arXiv:2611.30614v1 [physics.optics] 23 Nov 2026

基于高度可调谐性 (Ti,Zr)N_x 的 MIM等离激元传感器，用于多领域生物、化学和物理传感

Mohammad Abrar Kabir[a],*, Aosaf Jarif Siddiquee[a], Abdullah Taharat[a], A. K.M. Rakib[a] 和 RakibulHasan Sagor[a]

[a]De电气与电子工程系，伊斯兰科技大学 (IUT)，加济布尔-1704，孟加拉国

文章信息

关键词：金属-绝缘体-金属 (MIM) 等离激元传感器 三元氮化物 表面等离激元极化激元 (SPPs) 有限元法 (FEM) 生物传感 一氧化碳2 气体检测

摘 要

金属-绝缘体-金属（MIM）等离激元折射率（RI）传感器因能够实现无标记实时分析物检测而备受关注；然而，这类传感器依赖金、银等贵金属，因而在可调谐性、热稳定性和CMOS工艺兼容性方面受到根本限制。本研究提出一种新型MIM等离激元折射率传感器，其结构采用嵌入圆形纳米棒的方形环形谐振器，并使用三元氮化物 $(Ti,Zr)N_x$ 作为等离激元材料，这是该材料首次应用于MIM传感平台。与文献报道的二元氮化物及其他替代等离激元材料相比，$(Ti,Zr)N_x$ 具有更广泛的成分可调谐范围，能够更灵活地调控光学响应，同时完全兼容CMOS工艺。我们在广泛的生物传感和理化分析物场景中验证了该传感器，包括用于糖尿病评估的葡萄糖监测、涵盖四个严重程度等级的基于血红蛋白的贫血分类、对五种主要血液成分的同步区分，以及对六种组织类型的癌细胞识别。在物理和化学传感方面，该结构实现了6.158 nm/MPa的气压灵敏度，且热交叉灵敏度可忽略不计；通过聚六亚甲基双胍（PHMB）功能化，其一氧化碳2 检测灵敏度达到330.12皮米/百万分率，是文献中同类结构报道的最高值。所提出的传感器最大折射率灵敏度为2146.496 nm/RIU，检测限为 4.669×10^{-7} RIU，性能优于此前报道的CMOS兼容等离激元折射率传感器。重要的是，与光学特性固定的二元氮化物或贵金属不同，$(Ti,Zr)N_x$ 能够通过成分控制实现广泛的等离激元可调谐性，而现有二元或单元素等离激元材料体系本身无法具备这种灵活性。

1. 引言

表面等离激元极化激元（SPPs）是沿介电介质与自由载流子浓度较高的材料之间界面传播的电磁波，其场振幅会随着远离界面而呈指数衰减 [1]。SPPs 尤为引人注目的特性在于能够突破光的经典衍射极限，从而实现亚波长尺度上的电磁能量约束与操控 [2, 3]。这一能力推动了包括逻辑门在内的广泛纳米尺度光子器件的发展 [4],解复用器 [5], 分束器 [6], 马赫-曾德尔干涉仪[7], 压力传感器 [8], 和折射率传感器 [9]。在用于引导 SPPs 的各种波导结构中，MIM几何结构凭借其紧凑的模式尺寸、强电磁场约束，以及传播长度与光学损耗之间的良好平衡，已成为纳米尺度传感中应用最广泛的平台 [10,11, 12]。基于 MIM 的折射率传感器的工作原理依赖于谐振波长对周围介质折射率的依赖关系，从而实现无标记的实时分析物检测。通过几何结构创新，传感器灵敏度已取得显著提升。Rakhshani等 [13] 利用方形纳米棒阵列谐振器实现了灵敏度为 2320 nm/折射率单位的 MIM 传感器，随后又报道了采用六边形环形腔 [14]。Rahad等人 [15] 展示了一种与 1×2 解复用器集成的MIM 传感器，用于同时进行血型和糖尿病水平的芯片实验室检测，在可见光至近红外区域报告的灵敏度为865 nm/折射率单位。尽管取得了这些进展，绝大多数已报道的传感器仍继续依赖金和银作为等离激元介质。

虽然金（金）和银（银）能够支持强烈的表面等离激元共振，但其固有固定的载流子浓度会导致较大的光学损耗，并严重限制可调谐性 [16]。它们相对较低的熔点会在较高的工作温度下引入热不稳定性 [16, 17],，而因失去光泽和氧化引起的化学降解进一步削弱了长期可靠性 [18]。最关键的是，贵金属与标准不兼容

CMOS 硅制造工艺，限制了与纳米电子电路的大规模集成 [19]。总体而言，这些缺点促使人们持续寻找替代性等离激元材料，使其兼具可调谐性光学性质、热稳定性和化学稳定性，以及与半导体工艺的兼容性。

过渡金属氮化物（TMNs）已成为极具吸引力的替代材料，具有近似金属的电导率

侧面具有优异的稳定性和完全的 CMOS 兼容性 [20, 21, 22]。三元氮化物 $(Ti,Zr)N_x$ 尤其具有吸引力，因为通过调控 Ti:Zr 比例，可以在很宽的范围内连续调节其等离激元特性 [23]。此外，通过离子束辅助沉积（IBAD），辅助离子能量 E_a 和电流

*通讯作者abrarkabir@iut-dhaka.edu（MA. Kabir）

密度 J_a 可对薄膜的氮化学计量比和介电函数进行系统控制，从而实现原位可调谐性；而二元氮化物或贵金属则无法实现这种程度的可调谐性 [24]。尽管前景十分可观， $(Ti, Zr)N_x$ 但尚未将其应用于基于MIM的等离激元传感。

在本研究中，我们提出并通过数值分析研究了一种MIM等离激元折射率传感器。该传感器由一个内嵌圆形纳米棒的方形环形谐振器构成，整体采用三元氮化物 $(Ti, Zr)N_x$ 制造。这种CMOS兼容等离激元材料与文献报道的二元氮化物及其他替代等离激元材料相比，具有更广的组分可调范围，并能更灵活地调整光学响应，以适用于多种传感应用，同时可用于MIM传感平台。在生物传感领域，该结构可用于葡萄糖浓度监测和糖尿病评估、对四个严重程度等级进行基于血红蛋白的贫血分类、同时区分五种主要血液成分，以及识别六种组织类型中的癌细胞，且在整个过程中均呈现清晰分辨的谐振位移。在物理和化学传感方面，该传感器的气压灵敏度达到 6.158 nm/MPa，热交叉灵敏度可忽略；一氧化碳2 检测灵敏度为 330.12 pm/ppm，在文献报道的同类结构中最高，且超过最接近的基于金的 MIM 设计的两倍；此外，还能在水介质中可靠识别 Zn^{2+}、Pb^{2+} 和 Hg^{2+} 重金属离子。所提出的结构实现了 2146.496 nm/RIU 的最高折射率灵敏度，检测限为 4.669×10^{-7} RIU，性能优于此前报道的CMOS兼容等离激元折射率传感器。此外，不同于固定不变的贵金属或二元氮化物平台，只需调整离子束辅助沉积参数 E_a 和 J_a，即可在宽范围内系统、连续地重新配置该结构的传感性能。这种独特的可调谐性是 $(Ti, Zr)N_x$ 材料体系所特有的，使本研究成为面向下一代芯片实验室诊断的热稳定、组分可调且可与CMOS集成的等离激元传感领域的一项重要进展。

2. 材料选择的权衡

2.1. 传统等离激元材料存在的问题

材料选择仍是先进光子学领域面临的一项根本挑战，尤其是对于工作在远低于衍射极限尺度的纳米光学器件而言；在这种情况下，金和银等传统等离激元材料存在固有局限。尽管这些材料具有高载流子浓度、优异的电导率和强烈的表面等离激元共振，但其复介电常数的虚部较大，导致光学损耗显著；这主要源于带间和带内电子跃迁，以及缺陷和晶界引起的散射机制 [22, 16, 17, 25, 26]。这些天然金属的载流子浓度（~ 10^{23} cm^{-3}）固有地固定且极高，导致其实部和虚部介电常数值过大，严重限制了可调谐性，并妨碍针对多种等离激元应用对极化响应和损耗特性的优化 [22, 16, 27]。此外，天然金属的熔点相对较低，削弱了其热稳定性；等离激元纳米结构在远低于块体材料熔点的温度下，容易发生形貌退化或液化 [16, 17, 25]。此外，化学不稳定性也令人担忧，例如铜等金属在空气中容易氧化 [28, 29],，而银会与含硫物质反应形成硫化银；这两种情况都会显著降低光学性能 [30, 18, 31]。最后，由于天然金属会扩散进入硅基底，改变材料性质并降低器件性能，因此它们大多与标准的基于硅的制造工艺不兼容，从而限制了大规模制造及其与纳米电子电路的集成 [32]。总之，这些挑战极大地限制了传统等离激元金属在纳米尺度光子器件中的适用性，并推动了对替代等离激元材料日益增长的需求，这类材料应具备更好的可调谐性、热稳定性和化学稳定性，并兼容成熟的制造技术。

2.2. 的比较、选择与建模 $(Ti, Zr)N_x$

采用经典 Drude-Lorentz 色散形式描述 $(Ti, Zr)N_x$ 薄膜的频率相关光学行为，该形式同时考虑了带内自由电子贡献和带间跃迁效应[33]。在复介电函数中， ε' 和 ε'' 分别表示介电常数的实部和虚部，其中 ε' 控制材料的色散响应， ε'' 表征光能耗散[34]。复介电函数表示为 [22]:

$$\begin{aligned}\varepsilon_{(Ti,Zr)N_x}(\omega) &= \varepsilon'(\omega) + i\varepsilon''(\omega) \\ &= \varepsilon_b - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\gamma_D)} + \frac{f_1\omega_{01}^2}{\omega_{01}^2 - \omega^2 - i\gamma_1\omega} \\ &\quad + \frac{f_2\omega_{02}^2}{\omega_{02}^2 - \omega^2 - i\gamma_2\omega}\end{aligned} \quad (1)$$

在此表达式中， ε_b 是由芯电子的极化响应产生的背景介电常数，在所关注的频率范围内可视为常数。Drude项描述自由电子的带内响应，其中ω_p 为等离子体频率，γ_D 为Drude碰撞频率，也称为弛豫率。两个洛伦兹振子项描述带间跃迁，其中 ω_{01} 和 ω_{02} 分别表示第一和第二个振子的共振能量位置， f_1和 f_2 分别表示它们的振子强度， γ_1和 γ_2 则是对应的展宽参数 [22]。

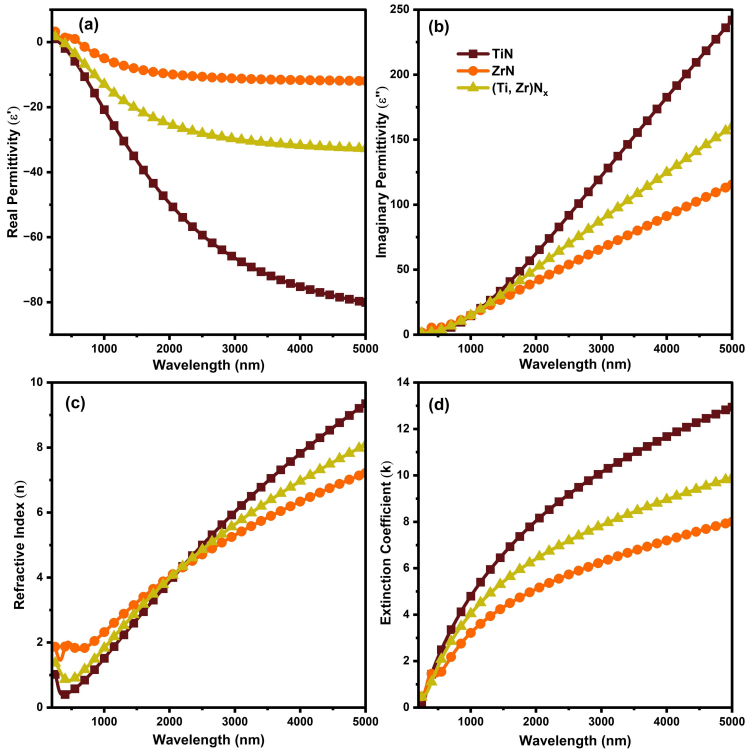

图 1： (a) 介电常数的实部 ε'，(b) 介电常数的虚部 ε''，(c) 折射率 n，以及 (d) $(Ti,Zr)N_x$ 的消光系数 k，并与 TiN 和 ZrN 进行比较。

频率相关的折射率 $n(\omega)$ 和消光系数 $k(\omega)$ 根据介电函数的实部和虚部按如下方式推导得出 [35]:

$$n(\omega) = \sqrt{\frac{1}{2}\left(\sqrt{\varepsilon'^2(\omega) + \varepsilon''^2(\omega)} + \varepsilon'(\omega)\right)} \tag{2}$$

$$k(\omega) = \sqrt{\frac{1}{2}\left(\sqrt{\varepsilon'^2(\omega) + \varepsilon''^2(\omega)} - \varepsilon'(\omega)\right)} \tag{3}$$

图1(a,b) 展示了 $(Ti,Zr)N_x$ 的介电常数实部和虚部，并与 TiN 和 ZrN 进行了比较；图1(c,d) 分别展示了折射率和消光系数光谱。如图1(a) 所示，ε' 对于所有三种材料，都会随波长增加而变得越来越负，这证实了它们在可见光和近红外区具有金属性。TiN 的 ε'最负，表明其等离激元响应最强；ZrN 的数值最不负，而 $(Ti,Zr)N_x$则介于两者之间，反映了合金化对电子结构的调制。

虚介电常数 ε'' 在图 1（b）中随波长单调增加，其中 TiN 的光学损耗最大，而 ZrN 最小，$(Ti,Zr)N_x$ 再次处于中间位置。这表明，与 TiN 相比，合金化可部分抑制光学损耗，同时保持比 ZrN 更强的金属性。折射率 n 在图 1（c）和图 k图1（d）中的消光系数遵循相同的排序——在近红外范围内，TiN > $(Ti,Zr)N_x$ > ZrN。该行为进一步证实，这种三元氮化物具有均衡的光学响应，兼具适中的损耗和足够负的介电常数。通过成分合金化实现的这种可调谐性，凸显了 $(Ti,Zr)N_x$ 相较于其二元对应物在工程化等离激元应用中的实际优势。

TiN、ZrN 和三元$(Ti,Zr)N_x$ 的等离激元性能通过五项关键指标进行了系统评估，包括能量损失、局域表面等离激元共振品质因数、表面等离激元极化激元品质因数、SPP传播长度和穿透深度，如图 2所示。

通过能量损失函数 [36]评估等离激元阻尼特性:

$$-\mathrm{Im}\left(\frac{1}{\varepsilon}\right) = \frac{\varepsilon''(\omega)}{\varepsilon'^2(\omega) + \varepsilon''^2(\omega)} \tag{4}$$

如图 2（c）所示，三种材料在短波长区域均表现出尖锐的损耗峰，并向较长波长方向快速衰减。其中，ZrN 的损耗强度最高；TiN 则表现出明显但较窄的峰值，随后出现最陡峭的衰减，而 $(Ti,Zr)N_x$相较于两种二元氮化物，其最大值有所降低并略微红移，反映出三元合金混合电子结构所产生的中度阻尼。

局域表面等离激元共振品质因数定义为 [37]:

$$Q_{\mathrm{LSPR}} = -\frac{\varepsilon'(\omega)}{\varepsilon''(\omega)} \tag{5}$$

如图2(a)所示。TiN 在 Q_{LSPR}附近达到最高峰值，约为 2，波长约为 600 nm；而 $(\mathrm{Ti,Zr})\mathrm{N}_x$在相同光谱区域的峰值约为 1，ZrN 则始终低于 0.4。超过 1000 nm 后，三种材料的数值均趋于相近。由于三种材料的 $\varepsilon''(\omega)$ 数值相对接近，因此 Q_{LSPR} 的差异主要取决于 $\varepsilon'(\omega)$的大小，TiN 因其强负实介电常数而具有优势。三元 $(\mathrm{Ti,Zr})\mathrm{N}_x$始终处于中间位置，证实成分合金化能够在两个二元端点之间连续调控局域表面等离激元共振性能。

对于氮化物-空气界面处的表面等离激元极化激元传播模式，品质因数由 [5] 给出：

$$Q_{\mathrm{SPP}} = \frac{\varepsilon'^2(\omega)}{\varepsilon''(\omega)} \tag{6}$$

如图 2（b）所示， Q_{SPP} 所有材料的波长均显著增加，其中 TiN 在 2000 nm 左右达到接近 40 的峰值，随后逐渐下降，而$(\mathrm{Ti,Zr})\mathrm{N}_x$ 在相同光谱区域的峰值较为温和，约为 12。ZrN 则远低于二者，在大部分范围内接近于零。TiN 优异的Q_{SPP} 是其较大的负$\varepsilon'(\omega)$的直接结果，而 $(\mathrm{Ti,Zr})\mathrm{N}_x$ 的中间表现则反映了其可调谐的介电特性。

表面等离激元极化激元传播长度 δ_{SPP}如图2（d）所示，定义为 [24]:

$$\delta_{\mathrm{SPP}} = \frac{\lambda}{2\pi} \cdot \frac{\varepsilon'^2(\omega)}{\varepsilon''(\omega)} \cdot \left(\frac{1+\varepsilon'(\omega)}{\varepsilon'(\omega)} \right)^{3/2} \tag{7}$$

在极限 $|\varepsilon'(\omega)| \gg 1$ 下，该式简化为 $\delta_{\mathrm{SPP}} \propto \varepsilon'^2(\omega)/\varepsilon''(\omega)$。三种材料的 δ_{SPP} 均随波长单调增加。TiN 的传播长度明显最长，在 5000 nm 处超过 20 μm，而$(\mathrm{Ti,Zr})\mathrm{N}_x$ 在相同波长处达到约 5 μm，约为 ZrN 数值的两倍；ZrN 在整个范围内均低于1 μm。

等离激元层中的电磁穿透深度由 [5]给出：

$$\delta_D = \frac{\lambda}{2\pi} \left(\frac{1+\varepsilon'(\omega)}{\varepsilon'^2(\omega)} \right)^{1/2} \tag{8}$$

如图 2（e）所示， δ_D 所有材料的穿透深度均随波长增加而增大。TiN表现出最大的穿透深度。ZrN显示出最小的 δ_D。 $(\mathrm{Ti,Zr})\mathrm{N}_x$ 介于两者之间，提供了中等程度的场约束，并且可通过成分控制进行系统调节。

总体而言，对比结果表明，在近红外区域，TiN > $(\mathrm{Ti,Zr})\mathrm{N}_x$ > ZrN 在大多数等离激元性能指标上呈现出清晰且一致的排序。TiN具有更优的传播长度和品质因数，但代价是更高的阻尼；而ZrN则具有更强的场约束和更低的损耗，但整体等离激元响应较弱。三元 $(\mathrm{Ti,Zr})\mathrm{N}_x$ 弥合了这两个极端之间的差异，提供了平衡且具有可调谐性的等离激元特性，这是任一二元体系单独都无法实现的，因此成为工程化红外和纳米光子学应用的有力候选材料。

2.3. 利用辅助离子 E_a 和 J_a对 $(\mathrm{Ti,Zr})\mathrm{N}_x$ 进行化学计量调控

众所周知，过渡金属氮化物薄膜的等离激元特性对其成分和微观结构高度敏感，而这两者均可通过离子束辅助沉积（IBAD）工艺有效调控 [24]。在 IBAD 过程中，生长中的薄膜会同时受到高能辅助离子的轰击，从而改变沉积薄膜的成分、晶体结构，进而影响其介电性质 [38]。这一过程由两个关键参数控制：辅助离子能量 E_a 和辅助离子电流密度 J_a。较高的 E_a会提高轰击离子的动能，增强其与生长中薄膜的相互作用，从而促进氮掺入；同时，由于锆氮键比钛氮键更强，优先再溅射会逐渐降低钛含量 [23]。另一方面，较高的J_a会增加辅助离子的通量，同样促进氮掺入，直至达到饱和点；此时，电离驱动的掺入与氩组分的再溅射效应达到平衡 [38]。氮化物薄膜具有高度可调谐性，这源于其氮含量可变；氮化物通常为非化学计量，其成分可通过调整实验沉积参数加以控制 [23]。通过谨慎调节 E_a 和 J_a，可在很大范围内调控薄膜的自由电子浓度、等离子体频率、交叉频率 ω_c及光学损耗 $(\mathrm{Ti,Zr})\mathrm{N}_x$ [24]，从而系统控制其在可见光和近红外区域的等离激元响应。下文将详细考察在固定 $E_a = 200$ eV条件下， J_a 对 $(\mathrm{Ti,Zr})\mathrm{N}_x$ 薄膜成分和等离激元性质的影响。

表 1 $(\mathrm{Ti,Zr})\mathrm{N}_x$ 薄膜在固定 $E_a = 200$ eV [24]下不同辅助离子电流密度 J_a 时的原子组成。

J_a (mA cm^{-2})	钛（%）	锆（%）	氮（%）
0	17.1	21.6	61.3
0.5	16.2	22.0	61.8
0.7	14.5	20.9	64.6
1.2	14.8	20.5	64.7

为考察辅助离子电流密度的作用，在固定

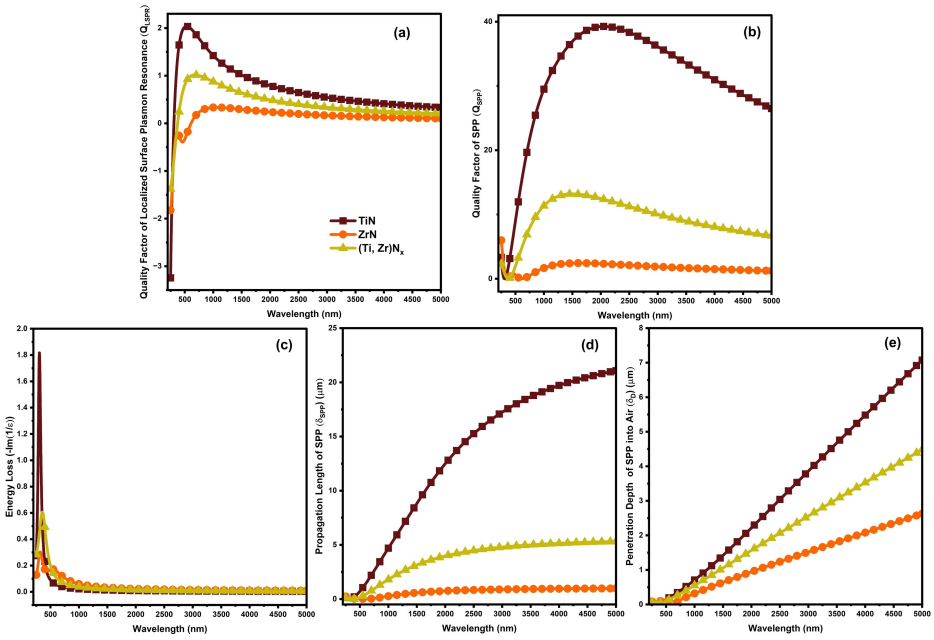

图2： TiN、ZrN和 $(Ti,Zr)N_x$的等离激元性能指标比较：(a) Q_{LSPR}，(b) Q_{SPP}，(c)能量损失函数，(d)SPP传播长度 δ_{SPP}，以及(e)穿透深度 δ_D。

辅助离子能量为 E_a = 200 eV 时，沉积薄膜的原子组成汇总于表1。表中清楚地显示，随着 J_a 增大，氮含量从 $J_a = 0$ 时的 61.3 % 上升至 $J_a = 0.7$ mA cm^{-2}时的 64.6 %，之后在 $J_a = 1.2$mA cm^{-2}时饱和于约 64.7 %；与此同时，钛含量从 17.1 % 稳步下降至 14.8 %，而锆含量则始终基本不变。

如图3所示，这些成分变化直接影响薄膜的光学响应。图3(a)中的实介电常数 $\varepsilon'(\omega)$ 随着 J_a的增加而逐渐变得不那么负，而图3(b)中的 $\varepsilon''(\omega)$ 则相应降低，这共同表明，随着氮含量升高并结合可用的传导电子，薄膜的金属性呈系统性减弱趋势。因此，图3(c)中的SPP品质因数 Q_{SPP} 从无辅助薄膜的约13这一峰值显著降至 J_a = 1.2 mA cm^{-2}时的约4；图3(d)中的局域表面等离激元共振品质因数 Q_{LSPR} 也呈现相同趋势，因为 $|\varepsilon'(\omega)|$的降低所带来的益处超过了较低光学阻尼的优势。图3(e)中的SPP传播长度 δ_{SPP} 从无辅助薄膜的超过 5 μm降至 J_a = 1.2 mA cm^{-2} 、4800 nm处的约 1.4 μm；在超过 J_a = 0.7 mA cm^{-2}后，各曲线趋于紧密聚集，这与表1中观察到的成分饱和现象一致。相比之下，图3(f)中的穿透深度 δ_D 随着J_a增加，表明薄膜界面处的SPP场约束逐渐减弱。总体而言，尽管更高的 J_a 能够有效抑制光学损耗，但同时也会削弱薄膜的金属响应，因而在降低损耗与等离激元性能之间形成了固有的权衡，这一在针对特定应用优化沉积条件时必须予以仔细考虑。

为研究辅助离子能量的作用， E_a 在辅助离子电流密度固定为 J_a = 0.5 mAcm^{-2}的条件下，在0至500 eV范围内进行系统调节。沉积薄膜的原子组成汇总于表2中，结果表明，随着 E_a 的增加，氮含量从61.3%稳步上升至63.9%，钛含量从17.1%下降至14.4%，而锆含量在整个过程中保持相对稳定。

表2不同辅助离子能量 E_a 下、固定 $J_a = 0.5$ mA cm^{-2} [24]条件下 $(Ti,Zr)N_x$ 薄膜的原子组成。

E_a (电子伏特)	钛（%）	锆（%）	氮（%）
0	17.1	21.6	61.3
200	16.2	22.0	61.8
300	15.5	21.5	63.0
500	14.4	21.7	63.9

如图所示，这些成分变化直接影响薄膜的光学响应。4。图 $\varepsilon'(\omega)$中实部介电常数4(a) 随着 E_a增加而逐渐变得不那么负，证实了随着更高的离子能量促使氮掺入增加并降低自由载流子浓度，金属性会系统性减弱。图 $\varepsilon''(\omega)$ 中的虚介电常数 4(b) 相应降低，表明更高的 E_a会抑制光耗散。因此，图 Q_{SPP} 中的表面等离激元极化激元品质因数4(c) 从无辅助薄膜约 13 的峰值降至 E_a = 300 eV 时的约 3，并在 E_a = 500 eV 时接近于零；而局域表面等离激元共振

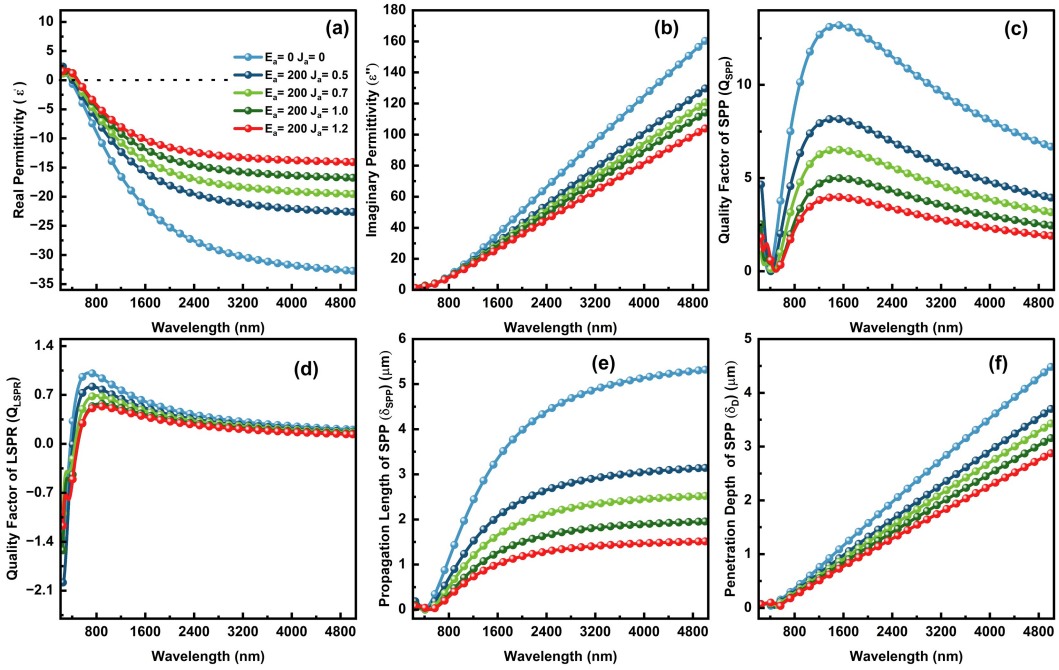

图 3：.....的影响 辅助离子电流密度 J_a 对固定 $E_a = 200$ e 条件下 $(Ti, Zr)N_x$ 薄膜等离激元性质的影响 V.

品质因数 Q_{LSPR} 在图 4(d) 中呈现出相同趋势：随着能量升高，$|\varepsilon'(\omega)|$的降低逐渐使响应趋于平缓，其影响超过了阻尼降低带来的益处。图 δ_{SPP} 中的 SPP传播长度 4(e) 从无辅助薄膜的超过5 μm 降至 1 μm 左右（$E_a = 300$ eV 时），并在 4800 nm 处5 μm 以下（$E_a = 500$ eV 时），这与表2中观察到的电导率减弱相符。相较之下，图 δ_D 4(f) 中的穿透深度随 E_a增加而增大，表明薄膜界面的 SPP场约束逐渐减弱。总体而言，E_a 对 $(Ti, Zr)N_x$ 薄膜等离激元特性的调节范围远大于 J_a，这证实了离子能量驱动的成分改变是调控三元氮化物薄膜等离激元特性的主要机制。

3. 传感器设计框架和方法学方法

所提出的等离激元传感器结构的二维俯视图如图所示。5传感器由一个方形环形谐振器构成，该谐振器由$(Ti, Zr)N_x$制成，半径为 r的圆形纳米棒阵列均匀嵌入谐振器的四面壁中，相邻纳米棒之间由间隙r_g 隔开。谐振器通过宽度为 w_i 的间隙 g与总线波导进行倏逝耦合，该间隙控制传播SPP模式与谐振器之间的耦合效率。输入端口和输出端口 P_{in} 和 P_{out}位于总线波导的两端。占据谐振器中空内部以及

波导芯层的周围介质充当传感介电质，其折射率直接决定共振的光谱位置。仿真中使用的完整几何参数集列于表3中。

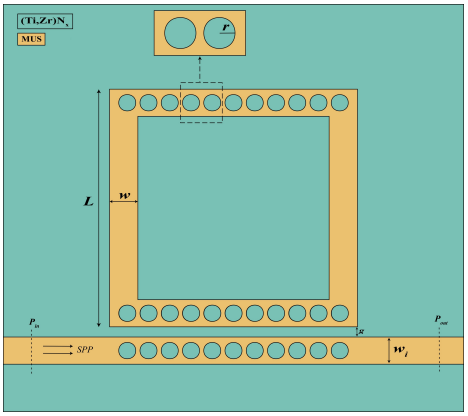

图 5： 所提出的传感器结构二维俯视图。

数值模拟采用 COMSOL Multiphysics 完成，该软件使用有限元法（FEM）求解材料界面处的电磁波控制方程。有限元法将求解域离散为基本单元，从而能够准确解析等离激元结构与周围介电介质之间复杂的场相互作用。为确保仿真结果可靠，在

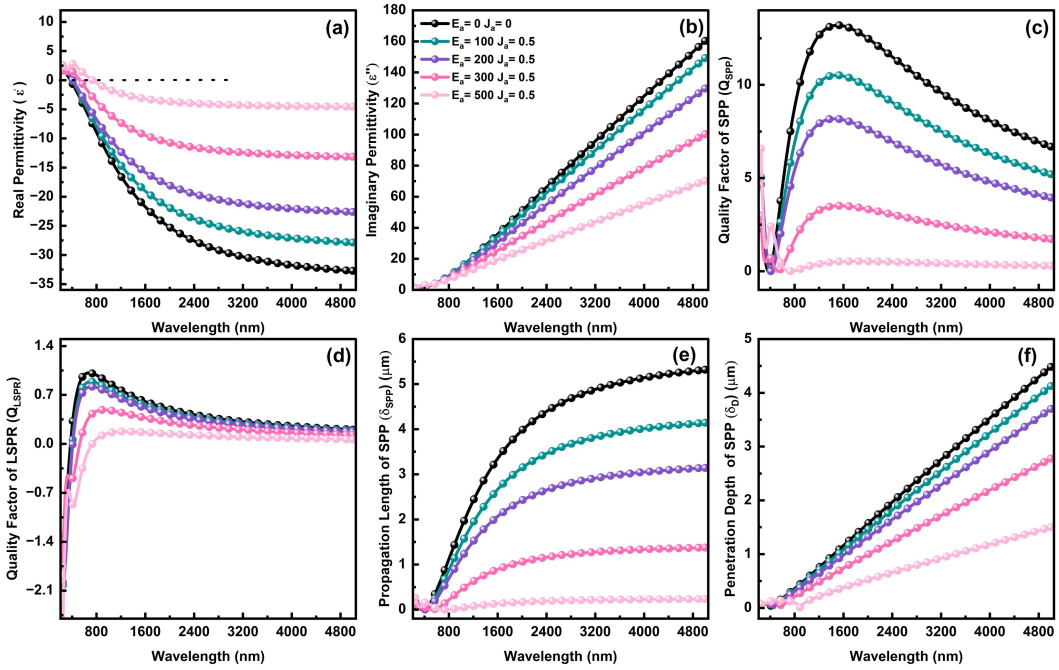

图 4： 影响　　辅助离子能量 E_a 对固定 $J_a = 0.5$ mA cm⁻ 下 $(Ti, Zr)N_x$ 薄膜等离激元性质的影响　　[2].

表 3所提出的传感器结构的几何参数。

参数	符号	数值（nm）
方形腔长度	L	350
腔壁宽度	w	40
波导宽度	w_i	40
腔体与波导之间的间隙	g	20
纳米棒半径	r	12
纳米棒间隙	r_g	6

计算域的所有外边界处均施加散射边界条件，以吸收出射波并抑制可能干扰场解的人工反射。

众所周知，几乎所有基于金属-绝缘体-金属的等离激元传感器均在二维框架下进行分析，并且当器件高度超过某一阈值时，二维仿真结果可以可靠地扩展至三维场景；超过该阈值后，性能特征基本保持不变 [39]。在此情况下，二维分析能够提供准确的预测，同时无需承担完整三维仿真所带来的计算成本 [39, 9]。

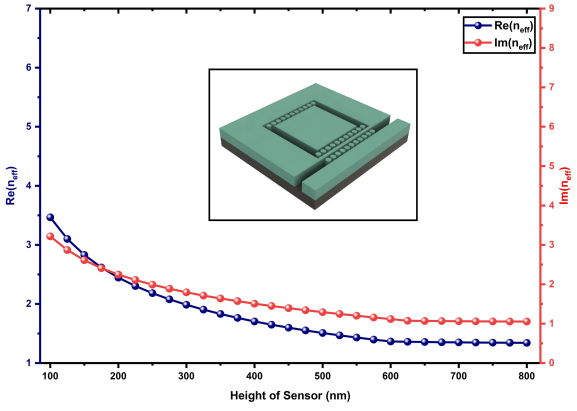

图 6： 传感器高度对n_{eff} 的影响。

为验证二维分析对所提出结构的适用性，在固定工作波长下，将 h 传感器的高度在 100 nm 至 800 nm 范围内进行变化，并在腔体中填充折射率为 $n = 1$ 的介电材料。所得有效折射率n_{eff}的变化绘于图 Re(n_{eff})，其中同时给出了其实部 Im(n_{eff})和虚部6。如图所示，随着高度增加， Re(n_{eff}) 和 Im(n_{eff}) 均单调下降，反映出随着器件变高，限制在金属界面的模式功率随之降低。当高度超过约 500 nm 后，这两个量趋于稳定并接近恒定值，其中 Im(n_{eff})趋近于一个非常小的值。这种稳定趋势

表明n_{eff} 在此范围内，系统损耗达到最小，SPP传播长度则有效达到最大；这两点对于实现高性能传感都十分理想 [40]。因此，本研究后续的所有分析均采用二维仿真框架。

由于总线波导的宽度远小于入射波长，高阶模式会被有效抑制，无法在波导中维持。因此，结构中仅支持基横磁（TM）模式并沿结构传播 [41]。如图所示，表面等离激元极化激元以横磁模式从输入端口激发 P_{in} ，见图 5。控制横磁模式在 $(\mathrm{Ti,Zr})\mathrm{N}_x$ 基波导结构中传播的色散关系可表示为 [12]:

$$\varepsilon_{MUS}\sqrt{n_{eff}^2-\varepsilon_{(\mathrm{Ti,Zr})\mathrm{N}_x}}+\varepsilon_{(\mathrm{Ti,Zr})\mathrm{N}_x}\sqrt{n_{eff}^2-\varepsilon_{MUS}} \times\tanh\left(\frac{w_i\pi\sqrt{n_{eff}^2-\varepsilon_{MUS}}}{\lambda}\right)=0 \tag{9}$$

其中， ε_{MUS} 为周围介电介质的介电常数，$\varepsilon_{(\mathrm{Ti,Zr})\mathrm{N}_x}$ 为三元氮化物等离激元材料的复介电常数，n_{eff} 为导引表面等离激元极化激元模式的有效折射率，w_i 为总线波导的宽度， λ 为导引光的波长。该结构的有效折射率n_{eff} 可通过求解以下由麦克斯韦方程组和波导边界条件推导出的方程组确定 [9]:

$$k_d\varepsilon_{(\mathrm{Ti,Zr})\mathrm{N}_x}\tanh\left(\frac{k_d w_i}{2}\right)+\varepsilon_{MUS}k_m=0 \tag{10}$$

$$k_{d,m}=\sqrt{\beta_{SPP}^2-\varepsilon_{d,m}k_0^2} \tag{11}$$

$$n_{eff}=\frac{\beta_{SPP}}{k_0} \tag{12}$$

其中， k_d 和 k_m 分别是介电介质和 $(\mathrm{Ti,Zr})\mathrm{N}_x$ 层中的横向传播常数， β_{SPP} 是沿波导界面传播的SPP传播常数。自由空间波矢 k_0 定义为 $k_0=2\pi/\lambda$，其中 λ 是激发光 [41]的自由空间波长。需要注意的是，n_{eff}对波导几何结构、通道宽度 w_i 以及组成材料的光学性质十分敏感，因此会随等离激元材料和介质填充物 [42]的选择而变化。

方环谐振器的谐振波长可利用驻波理论确定，该理论将谐振器内的光程与环行表面等离激元极化激元模式发生相长干涉的条件联系起来。谐振波长 λ_{res} 由 [5]给出:

$$\lambda_{res}=\frac{2n_{eff}L}{m-\frac{\phi_r}{\pi}} \tag{13}$$

其中， L 为谐振器的有效长度，n_{eff} 为腔体支持的表面等离激元极化激元模式的有效折射率， ϕ_r 为表面等离激元极化激元在腔体边界处反射时累积的相移，m 为表示谐振模式阶数的正整数。填充腔体的传感介质的折射率发生任何变化，都会直接改变n_{eff}，进而导致 λ_{res}发生可测量的偏移。谐振波长对周围介质的这种灵敏度构成了所提出折射率传感器的物理基础，而深入理解这种关系对于针对目标传感应用进行结构设计与优化至关重要。

4. 制造工艺

该 $(\mathrm{Ti,Zr})\mathrm{N}_x$ 基等离激元传感器的制造遵循自顶向下方法，如建议的工艺流程所示。该 $(\mathrm{Ti,Zr})\mathrm{N}_x$ 薄膜可首先通过反应磁控溅射（MS）、原子层沉积（ALD）、离子束辅助沉积或脉冲激光沉积等技术沉积到基底上 [43]。对于我们的传感器，化学气相沉积（CVD）也被确定为一种可行的方法，因为多种低蒸气温度的金属有机源有助于克服过渡金属氮化物的高熔点和机械强度所带来的挑战 [22]。沉积完成后，在氮化物层上涂覆一层电子束光刻（EBL）抗蚀剂薄膜。随后，通过计算机控制的电子束将所需的纳米尺度图案转移到抗蚀剂上；电子束会改变曝光区域内抗蚀剂的溶解度。接着进行化学显影，洗去曝光区域中的抗蚀剂，从而显露出下方的 $(\mathrm{Ti,Zr})\mathrm{N}_x$ 薄膜。利用反应离子刻蚀（RIE）方法刻蚀氮化物的显露部分，以确定传感器的最终几何结构。最后，通过湿法或干法剥离（例如使用等离子灰化机）去除剩余抗蚀剂，从而在基底上形成完整的纳米尺度传感器图案 [44]。传感器制造工艺涉及的主要步骤如图7所示。

5. 计算与结果评估

所提出传感器的透射系数（TC）通过以下关系式进行评估:

$$TC=S_{21}dB \tag{14}$$

通过将传感介质的折射率从 $n=1.300$ 改变至 $n=1.330$，步进为 0.01，同时保持所有几何参数

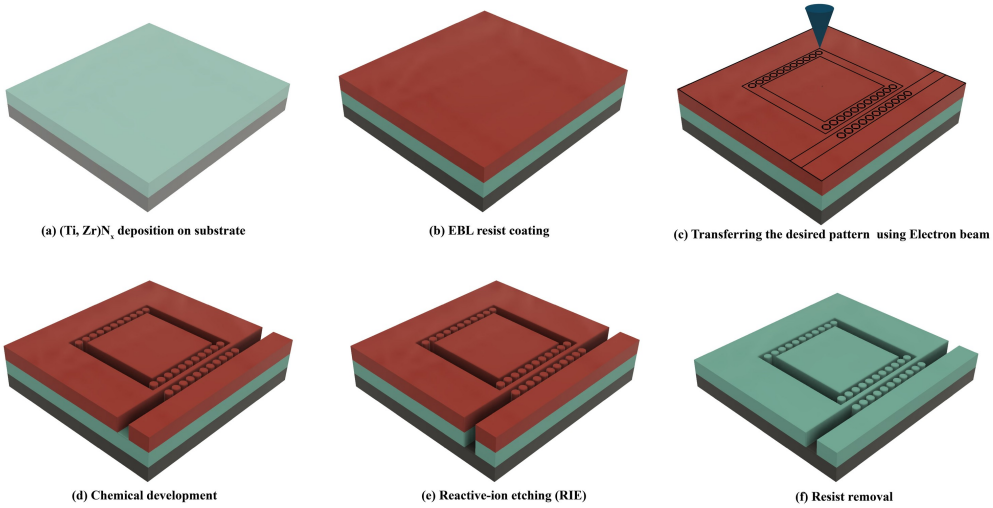

图 7： 实现所提出的基于 $(\mathrm{Ti,Zr})\mathrm{N}_x$ 的等离激元传感器所涉及的主要制造步骤。

固定在其优化值。如图 8(a) 所示，TC 光谱在 3151.10 nm 波长处出现了清晰且显著的共振谷，所提出的传感器在共振条件下实现了 −23.0501 dB 的 TC。

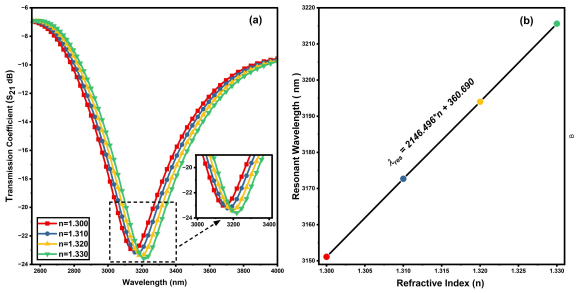

图 8： (a) 传感介质在不同折射率下的透射系数光谱。(b) 谐振波长随折射率的变化关系，显示线性拟合响应。

图中展示了所提出的传感器在 3151.10 nm 谐振波长处的电场分布。9。场分布图清晰地显示，电磁能量强烈约束并集中在方形环形谐振器的内外壁上，尤其是邻近总线波导的底壁处，此处波导模式与腔体表面等离激元模式之间的倏逝耦合最强。嵌入腔壁中的圆形纳米棒通过引入额外的散射中心，进一步增强了局部场约束，从而强化了 $(\mathrm{Ti,Zr})\mathrm{N}_x$–介电材料界面处的倏逝场。

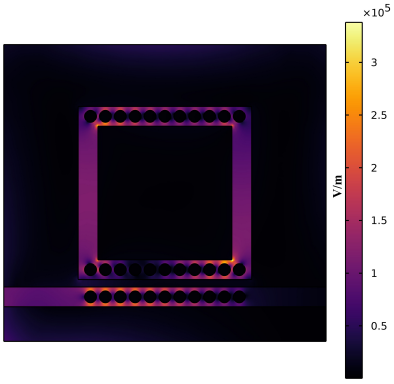

图 9： 所提出的传感器在 λ_{res} =3151.10 nm 处的电场分布。

随着折射率增加，共振谷逐渐向长波长方向移动。提取出的谐振波长位置与相应折射率值的关系绘于图 8(b)中，呈现出很强的线性关系。所提出的传感器灵敏度为 2146.496 nm/RIU，检测限（DL） [5]按以下公式计算：

$$DL = \frac{\delta\lambda}{S} \tag{15}$$

其中，$\delta\lambda = 0.001$ nm 是商用光谱分析仪 [15],能够分辨的最小波长偏移，对应的检测限为 4.669×10^{-7} RIU，表明该传感器能够分辨周围折射率的极微小变化。

所提出结构的一个显著特点是使用 $(\mathrm{Ti,Zr})\mathrm{N}_x$ 作为等离激元材料，其光学性质可通过在沉积过程中调节辅助离子能量 E_a 和电流密度J_a 来系统地调控。为考察这种成分

表 4所提出的传感器与近期报道的等离激元折射率传感器的比较。

Ref.	材料	灵敏度 (纳米/折射率单位)	DL (折射率单位)	CMOS 兼容	等离激元可调谐性
[12]	ZrN	1445.46	6.91×10^{-7}	Yes	No
[21]	TiN	1074.88	9.303×10^{-7}	Yes	No
[5]	n型硅	1273.5788	7.8518×10^{-7}	Yes	No
[45]	p型硅	2150	4.65×10^{-7}	Yes	No
[15]	Ag	865	1.1548×10^{-6}	No	No
[46]	Au	1400	7.1429×10^{-7}	No	No
本研究	$(Ti, Zr)N_x$	2146.496	4.669×10^{-7}	Yes	Yes

可调谐性如何转化为传感性能，我们评估了传感器在所有研究 $(Ti, Zr)N_x$成分下的灵敏度，结果汇总于图10中。如柱状图所示，无辅助薄膜（$E_a = 0$， $J_a = 0$）的灵敏度最高，达到 2146.496 nm/折射率单位，这归因于其最强的金属性和最负的实介电常数。传感性能在广泛成分范围内的这种可调性证实，$(Ti, Zr)N_x$ 在传感器设计中提供了独特且具有实际价值的自由度，而固定贵金属或二元氮化物体系则无法提供这种自由度。

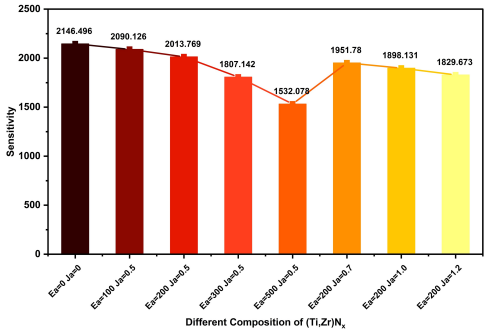

图 10： 在不同沉积条件下获得的不同 $(Ti, Zr)N_x$ 成分所对应的所提出传感器的灵敏度变化。

表中将所提出结构的传感性能与近期报道的等离激元折射率传感器进行了比较4。如表所示，所提出的传感器在所有比较结构中实现了最高灵敏度。值得注意的是，尽管基于银和金等贵金属的传感器具有强大的等离激元响应，但它们不兼容CMOS，且其等离激元特性不具备可调谐性，从而限制了其对多样化传感环境的适应能力。基于兼容CMOS的材料（包括ZrN、TiN和掺杂硅）的传感器具有更大的集成潜力，但与所提出的设计相比，其灵敏度较低且检测限较高。三元 $(Ti, Zr)N_x$ 兼具CMOS兼容性、等离激元特性的宽范围成分可调谐性以及卓越的传感性能，使其成为下一代等离激元生物传感应用中极具吸引力且具有实际优势的平台。

6. 作为生物传感器的潜力

6.1. 用于糖尿病评估的葡萄糖传感

糖尿病是一种代谢性疾病，其特征是血糖水平持续升高；通过准确的葡萄糖浓度监测进行早期检测具有重要的临床重要性。葡萄糖浓度定义为给定体积血液中所含葡萄糖的总量，在评估人体调节能量代谢的能力方面发挥着核心作用 [47]。由于葡萄糖水平全天都会波动，因此，可靠且定量的传感方法对于有效管理糖尿病至关重要。

要使用所提出的传感器进行葡萄糖检测，需要通过以下经验表达式将葡萄糖溶液的折射率与其浓度相关联 [48]:

$$n = 0.2015 \times C\% + 1.3292 \tag{16}$$

其中，n 表示溶液的折射率，$C\%$表示以百分比计的葡萄糖浓度。利用该关系，计算出对应于0%、5%、10%、15%、20%和25%葡萄糖浓度的折射率值，并将其作为数值模拟的输入参数。随着葡萄糖浓度增加，溶液的折射率也随之升高，从而改变传感区域内的有效光学条件，并使谐振波长向更长波长方向移动。

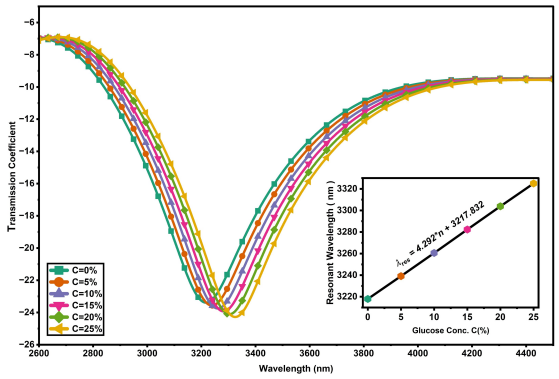

图11： 不同葡萄糖浓度下的透射光谱及相应的谐振波长偏移。

图中所示的透射光谱清晰地捕捉到了这一行为。11可以观察到，随着葡萄糖浓度逐步增加，透射谷呈现出渐进且清晰的红移。每个浓度水平均产生了可辨识的偏移，反映出所提出结构对由葡萄糖含量变化引起的折射率变化具有较高灵敏度。从光谱中提取的谐振波长位置与相应的葡萄糖浓度值进行作图（图11的插图），结果显示在整个浓度范围内具有很强的线性关系。该拟合直线的斜率直接给出了传感器的灵敏度，测得为4.292 nm/%，表明该传感器具有稳定且可靠的传感响应，适用于定量葡萄糖检测。

为将测得的葡萄糖浓度转换为具有临床意义的糖尿病水平，需使用以下关系 [48]将浓度百分比换算为mmol/L：

$$\text{Diabetes Level} = \frac{C\% \times D \times 1000}{MW} \tag{17}$$

其中，D 为标准条件下纯葡萄糖密度（1.54 g/mL），MW 为其分子量（180.16 g/mol）。所得的mmol/L 数值可直接用于对受试者的状况进行分类：低于 7.8 mmol/L 表示健康状态，7.8 至 11 mmol/L 之间表示糖尿病前期，而超过 11 mmol/L 则表明患有糖尿病 [48]。这种结合基于折射率的传感机制与成熟的浓度到 mmol/L 换算方法的系统性方案，为使用所提出的等离激元传感器进行无创糖尿病水平评估提供了一条简便且实用的途径。

6.2. 通过血红蛋白浓度传感检测贫血

血红蛋白（Hb）是一种重要的血液蛋白，负责将氧气从肺部输送到身体组织，其在血液中的浓度是重要的临床指标可用于诊断多种血液学疾病。Hb低于正常生理水平是贫血的主要特征；贫血患者的红细胞或血红蛋白不足，会限制血液的携氧能力 [49]。相反，Hb浓度异常升高可能表明患有红细胞增多症，这种疾病的特征是红细胞生成过多，可能显著增加血液凝固风险 [50]。因此，准确、无创地检测Hb浓度具有重要的临床意义。

为使用所提出的结构进行 Hb 传感，血液样本的折射率与其血红蛋白浓度之间的关系由以下表达式给出 [51]：

$$n = 1.38 + \frac{1}{5766.5}(H - H_{\text{normal}}) \tag{18}$$

其中，H 是样品的血红蛋白浓度，单位为 g/L；$H_{\text{normal}} = 140$ g/L 是对应于折射率 1.38 [51] 的标准生理血红蛋白水平。利用这一关系，计算血红蛋白浓度为 50、80、110、140 和 170 g/L 时对应的折射率值，并将其用作仿真的输入参数。

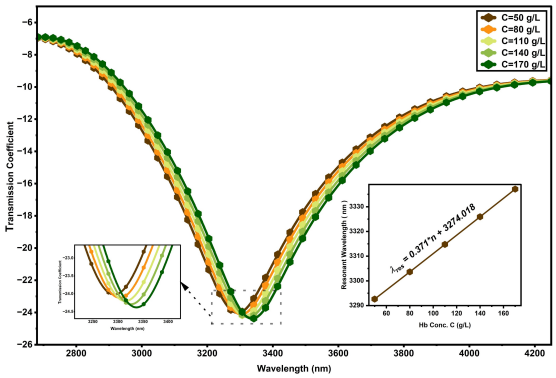

图12： 不同血红蛋白浓度下的透射光谱及对应的共振波长偏移。

所得透射光谱如图12，当 Hb 浓度从 50 增至 170 g/L 时，可以观察到共振谷明显且逐渐红移。将提取的共振波长位置与右侧插图中的相应 Hb 浓度值作图后，可得到很强的线性关系，其拟合表达式的斜率直接给出传感灵敏度，为 0.371 nm/(g/L)。根据检测到的 Hb 浓度，还可进一步将贫血严重程度划分为不同的临床分类，如表5所示。当 Hb 水平低于正常参考值时，该表为贫血诊断提供了全面指南 [52]。

表5基于血红蛋白浓度和折射率的贫血主要分类。

状况	范围（克/升）	折射率
健康	> 120	> 1.376
轻度	100-120	1。373-1。376
中度	80-100	1.369-1.373
急性	< 80	< 1.369

6.3. 血液成分的多组分检测

所提出的 (Ti, Zr)N_x基等离激元传感器能够区分人血液的各种成分，包括水、红细胞（RBCs）、白细胞（WBCs）、血红蛋白和血浆。准确识别这些生物标志物对于诊断感染、贫血及各种血液疾病等病理状况至关重要。该传感机制利用谐振器和纳米棒增强波导内表面等离激元极化激元与 MUS 之间的相互作用。图 13 展示了样品折射率（RI）的变化，这些变化会导致谐振波长发生可测量的偏移（λ_{res}）。

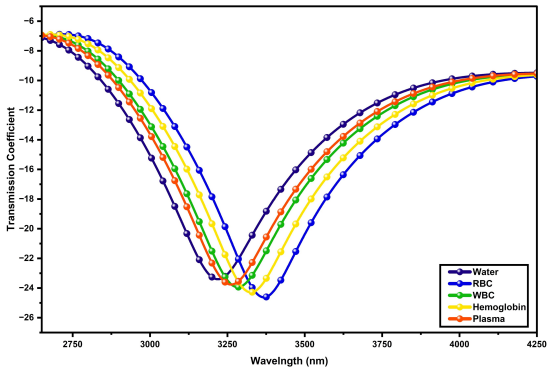

图 13： 不同血液成分的透射特性。

仿真结果表明，在透射光谱中，随着分析物折射率从 1.33（水）增加到 1.40（红细胞），共振谷出现明显红移。这些间隔清晰的共振谷低于 −24 dB，表明其具有强光限制能力和高分辨率传感能力。从透射光谱中可以看出，共振谷彼此间隔清晰，这是实现高分辨率生物传感的关键要求。表6 总结了折射率与相应共振波长之间的关系。

表 6各种血液成分的检测参数。

血液组分	折射索引 (n) [53]	共振波长（nm）
水	1.33	3219.54
红细胞（RBC）	1.40	3368.26
白细胞（WBC）	1.36	3283.44
血红蛋白	1.38	3326.15
血浆	1.35	3262.22

6.4. 癌细胞识别

早期识别恶性细胞对于有效的癌症治疗至关重要。由于结构和生化变化，癌细胞的折射率通常高于相应的健康细胞 [54, 9]。所提出的传感器能够有效区分多种组织类型中的正常状态与癌变状态，包括血液（Jurkat细胞）、宫颈（HeLa细胞）、皮肤（基底）、肾上腺（PC-12细胞）和乳腺（MDA-MB-231细胞和 MCF-7）。

图 14所示的仿真结果表明，从正常状态转变为癌症影响状态时，谐振波长（λ_{res}）始终呈现红移。由于恶性细胞固有的折射率升高，这一趋势在所有测试样品中均保持一致。透射谷仍然较深且轮廓清晰，从而确保了较高的检测准确率。每种细胞类型的具体折射率值及其产生的光谱偏移汇总于表 7中。

7. 空气压力传感能力

所提出的传感器利用空气的压力相关折射率作为传感参数，用于空气压力传感。为开展这项研究，将传感腔内的压力以 5 MPa 为增量，从 5 MPa 系统地改变至 30 MPa，同时将温度保持在恒定的 25℃，以消除分析过程中的任何热干扰。众所周知，空气的折射率并非固定不变，而是取决于当时的压力和温度条件。这种依赖关系可利用 Zhang 等 [55]提出的关系式进行量化：

$$n = 1 + \frac{2.8793 \times 10^{-9} \times P}{1 + 0.003671 \times T} \tag{19}$$

每个压力步进下的折射率值由方程计算得出。19 随后用作数值模拟的输入参数 [56]。随着压力升高，空气的折射率逐渐增大，改变传感介质中的有效光学条件，并使谐振波长向长波方向移动。

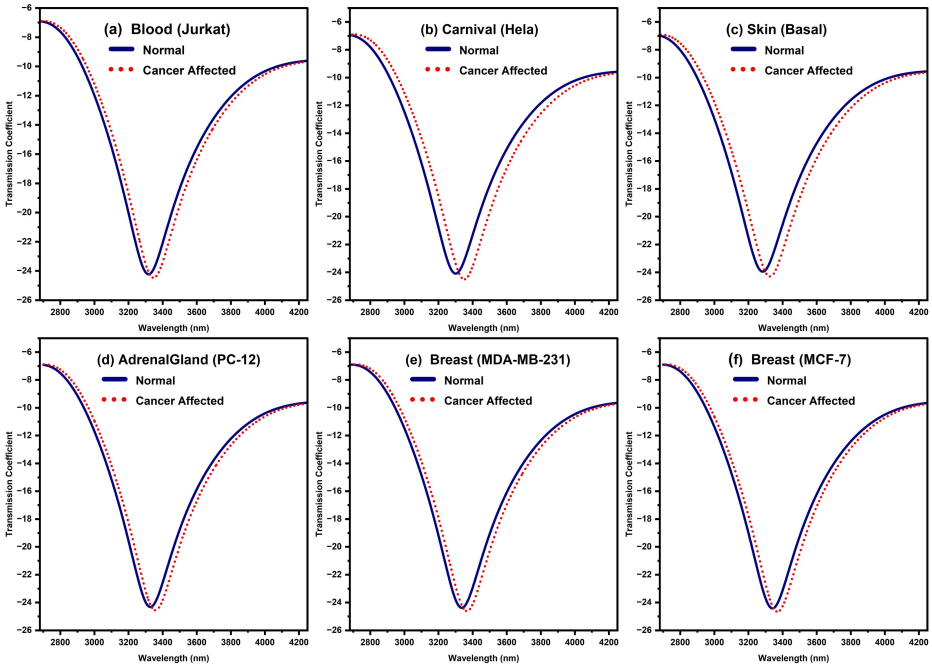

图14：不同区域正常细胞与癌细胞透射特性的比较。

表7正常细胞与癌细胞的折射率和谐振波长比较。

细胞名称	细胞类型	RI（正常）	RI（癌症）	谐振波长（纳米）（正常）	共振波长（纳米）（癌症）
Jurkat细胞	血液	1.376	1.390	3317.3719	3347.2170
HeLa	宫颈	1.368	1.392	3300.4779	3351.1251
基底	Skin	1.360	1.380	3283.7551	3326.1593
MDA-MB-231细胞	乳腺	1.385	1.399	3336.6549	3366.2854
PC-12细胞	肾上腺	1.381	1.395	3327.8876	3357.5703
MCF-7	乳腺	1.387	1.401	3340.9031	3370.3080

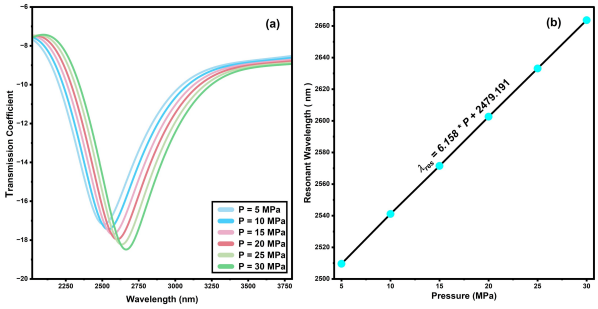

图15：(a) 压力变化时的透射系数特性。(b) 谐振波长随压力的变化。

不同压力水平下获得的透射光谱如图所示。15(a)。随着压力从 5MPa 增至 30 MPa，透射谷呈现出清晰且逐渐加大的红移，每次步进均产生一个清晰分辨且彼此可区分的位移。这一行为凸显了该结构对压力引起的折射率变化的灵敏度。图中进一步绘出了提取出的共振波长位置与所施加压力的函数关系。15 (b)显示，在整个压力范围内，两者呈现出明显的线性趋势。该直线的斜率可直接衡量传感器的压力灵敏度，测得其值为 6.158 nm/MPa，表明该传感器具有高度可靠的响应，适用于实际压力测量应用。

除压力外，我们还研究了温度对传感器响应的影响，因为热稳定性是任何实用传感器件的一项重要指标。利用式19，在压力恒定的条件下，评估了温度范围为 20℃ 至 40℃ 时的谐振波长。图16所示结果表明，在此温度范围内，谐振波长几乎没有变化。这种可忽略不计的热交叉灵敏度，可归因于空气折射率对温度的依赖性很弱

表 8不同一氧化碳2 浓度下 PHMB 层的折射率。[59]

气体浓度 (ppm)	折射率 PHMB 层的
215	1.54
262	1.53
328	1.52
366	1.51

，其变化遵循式19。因此，所提出结构的整体传感性能基本不受环境温度波动的影响，这一特性有利于其在实际环境中稳定、准确地运行。

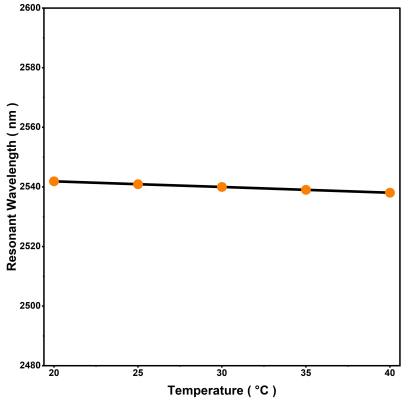

图 16： 不同温度值下谐振波长的变化。

8. 使用$(Ti, Zr)N_x$基传感器进行气体与化学传感

8.1. CO_2 气体浓度传感

所提出的 $(Ti, Zr)N_x$ 传感器通过检测一氧化碳2 气体来评估其环境监测能力。为在室温和大气压下实现高选择性，谐振腔经过功能化处理，涂覆了一层聚六亚甲基双胍（PHMB）聚合物层 [57]，，其含酰胺官能团可实现对一氧化碳2 的选择性检测，无需水蒸气 [58]。一氧化碳2 结合后，聚合物内部电子密度的重新分布会改变其极化率并降低其折射率 [59]。PHMB 层在各对应一氧化碳2 浓度下的折射率值列于表8，由此产生的透射光谱见图17（a）。

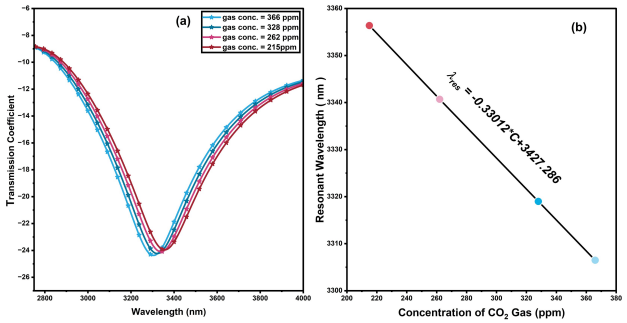

图 17： (a) 所提出的传感器在不同 CO_2 浓度下的透射光谱；(b) 谐振波长随气体浓度的变化。

随着一氧化碳2 浓度从 215 ppm 增加至 366 ppm，PHMB 层的折射率降低，从而使 λ_{res}呈现稳定且清晰可辨的蓝移，同时透射谷始终保持极深。谐振波长与气体浓度呈线性变化，如图17（b）所示，灵敏度为 330.12 pm/ppm，比最接近的可比基于金的 MIM 设计高出一倍以上 [59]，证实了所提出的 $(Ti, Zr)N_x$ 结构在气体传感应用中的优势，表9中的对比进一步印证了这一点。

8.2. 水样中的重金属离子检测

含有微量锌（Zn）、铅（Pb）和汞（Hg）离子的水对人体没有显著影响，但过量摄入可能导致中毒 [63]。通过测试所提出的传感器识别和定量检测关键重金属离子（具体包括水环境中的锌（Zn^{2+}）、铅（Pb^{2+}）和汞（Hg^{2+}）的能力，对其进行评估。随着水样中重金属离子浓度增加，样品的折射率会发生可测量的变化。将离子溶液引入传感器的谐振器后，电磁场会与分析物直接相互作用。这种相互作用会导致谐振波长（λ_{res}）发生偏移，其变化特征因离子种类及其浓度而异。图 18展示了 Zn^{2+}、Pb^{2+}和 Hg^{2+} 在 500 ppm、700 ppm 和 1000 ppm 浓度下的光谱响应。对于这三种金属离子，随着浓度增加，均观察到明显且一致的红移。这一现象直接源于介质折射率较高，从而改变了表面等离激元极化激元的有效光程。即使浓度只有微小变化，透射谷仍保持较深且定义清晰，表明光物质相互作用很强。具体折射率值及相应的谐振波长详见表10。

9. 结论

本研究表明，三元氮化物$(Ti, Zr)N_x$ 是一种可行且在实际应用中具有优势的等离激元材料，可用于基于MIM的折射率传感，填补了现有文献中尚未探索的空白。

表 9所提出的一氧化碳2 气体传感器与此前报道的结构的比较。

参考文献	传感器结构	材料	目标气体	灵敏度
[60]	WDM微环谐振器阵列	SOI上的钯和PHMB	氢气和一氧化碳2	4.83×10^{-4} 皮米/百万分率
[57]	法布里-珀罗干涉腔	单模光纤上的PHMB	CO_2	12.2 皮米/百万分率
[61]	标准微环谐振器	硅微环上的PHMB	CO_2	3.54×10^{-3} 皮米/百万分率
[62]	WGM微气泡谐振器	二氧化硅微气泡上的PHMB	CO_2	0.46 皮米/百万分率
[59]	MIM波导方形腔	金和PHMB	CO_2	135.95 pm/ppm
本研究	矩形环形谐振器	$(Ti, Zr)N_x$ 和 PHMB	CO_2	**330.12 pm/ppm**

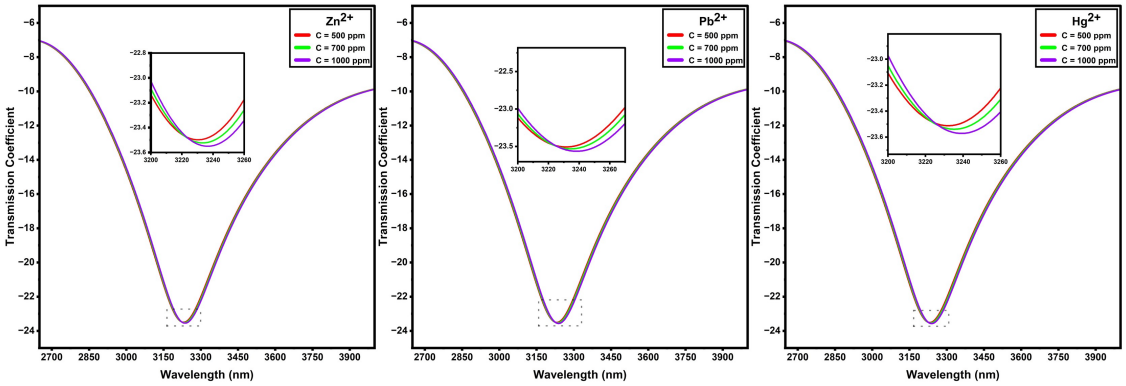

图18：透射光谱　　以及不同浓度水平下 Zn^{2+}、Pb^{2+} 和 Hg^{2+} 离子的共振波长偏移。

表10不同浓度下重金属离子的折射率和谐振波长。

重金属 Ion	浓度 (C) (ppm)	折射索引 [63] (*n*)	共振波长 (λ_{res}) (nm)
Zn^{2+}	500	1.3351	3230.6
	700	1.3365	3233.3
	1000	1.3380	3236.6
Pb^{2+}	500	1.3356	3231.7
	700	1.3370	3234.4
	1000	1.3388	3238.2
Hg^{2+}	500	1.3359	3232.2
	700	1.3374	3235.5
	1000	1.3392	3239.3

文献中。通过将嵌入圆形纳米棒的方形环形谐振器集成到紧凑的MIM架构中，所提出的传感器实现了2146.496 nm/RIU的最高折射率灵敏度，检测限为 4.669×10^{-7} RIU，优于此前报道的CMOS兼容等离激元传感器设计。除了出色的灵敏度外，该传感器还能够检测具有重要临床和环境意义的多类分析物，进一步凸显了这一平台的优势。它能够可靠地区分葡萄糖和血红蛋白浓度、五种主要血液成分，以及六种不同组织类型中的恶性细胞。在物理和化学传感方面，其压力灵敏度达到6.158 nm/MPa，且几乎没有热干扰；通过 PHMB 功能化实现的一氧化碳2 灵敏度达到 330.12 pm/ppm，超过了迄今报道的类似结构。也许最重要的是，与贵金属或二元氮化物同类结构不同，所提出平台的光学特性和传感特性并非在制造完成时便固定不变。IBAD沉积参数 E_a 和 J_a 为调节材料的等离激元响应提供了一种连续、系统的方法，从而可直接在宽广的工作范围内调整传感性能。这种可重构性，加上全面的 CMOS 兼容性以及固有的耐热性和化学稳定性，使基于 $(Ti, Zr)N_x$的金属-绝缘体-金属传感器成为下一代集成式、可调谐且可现场部署的芯片实验室传感系统的可靠基础。

利益冲突声明

作者声明，他们不存在已知的竞争性经济利益或个人关系，这些利益或关系可能会影响本文所报告的工作。

数据可用性

本文所述研究未使用任何数据。

资金

本研究在没有任何外部资金支持的情况下开展。

致谢

写作过程中生成式人工智能和人工智能辅助技术的声明：在准备本稿件期间，作者仅使用人工智能辅助语言工具来改善文本的可读性和语言表达。在使用这些工具后，作者审阅并编辑了全部内容，并对出版物的最终内容承担全部责任。

参考文献

[1] S. A. Maier，《等离激元学：高度集成光学器件的前景》，IEEE Journal of selected topics in Quantum Electronics 12 (6) (2006) 1671–1677。[2] W. L. Barnes，《表面等离激元-极化激元长度尺度：通往亚波长光学的途径》，Journal of optics A: pure and applied optics 8 (4) (2006) S87–S93。[3] D. K. Gramotnev，S. I. Bozhevolnyi，《超越衍射极限的等离激元学》，Nature Photonics 4 (2) (2010) 83–91。[4] Y. Fu，X. Hu，C. Lu，S. Yue，H. Yang，Q. Gong，《基于纳米尺度等离激元狭缝波导的全光逻辑门》，Nano Letters 12 (11) (2012) 5784–5790。[5] M. A. Kabir，A. Taharat，A. I. Keats，A. Rakib，M. Z. A. Rony，R. H. Sagor，《利用硅光子学实现即时检测的高性能基于解复用器的生物芯片实验室传感器》

f

血红蛋白和血钙离子水平，Optics Express 33 (9) (2025) 19788–19809。[6] X. Gao，L. Zhou，X. Y. Yu，W. P. Cao，H. O. Li，H. F. Ma，T. J. Cui，超宽带表面等离激元Y形分束器，Optics Express 23 (18) (2015) 23270–23277。[7] S. Kamada，T. Okamoto，S. E. El-Zohary，M. Haraguchi，基于MIM等离激元波导的马赫-曾德尔干涉仪设计优化与制作，Optics Express 24 (15) (2016) 16224– 16231。[8] A. Taharat，M. A. Kabir，A. I. Keats，A. Rakib，R. H. Sagor，采用三角桁架谐振器的无氧化纳米级光机传感器，用于无串扰双模压力与温度传感，RSC Advances 15 (45) (2025) 37660–37672。[9] R. Rahad，A. Rakib，M. A. Haque，S. S. Sharar，R. H. Sagor，用于糖尿病、贫血和癌症早期诊断的等离激元折射率传感：生物标志物探索，Results in Physics 49 (2023) 106478。[10] C.-T. Chou Chao，Y.-F. Chou Chau，基于法诺共振的高灵敏度多通道等离激元传感器，用于折射率和温度传感，载于：Photonics，第10卷，MDPI，2023年，第82页。[11] A.Taharat，M.A.Kabir，A. I. Keats，A. Rakib，R. H. Sagor，推进光机传感：采用硅-绝缘体-硅波导结构的新型CMOS兼容等离激元压力传感器，Optics Communications 578 (2025) 131495。[12] A. Rakib，R. Rahad，M. O. Faruque，R. H. Sagor，基于ZrN的等离激元传感器：作为传统基于贵金属传感器的有前景替代方案，兼具CMOS兼容性和可调谐光学性质，Optics Express 31 (15) (2023) 25280–25297。[13] M. R. Rakhshani，M. A. Mansouri-Birjandi，高灵敏度等离激元折射率传感及其在人类血型鉴定中的应用，Sensors and Actuators B: Chemical 249 (2017) 168–176。[14] M. R. Rakhshani，M. A. Mansouri-Birjandi，基于金属-绝缘体-金属波导和六边环形腔的高灵敏度等离激元传感器，IEEE Sensors Journal 16 (9) (2016) 3041– 3046。[15] R. Rahad，M. A. Haque，M. O. Faruque，A. S. Mohsin，M. S. Mobassir，R. H. Sagor，一种新型等离激元MIM传感器，采用集成 1× 2 解复用器，用于人血液的单独芯片实验室检测

血型和糖尿病水平，覆盖可见光至近红外区域，IEEE Sensors Journal 24 (8) (2024) 12034–12041。[16] B. Doiron，M. Mota，M. P. Wells，R. Bower，A. Mihai，Y. Li，L. F. Cohen，N. M. Alford，P. K. Petrov，R. F. Oulton 等，量化局域表面等离激元共振应用的品质因数：材料综述，ACS Photonics 6 (2) (2019) 240–259。[17] M. Dasog，过渡金属氮化物正在等离激元领域崭露头角，Chemistry of Materials 34 (10) (2022) 4249–4258。[18] H. Bennett，R. Peck，D. Burge，J. Bennett，.....的形成与生长

f

蒸镀银膜上的变色层，Journal of applied physics 40 (8) (1969) 3351–3360.[19] R. Bower，D. A. Loch，E. Ware，A. Berenov，B. Zou，P. E. Hov- sepian，A. P. Ehiasarian，P. K. Petrov，用于等离激元应用的纳米尺度过渡金属氮化物薄膜的互补金属氧化物半导体兼容沉积，ACS Applied Materials & Interfaces 12 (40) (2020) 45444–45452.[20] U. Guler，G. V. Naik，A. Boltasseva，V. M. Shalaev，A. V. Kildishev，用于局域表面等离激元应用的氮化物替代型等离激元材料性能分析，Applied Physics B 107 (2) (2012) 285–291.[21] I. Tathfif，K. S. Rashid，A. A. Yaseer，R. H. Sagor，嵌入缺陷的替代材料氮化钛折射率传感器：传感领域的新兴解决方案，Results in Physics 29 (2021) 104795.[22] G. V. Naik，V. M. Shalaev，A. Boltasseva，替代等离激元材料：超越金和银，Advanced materials 25 (24) (2013) 3264–3294.[23] Y. Ran，H. Lu，S. Zhao，L. Jia，Q. Guo，C. Gao，Z. Jiang，Z. Wang，$Ti_xZr_{1-x}N_y$三元氮化物薄膜的结构与等离激元性质，Applied Surface Science 476 (2019) 560–568. [24] H. Lu，Y. Ran，S. Zhao，Q. Guo，C. Gao，Z. Jiang，F. Yang，Z. Wang，辅助离子对钛-锆三元氮化物薄膜等离激元特性的调控，Applied Surface Science 505 (2020) 144579.[25] C. M. Soukoulis，T. Koschny，P. Tassin，N.-H. Shen，B. Dastmalchi，什么样的导体适用于超材料或等离激元学，Nanophotonics 4 (1) (2015) 69–74.[26] J. B. Khurgin，A. Boltasseva，反思等离激元学和超材料中的损耗，MRS bulletin 37 (8) (2012) 768–779.[27] W. Cai，U. K. Chettiar，A. V. Kildishev，V. M. Shalaev，利用超材料实现光学隐身，Nature photonics 1 (4) (2007) 224–227. [28] W. Campbell，U. Thomas，新近磨蚀的铜表面上的薄膜，Nature 142 (3588) (1938) 253–254.[29] G. H. Chan，J. Zhao，E. M. Hicks，G. C. Schatz，R. P. Van Duyne，通过纳米球光刻制备的铜纳米颗粒的等离激元性质，Nano letters 7 (7) (2007) 1947–1952. [30] L. Sun，Y. Zhang，Y. He，H. Wang，Y. Su，亚波长结构硅波导与光子器件，Nanophotonics 9 (6) (2020) 1321–1340. [31] D. Burge，J. Bennett，R. Peck，H. Bennett，银表面薄膜的生长，Surface science 16 (1969) 303–320.[32] G. Bemski，金在硅中的复合特性，Physical Review 111 (6) (1958) 1515.[33] M. Popović，M. Novaković，E. Schmidt，P. Schöppe，N. Bibić，C. Ron- ning，Z. Rakočević，低损耗、可调谐的近零介电常数氮化钛，Optical Materials 72 (2017) 775–780. [34] M. Kiwi，J. Rössler，德鲁德模型，Revista Brasileira de Ensino de Física 46 (2024) e20240199.[35] J. Smajic，C. Hafner，L. Raguin，K. Tavzarashvili，M. Mishrikey，等离激元结构分析中数值方法的比较，Journal of Computational and Theoretical Nanoscience 6 (3) (2009) 763–774.[36] S. Adachi，M. Takahashi，通过直流反应溅射沉积的锡膜的光学性质，Journal of Applied Physics 87 (3) (2000) 1264–1269.[37] P. R. West，S. Ishii，G. V. Naik，N. K. Emani，V. M. Shalaev，A. Boltasseva，寻找更优的等离激元材料，Laser & photonics reviews 4 (6) (2010) 795–808.

[38] H. Lu, Y. Ran, S. Zhao, L. Jia, C. Gao, Q. Guo, Z. Jiang, F. Yang, Z. Wang，辅助离子对氮化锆薄膜结构与等离激元性质的影响，Journal of Physics D: Applied Physics 52 (24) (2019) 245102.[39] M. Danaie, A. Shahzadi，基于环形硅谐振器的高分辨率金属-绝缘体-金属等离激元折射率传感器设计，Plasmonics 14 (6) (2019) 1453–1465.[40] M. F. Hassan, R. H. Sagor, M. R. Amin, M. R. Islam, M. S. Alam，利用纳米点增强型等离激元生物传感器即时检测血液电解质和葡萄糖，IEEE Sensors Journal 21 (16) (2021) 17749–17757.[41] M. Butt, S. Khonina, N. Kazanskiy，多通道金属双纳米壁方形开口环谐振器：设计分析与应用，Laser Physics Letters 16 (12) (2019) 126201. [42] S. A. Maier 等，等离激元学：基础与应用，第1卷，Springer，2007. [43] P. Patsalas，氮化锆：光子学和等离激元学的可行候选材料？，Thin Solid Films 688 (2019) 137438.[44] S. Ishii, M.-W. Yu, K.-P. Chen, T. Nagao，等离激元氮化锆中等离激元电效应的观测，Advanced Materials Interfaces 10 (1) (2023) 2201751.[45] M. O. Faruque, R. Al Mahmud, R. H. Sagor 等，基于替代型等离激元材料、具有高灵敏度且兼容 CMOS 的新型等离激元折射率传感器，Journal of Optoelectronics and Advanced Materials 23 (9-10) (2021) 424–432.[46] M. A. Butt, A. Kaźmierczak, N. L. Kazanskiy, S. N. Khonina，基于金属-绝缘体-金属波导的跑道型集成圆形腔及其在折射率传感中的应用，Electronics 10 (12) (2021) 1419.[47] M. R. Rakhshani, A. Tavousi, M. A. Mansouri-Birjandi，基于纳米棒方阵和两个狭缝腔、具有高品质因数的葡萄糖浓度监测等离激元传感器设计，Applied optics 57 (27) (2018) 7798–7804. [48] M. F. Hassan, I. Tathfif, M. Radoan, R. H. Sagor，具有葡萄糖传感能力的同心双环谐振器等离激元折射率传感器，载于：2020年IEEE第10区会议（TENCON），IEEE，2020，第91–96页。 [49] M. Xu, D. P. Papageorgiou, S. Z. Abidi, M. Dao, H. Zhao, G. E. Karniadakis，一种用于镰状细胞贫血红细胞分类的深度卷积神经网络，PLoS Computational Biology 13 (10) (2017) e1005746.[50] A. J. Erslev, J. Caro, E. Kansu, O. Miller, E. Cobbs，红细胞增多症中的血浆促红细胞生成素，The American Journal of Medicine 66 (2) (1979) 243–247.[51] S. Mostufa, A. K. Paul, K. Chakrabarti，利用石墨烯涂层 SPR 生物传感器检测血液中的血红蛋白和尿液样品中的葡萄糖水平，OSA Continuum 4 (8) (2021) 2164–2176.[52] R. Kumar，印度喜马偕尔邦曼迪县育龄期女孩缺铁性贫血（IDA）的患病率及相关认知，International Letters of Natural Sciences 2 (2015).[53] P. Bienstman, S. Werquin, C. L. Arce, D. Witters, R. Puers, J. Lam- mertyn, T. Claes, E. Hallynck, J.-W. Hoste, D. Martens，绝缘体上硅中的纳米光子生物传感器，载于：2013年传感器与执行器国际会议暨第27届欧洲传感器会议（TRANSDUCERS & EUROSENSORS XXVII），IEEE，2013，第2588–2591页。 [54] M. A. Jabin, K. Ahmed, M. J. Rana, B. K. Paul, M. Islam, D. Vi- gneswaran, M. S. Uddin，基于表面等离激元共振的钛涂层生物传感器，用于癌细胞检测，IEEE Photonics Journal 11 (4) (2019) 1–10.[55] Z. Zhang, J. He, B. Du, K. Guo, Y. Wang，基于空芯光子带隙光纤的高灵敏度气体折射率传感器，Optics express 27 (21) (2019) 29649–29658. [56] M. Deng, C.-P. Tang, T. Zhu, Y.-J. Rao, L.-C. Xu, M. Han，利用基于光子晶体光纤的法布里-珀罗干涉仪测量折射率，Applied optics 49 (9) (2010) 1593–1598。

[57] W.Ma,J.Xing, R.Wang,Q.Rong,W.Zhang,Y.Li,J. Zhang,X.Qiao，采用胍衍生物聚合物功能化层的光纤法布里-珀罗干涉式二氧化碳气体传感器，IEEE Sensors Journal 18 (5) (2018) 1924–1929。[58] T. Lang, T. Hirsch, C. Fenzl, F. Brandl, O. S. Wolfbeis，用于检测溶解态和气态二氧化碳的表面等离子体共振传感器，Analytical chemistry 84 (21) (2012) 9085–9088。[59] S. Khonina, N. Kazanskiy, M. A. Butt, A. Kaźmierczak, R. Piramidowicz，基于填充功能材料的金属-绝缘体-金属波导方形环形腔、用于检测二氧化碳气体的等离激元传感器，Optics Express 29 (11) (2021) 16584–16594。[60] G. Mi, C. Horvath, V. Van，用于检测氢气和二氧化碳的硅光子双气体传感器，Optics express 25 (14) (2017) 16250–16259。[61] G. Mi, C. Horvath, M. Aktary, V. Van，用于大气二氧化碳气体监测的硅微环折射式传感器，Optics express 24 (2) (2016) 1773–1780。[62] H. Li, B. Sun, Y. Yuan, J. Yang，胍衍生物聚合物涂层微泡谐振器，用于高灵敏度检测二氧化碳气体浓度，Optics express 27 (3) (2019) 1991–2000。[63] Y. W. Fen, W. M. Yunus, et al.，采用表面等离子体共振技术表征重金属离子的光学性质，Opt. Photonics J 1 (03) (2011) 116–123。