与光纤传感重点实验室, 河北 秦皇岛 066004

摘要 为了提高空气孔结构光子晶体生物传感器的归一化透射率,利用粒子群优化(PSO)算法对其结构参数进行多维空间全局优化。以散射空气孔、耦合空气孔和内部空气孔的半径作为被优化变量,并根据位置—速度更新公式进行优化;进而分别将光子晶体全芯片、耦合空气孔和内部空气孔作为传感区域,对优化后的结构进行传感特性分析。结果表明,优化后,该传感器的归一化透射率由 54% 提高到 92%;在传感特性分析中,其谐振波长的漂移量与生物样本折射率的变化成近似线性的关系,且将内部空气孔作为传感区域时的灵敏度要明显高于将全芯片和耦合空气孔作为传感区域的灵敏度,可达 950 nm/RIU。该结构的优化方法对其他功能器件或集成光波导器件的设计和具有一定的指导意义。

关键词 传感器;光子晶体;粒子群优化;归一化透射率;灵敏度

中图分类号 O436 **文献标识码** A **doi**: 10.3788/CJL201441.0614002

Sensitivity Property Analysis of Biosensors Based on Particle Swarm Optimization

Chen Ying^{1,2} Wang Wenyue^{1,2} Bi Weihong³

¹ Department of Automation Equipment, College of Electrical Engineering, Yanshan University, Qinhuangdao, Hebei 066004, China

² Hebei Province Key Laboratory of Test/Measurement Technology and Instrument, Yanshan University, Qinhuangdao, Hebei 066004, China

³ Hebei Province Key Laboratory of Special Optical Fiber and Fiber Sensing, Yanshan University, Qinhuangdao, Hebei 066004, China

Abstract To improve the normalized transmission of photonic crystal biosensors based on the air-pore structure, the particle swarm optimization algorithm has been adopted to optimize the structure parameters globally in the multi-dimensional space. The optimization process has been performed according to the position-velocity updating equation, in which the coupling structure combining the ring cavity with the line waveguide is regarded as the optimized object, and the scattering air pores, the coupling air pores and the inner air pores are regarded as the optimized variables. Then the sensing property has been analyzed using the optimized structure, in which the coupling area and the inner area have been adopted as the sensing region respectively. The simulation results show that the normalized transmission can be increased from 54% to 92% after optimization and the relationship between shift of the resonant wavelength and the change of the refractive index for the biological sample is linear. And the sensitivity of the inner air pores as the sensing region is higher than those of the general chip and the coupling air pores with the sensitivity more than 950 nm/RIU. The structure optimization method can provide effective guidance for other functional devices and integrated optical waveguide devices.

Key words sensors; photonic crystal; particle swarm optimization; normalized transmission; sensitivity

OCIS codes 280.4788; 280.1815; 160.5298; 230.3990; 230.3120

收稿日期: 2013-11-28; **收到修改稿日期**: 2014-01-01

基金项目: 国家 973 计划(2010CB327801)、国家自然科学基金(61201112, 61172044)、河北省自然科学基金(F2013203250, F2012203169)、中国博士后科学基金(2012M510765)

作者简介: 陈 颖(1980—),女,博士,副教授,主要从事光子晶体应用技术等方面的研究。

E-mail: chenying@ysu.edu.cn

本文电子版彩色效果请详见中国光学期刊网 www.opticsjournal.net

1 引言

光子晶体是折射率周期性调制的电介质结构,由于光子禁带的存在,某些频率的光在光子晶体中的传播被禁止。通过在完整光子晶体中引入缺陷,可以在光子禁带中打开允带,从而调控光子的传播行为。目前,光子晶体在光通信和光传感领域已被广泛研究和应用,例如光滤波器^[1],复用器/解复用器^[2],用于各种物理量测量的传感器^[3],等等。其优点是结构紧凑,便于集成,抗电磁干扰能力强,可实时监控,在测量过程中可重复使用,成本低,并具有一定的灵敏度和 Q 值^[4]。

光子晶体谐振腔与线波导结构是光子晶体缺陷的典型出现形式,谐振腔与线波导相结合构成的耦合结构已广泛地应用于生物样本折射率探测的传感结构中。其中,线缺陷作为输入输出波导,谐振腔完成对特定波长的选择,通过两者的结合来完成对谐振波长的选频输出,并实时监控待测物理量的变化信息。Morgan 等^[5]研制了一种用于检测明胶蛋白质控制释放系统中的生长因子的光子晶体生物传感器,来确定生理条件下的蛋白质与载体结合数量。Zlatanovic 等^[6]对于蛋白质浓度及反应动力学的监测研制了一种光子晶体微腔传感器。这种超微型实时无标记检测光子晶体传感器的活性表面可以进行重复检测,提高了器件的利用率。Pisanello 等^[7]采用提高检测灵敏度、提高信噪比和并行分析的方法来提高读出 DNA 芯片的性能。通过在 DNA 芯片中插入光子晶体微腔对荧光标记进行有效增强,从而提高检测的灵敏度,且可以对少量的目标生物分子进行检测。目前,二维光子晶体生物传感器的设计大多采用空气孔结构,其中谐振腔的设计是通过添加或移除一定数目的空气孔,或改变某些空气孔的结构参数(包括尺寸,形状和折射率等)来实现^[8]。然而,其参数的选择往往是随机进行的,因此很难获得理想的传输特性。为了克服这一不足,在传感器结构参数的设计中引入全局优化算法是十分必要的^[9-11]。

遗传算法和粒子群优化(PSO)算法是目前应用较广泛的全局优化算法,对比发现,PSO 算法没有交叉和变异操作,从而降低了算法结构的复杂度,保证了较高的收敛速度,并具有对多维空间进行全局优化的能力^[12]。因此,本文采用 PSO 算法对二维光子晶体生物传感器的谐振腔结构参数进行优化,以环形腔结构中的散射孔、耦合空气孔和内部空气孔的半径为被优化变量,结合时域有限差分法

(FDTD)进行数值模拟,实现了对选频波长归一化透射率的全局寻优。进而应用优化得到的结构,在其传感区域中的不同位置填充待测样本,当样本的组分或者是浓度发生变化时,其折射率将发生变化,导致透射谱中谐振波长将发生漂移,从而得出谐振波长与折射率的变化关系,并可对传感器结构的折射率探测灵敏度进行分析。该方法也可在其他功能器件或集成光波导器件的结构优化设计中进行推广和应用。

2 光子晶体环形腔结构的传输特性分析

提出的二维光子晶体生物传感器结构如图 1 所示,该结构由环形腔和线波导耦合而成。该光子晶体结构中,背景材料为单晶硅,其折射率 $n=3.4$,空气孔半径 $r=0.2a$,折射率为 1,其中 a 为晶格常数。考虑到实际可操作性,采用 19×17 的空气孔分布模型进行数值模拟。以 5×5 的环形腔结构作为谐振腔,由线波导构成输入输出负载通道,以高斯脉冲信号光由 A 端口输入,经过环形腔的耦合作用,其输出的光信号由 B 端口输出。

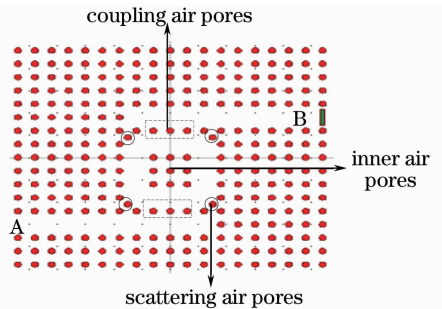


图 1 传感器结构示意图

Fig. 1 Schematic diagram of sensor structure

结合 FDTD 法对光子晶体环形腔结构的传输特性进行研究,分析光信号经过缺陷态光子晶体结构的传输特性。设定完全匹配边界层(PML)作为吸收边界条件,在 X 和 Y 轴上的空间步长分别是 Δx 和 Δy ,时间步长为 Δt 。为了满足解收敛性和稳定性,时间步长 Δt 必须满足 Courant 稳定性条件,即 $\Delta t \leq 1/c \sqrt{1/(\Delta x)^2 + 1/(\Delta y)^2}$,其中 c 为真空中的光速,计算时取单个原胞,进行 32×32 个网格分割离散。

优化之前,端口 B 输出的光谱如图 2 所示。可以看出,B 端口输出谐振中心波长为 1580.1 nm,归一化透射率为 54%,相对较低。该结构中,散射孔、耦合空气孔和内部空气孔的结构参数都会对其传输特性产生影响,因此需要对三个参数进行同时优化。

PSO 算法适用于多维空间变量的全局优化,同时又具有精度高,收敛速度快等诸多优点。下面将详细阐述其参数优化的过程。

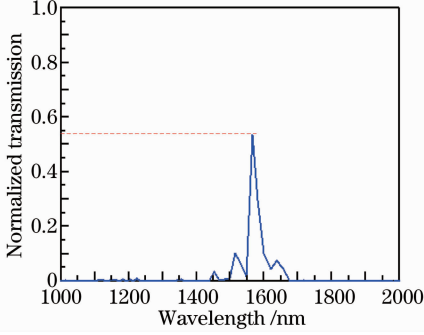


图 2 优化前 B 端口的归一化传输透射谱

Fig. 2 Normalized transmission spectrum of port B before optimization

3 PSO 算法用于传感器结构参数优化

系统初始化为的一组随机解,通过迭代搜寻最优

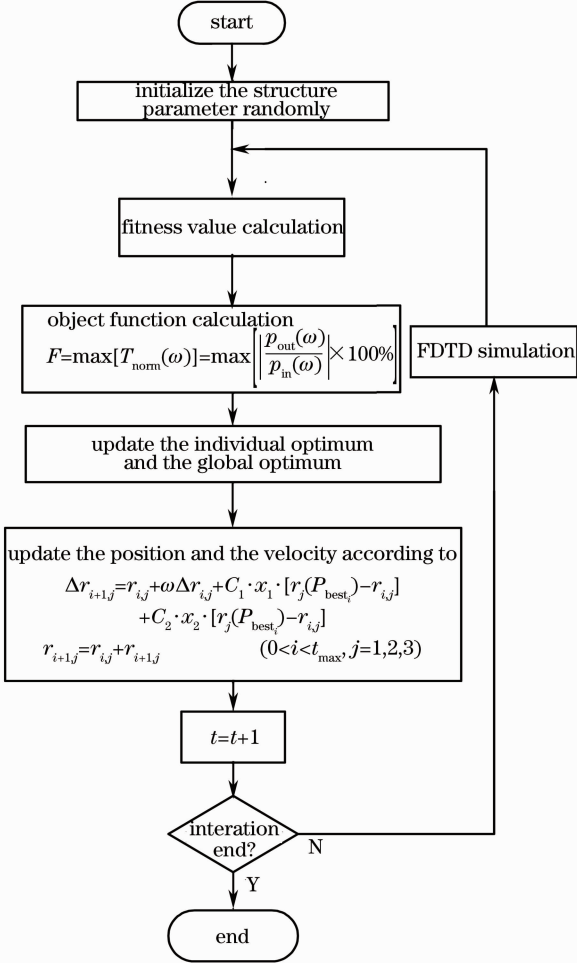


图 3 PSO 用于结构参数优化的算法流程图

Fig. 3 Algorithm flowchart of PSO for structure parameters optimization

值,通过适应度函数来评价解的品质。在传感器结构的禁带范围内(即归一化频率 a/λ 为 0.28726~0.42038 之间),通过算法全局搜索,提高该结构的传输效率。随机初始化的每个粒子的位置均为三维变量,因此粒子群维度为 3。其中,散射孔半径定义为 r_1 ,其初始随机值为 $0 \leq r_1 \leq \sqrt{2}a/2 - r$;耦合空气孔半径定义为 r_2 ,内部空气孔半径定义为 r_3 ,其初始随机值分别为 $0 \leq r_2, r_3 \leq a/2$ 。优化过程如图 3 所示。

以下为 PSO 算法流程:

1) 参数初始化。对传感器结构中散射孔,耦合空气孔和内部空气孔的位置进行随机初始化。其中, $0 \leq r_1 \leq \sqrt{2}a/2 - r, 0 \leq r_2, r_3 \leq a/2$ 。

2) 计算粒子适应度值(归一化透射率)。采用 FDTD 对该结构进行数值模拟,得到光波在该结构参数下的传输光谱,从而得到其归一化透射率 $T_{\text{norm}}(\omega)$;

3) 计算目标函数值。

$$F = \max[T_{\text{norm}}(\omega)] = \max\left[\left|\frac{p_{\text{out}}(\omega)}{p_{\text{in}}(\omega)}\right| \times 100\%\right], \quad (1)$$

式中 $T_{\text{norm}}(\omega)$ 是输出频率为 ω 对应的归一化透射率, $p_{\text{out}}(\omega)$ 和 $p_{\text{in}}(\omega)$ 可分别由 FDTD 的数值模拟过程得出;

4) 每一次迭代中,粒子的速度即为半径的变化量,位置即为迭代后所得的半径。每一个粒子的位置-速度更新将依据

$$\begin{aligned} \Delta r_{i+1,j} &= r_{i,j} + \omega \Delta r_{i,j} + C_1 \cdot x_1 \cdot [r_j(P_{\text{best}_i}) - r_{i,j}] \\ &\quad + C_2 \cdot x_2 \cdot [r_j(G_{\text{best}_i}) - r_{i,j}] \end{aligned} \quad (2)$$

$$r_{i+1,j} = r_{i,j} + \Delta r_{i+1,j} \quad (0 < i < t_{\text{max}}, j = 1, 2, 3), \quad (3)$$

式中 $\Delta r_{i,j}$ 和 $\Delta r_{i+1,j}$ 分别为粒子的当前和下一次迭

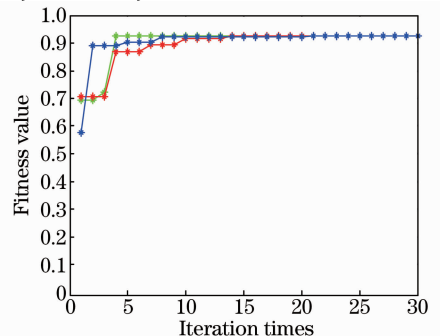


图 4 粒子适应度值的收敛过程

Fig. 4 Convergence procedure of the fitness of particles

次后的速度(半径变化量), $r_{i,j}$ 和 $r_{i+1,j}$ 分别为粒子的当前和下一次迭代后的位置(半径), $r_j(P_{best_j})$ 和 $r_j(G_{best_j})$ 分别是迭代到当前个体最优和全局最优的位置, C_1 和 C_2 是学习因子, x_1 和 x_2 是在 $[0,1]$ 之间的随机常数;

5) 根据适应度值进行复制。若满足终止条件, 结束迭代, 否则返回第 3) 步, 将每一次迭代得到的粒子半径重新带入光子晶体环形腔结构, 进行数值

模拟, 从而重新得到归一化透射率 $T_{norm}(\omega)$, 进而更新适应度值, 进行下一次迭代直到满足条件。

依据如上优化过程进行结构参数优化, 迭代 23 次以后, 当 $r_{scatterer} = 1.1 r$, $r_{coupling} = 0.85 r$ 和 $r_{inner} = 0.8 r$ 时, 最大适应度值为 92%, 其收敛过程如图 4 所示。其谐振中心波长为 1580.1 nm 的 B 端口输出的归一化透射率如图 5 所示, 其归一化透射率比优化前提高了 38%。

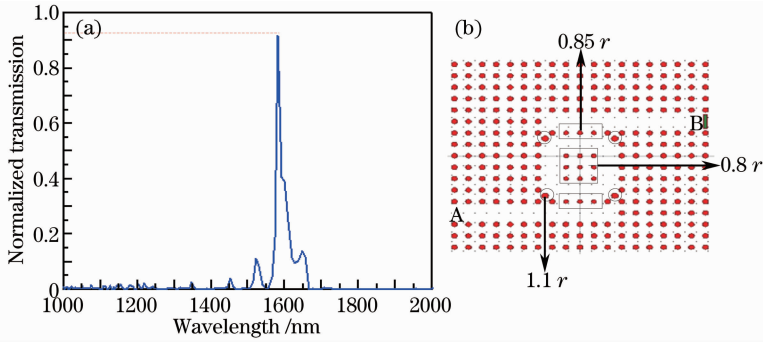


图 5 (a) 优化后的 B 端口归一化透射谱及 (b) 对应的传感器结构

Fig. 5 (a) Normalized transmission spectrum in port B after optimized and (b) corresponding sensor structure

4 传感灵敏度分析及对比

生物传感器需要对低浓度的生物样本实现检测, 因此灵敏度是衡量传感器性能的一个重要指标。利用优化后的光子晶体作为传感单元, 基于其禁带特性, 利用谐振腔和线波导的耦合作用实现折射率的传感。该结构适用于极少量样本的折射率测量, 可实现对样本折射率信息的动态监测。由传感部分输出的光信号通过光谱分析仪得到输出光信号的谐振波长。检测完毕后, 使用磷酸盐缓冲液冲洗传感器探头表面, 从而使检测用的传感探头基片表面可重复使用, 从而降低检测成本。下面分别研究将该传感器的不同位置作为传感区域的灵敏度特性, 探寻对低浓度生物样本实现高灵敏度检测的理想方案。

4.1 以全芯片作为传感区域

将待测溶液填充进入全芯片表面, 以高斯脉冲光信号作为输入光源。如图 6 所示, 样本浓度变化导致其折射率变化, 折射率分别为 1.35、1.45、1.55 时, 且步长为 $\Delta n = 0.1$ 时, 在归一化的传输透射谱中, 谐振波长将发生漂移, 其谐振波长分别为 1451.2、1634.7、1738.1 nm, 与其相对应的归一化透射率分别为 70%、58%、52%。可以看出, 当折射率变化量增大到一定值时(即步长 Δn 足够大时), 其相对应的谐振波长才会产生漂移; 且随着样本溶液折射率的增大, 其谐振波长向长波长方向漂移, 谐

振波长漂移量与样本折射率变化量之间是非线性关系。而且, 随着空气孔中填充样本折射率的增大, 其与背景折射率的差值减小, 使该结构参数下的光子禁带变窄, 信号光的色散增强, 导致透射率均较低。

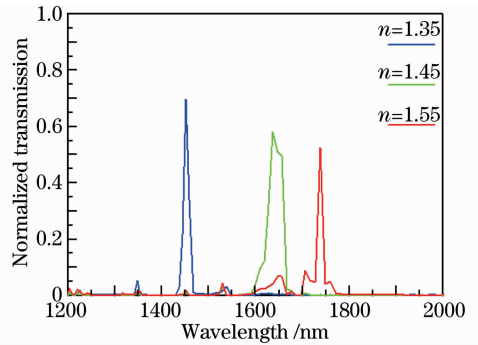


图 6 全芯片上的折射率变化的归一化透射谱

Fig. 6 Normalized transmission spectrum with the change of refractive index for full-chip

通常, 生物传感器需要对小分子等低浓度的生物样本实现检测, 因此高灵敏度特性是衡量传感器性能的一个重要指标, 这种以全芯片作为传感区域的检测方式存在探测灵敏度低和传输效率低等不足。同时, 当面对待测样本量有限的情况时, 该种检测方式在应用领域更加具有局限性。因此, 下面将分别以谐振腔中的耦合空气孔和内部空气孔作为传感区域进行样本折射率检测。

4.2 以耦合空气孔作为传感区域

以耦合空气孔作为传感区域是因为其位于输入/输出波导和环形谐振腔之间,其折射率的变化将影响传感器的输出特性。采用微孔板技术,将待测样本用点样仪注入到耦合空气孔中,如图 7 所示,当样本浓度变化,耦合孔的折射率发生变化,当其折射率从 1.33 增大到 1.5,且步长为 $\Delta n=0.04$ 时,在归一化的传输透射谱中,谐振波长将发生漂移,其谐振波长分别为 1436.7、1445.5、1453.0、1460.6 nm,与其相对应的归一化透射率分别为 90%、87%、80%、74%。可以看出,随着样本溶液折射率的增大,相对应的谐振波长向长波长方向漂移,且透射率逐渐降低。应用插值多项式拟合法,得出样本折射率变化和谐振波长漂移量之间的关系,如图 8 所示。可以看出,当样本溶液的折射率在 1.33 和 1.5 之间变化时,其谐振波长漂移量与样本折射率变化成线性关系,其探测灵敏度约为 190 nm/RIU。

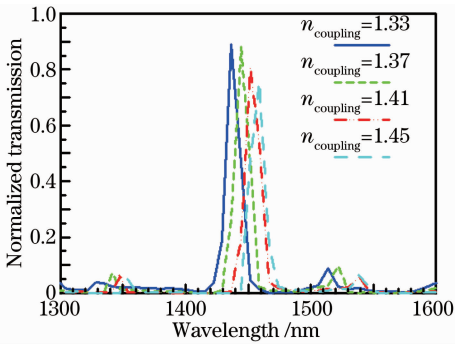


图 7 耦合空气孔折射率变化的归一化透射谱
Fig. 7 Normalized transmission spectrum with the change of refractive index for coupling air pores

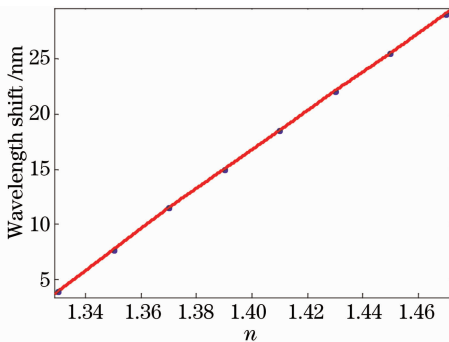


图 8 谐振波长漂移量与折射率变化的关系曲线
Fig. 8 Relationship curve between the resonant wavelength shift with refractive index change

4.3 以内部空气孔作为传感区域

以传感器结构中的内部空气孔作为传感区域,监测样本折射率从 1.33 增加到 1.5 过程中的归一化传输透射谱。当折射率变化步长为 $\Delta n=0.04$

时,谐振波长将随之发生漂移,如图 9 所示,绿色、红色和蓝色输出的谐振波长曲线,谐振波长分别为 1452.8、1582.6、1619.8、1657.0 nm,相对应的归一化透射率分别为 97%、89%、80%、71%。可以得出,随着样本溶液的折射率增大,谐振波长也向长波长方向漂移,且透射率逐渐降低。通过插值多项式拟合,得出其折射率变化和谐振波长漂移量之间的关系,如图 10 所示。可以看出,当样本溶液的折射率在 1.33~1.37 之间时,谐振波长有些浮动,但在 1.37 到 1.50 之间时二者基本成线性关系。而且当样本溶液的折射率变化量为 $\Delta n=0.02$ 时,谐振波长漂移量在 19 nm 左右,即其探测灵敏度约为 950 nm/RIU,远高于以耦合空气孔作为传感区域的情况。同时还可以发现,采用 PSO 之后光子晶体环形腔滤波结构来进行传感实验,不仅具有较高的灵敏度,其传输透射率有了较大的提高,从而便于分析检测。

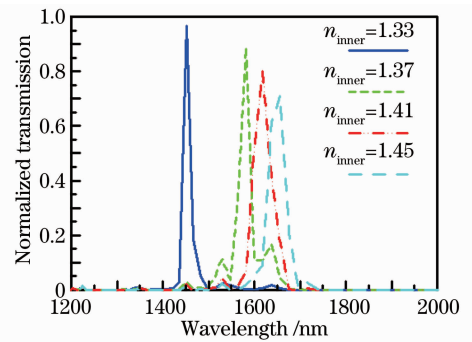


图 9 内部空气孔折射率变化时的归一化透射谱
Fig. 9 Normalized transmission spectrum with the resonant change of refractive index for inner air pores

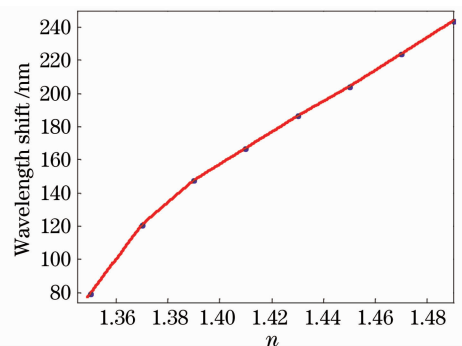


图 10 谐振波长漂移量与折射率的关系曲线
Fig. 10 Relationship curve between the wavelength shift with refractive index

5 结 论

采用粒子群算法对基于环形腔和线波导耦合结构的光子晶体生物传感器结构进行优化,克服了传

传感器结构参数选择的随机性,将散射空气孔、耦合空气孔和内部空气孔的半径作为被优化变量,利用PSO在多维空间进行全局搜索的能力,实现对传输特性的优化,使归一化传输透射率由54%提高到92%。对优化之后的传感器结构进行传感灵敏度分析,分别将耦合空气孔和内部空气孔作为传感区域,结果表明谐振波长的漂移与生物样本折射率的变化成近似线性的关系,且将内部空气孔作为传感区域时的灵敏度要明显高于将耦合空气孔作为传感区域的灵敏度,最小可达950 nm/RIU。该环形谐振腔与线波导相耦合的传感器结构紧凑,灵敏度高,易集成,在进一步的工作中,可在传输特性允许的范围内进行多通道传感系统的设计,避免了机械调节可能带来的误差,可为高通量实时监测提供一种行之有效的方法。

参 考 文 献

- Jiang Junzhen, Qiang Zexuan, Xu Xiaofu, *et al.*. Air-hole type photonic crystal add-drop filters based on total-internal-reflection ring resonators[J]. Chinese J Lasers, 2012, 39(5): 0505001.
蒋俊贞, 强则焯, 许晓赋, 等. 基于内全反射微环空气孔型光子晶体光分插滤波器[J]. 中国激光, 2012, 39(5): 0505001.
- Chen Zhiyong, Hao Xiaolong, Zheng Yanmin, *et al.*. Large-angle polarization-independent broadband filters based on silicon photonic crystal slabs [J]. Chinese J Lasers, 2013, 40(3): 0305002.
陈志勇, 郝小龙, 郑彦敏, 等. 大角度偏振无关硅膜光子晶体宽带滤波器[J]. 中国激光, 2013, 40(3): 0305002.
- Yang Chunyun, Xu Xuming, Ye Tao, *et al.*. The modulation of a novel photonic crystal ring resonator filter[J]. Acta Phys Sin, 2011, 60(1): 017807.
杨春云, 徐旭明, 叶涛, 等. 一种新型可调制的光子晶体环形腔滤波器[J]. 物理学报, 2011, 60(1): 017807.
- 张阿平, 时尧成, 何赛灵. 新型光子晶体结构及器件制备技术研究[J]. 激光与光电子学进展, 2009, 46(2): 39-40.
- Morgan A W, Chan L L, Urkmez A S, *et al.*. Detection of growth factor binding to gelatin and heparin using a photonic crystal optical biosensor[J]. Materials Science and Engineering: C, 2010, 30(5): 686-690.
- Zlatanovic S, Mirkarimi L W, Sigalas M M, *et al.*. Photonic crystal microcavity sensor for ultracompact monitoring of reaction kinetics and protein concentration[J]. Sensors and Actuators B: Chemical, 2009, 141(1): 13-19.
- F Pisanello, L Martiradonna, P P Pompa, *et al.*. Parallel and high sensitive photonic crystal cavity assisted read-out for DNA-chips[J]. Microelectronic Engineering, 2010, 87(5): 747-749.
- P Pottier, L Shi, Y A Peter. Determination of guided-mode resonances in photonic crystal slabs[J]. J Opt Soc Am B, 2012, 29(1): 109-117.
- Deng Dapeng, Cao Dongdong, Liao Xiaomin, *et al.*. Design and realization of an all-optical signal optimization structure [J]. Chinese J Lasers, 2013, 40(6): 0605008.
邓大鹏, 曹东东, 廖晓闽, 等. 一种全光信号优化结构的设计与实现[J]. 中国激光, 2013, 40(6): 0605008.
- Li H P, Jiang L Y, Jia W, *et al.*. Genetic optimization of two-dimensional photonic crystals for large absolute band-gap [J]. Optics Communications, 2009, 282(14): 3012-3017.
- Jia W, Jiang L Y, Zheng G G, *et al.*. Broad omnidirectional high-precision filters design using genetic algorithm[J]. Optics & Laser Technology, 2010, 42(2): 382-386.
- 沈艳, 郭兵, 古天祥. 粒子群优化算法及其与遗传算法的比较[J]. 电子科技大学学报, 2005, 34(5): 696-699.

栏目编辑: 韩峰