

INTISARI

KAJIAN TEORITIS DAN KOMPUTASI PENGARUH NANOPARTIKEL *CORE-SHELL* TERHADAP KINERJA BIOSENSOR BERBASIS FENOMENA *SURFACE PLASMON RESONANCE* SEBAGAI DETEKSI KONSENTRASI HEMOGLOBIN DALAM DARAH

Telah dilakukan kajian teoritis dan komputasi fenomena *surface plasmon resonance* (SPR) pada sistem biosensor SPR dengan penambahan nanopartikel *core-shell* sebagai detektor konsentrasi Hemoglobin (Hb) pada panjang gelombang 632,8 nm (Data pendukung dari referensi yang diperoleh secara lengkap hanya dalam jangkauan panjang gelombang ini). Pengaruh keterlibatan *core-shell* ditunjukkan melalui kurva reflektansi dan kurva relasi dispersi. Sudut SPR dan atenuasi pantulan total terjadi ketika gelombang *surface plasmon* (SP) terkopel dengan gelombang *evanescent* (*ev*) dan sensitif terhadap perubahan indeks bias material dielektrik yang berada dekat dengan permukaan lapisan tipis logam.

Konfigurasi biosensor SPR pada penelitian ini adalah konfigurasi *Kretschmann*. Model pertama adalah sistem empat lapisan (Prisma/Ag/PEG/Hb), model kedua adalah sistem lima lapisan (Prisma/Ag/*core-shell*/PEG/Hb). Nanopartikel *core-shell* Fe₃O₄@Au tersusun atas material Fe₃O₄ sebagai *core* dan logam Au sebagai *shell*. Permittivitas efektif *core-shell* Fe₃O₄@Au dihitung menggunakan pendekatan *Effective Medium Theory* (EMT). Analisis kuantitatif terhadap dua model yang dibangun ditunjukkan oleh 1) Respon spektrum reflektansi sebagai fungsi sudut datang serta 2) Kurva relasi dispersi. Perhitungan reflektansi dilakukan dengan melakukan variasi ukuran *core-shell* pada 2,5 nm, 5 nm, 7,5 nm dan 10 nm pada fraksi volume tetap dan variasi fraksi volume $F = 0,27; 0,42; 0,61$ dan $0,85$ pada ukuran *core-shell* tetap. Konsentrasi Hb yang dideteksi adalah 20 g/L, 60 g/L, 100 g/L dan 140 g/L. Kinerja biosensor ditunjukkan melalui perhitungan kalibrasi, resolusi, sensitivitas serta peningkatan sensitivitas. Perhitungan relasi dispersi dilakukan untuk mengetahui bahwa variasi ukuran *core-shell*, fraksi volume Fe₃O₄@Au dan ketebalan lapisan berpengaruh terhadap nilai resonansi (kopling). Kurva relasi dispersi diperoleh melalui solusi persamaan Maxwell dengan melibatkan syarat batas antar lapisan yang terlibat. Perhitungan selektifitas belum dilakukan pada penelitian ini karena tidak dilakukan pemantauan reflektivitas terhadap waktu.

Hasil penelitian menunjukkan bahwa variasi ukuran *core*, ketebalan *shell* serta fraksi volume *core-shell* menyebabkan terjadinya pergeseran sudut SPR pada kurva reflektansi. Keterlibatan nanopartikel *core-shell* dapat meningkatkan kinerja sistem biosensor SPR sebagai pendeteksi konsentrasi Hb. Pada sistem BK7/Ag/*core-shell*/PEG/Hb, dengan ukuran *core-shell* 2,5 nm, $F = 0,27$ serta konsentrasi Hb = 20 g/L, menghasilkan kalibrasi $0,022 \text{ } ^\circ/\text{g/L}^{-1}$. Sedangkan resolusinya adalah 0,0476 g/L. Peningkatan sensitivitas yang diperoleh adalah 22,22% dibandingkan dengan sistem biosensor SPR konvensional tanpa keterlibatan *core-shell*.

Kata kunci : *Surface Plasmon Resonance* (SPR), *Core-shell* Fe₃O₄@Au, Hemoglobin (Hb)

ABSTRACT

STUDY ON THEORY AND COMPUTATION OF THE EFFECT OF CORE-SHELL NANOPARTICLE ON THE PERFORMANCE OF THE SURFACE PLASMON RESONANCE (SPR) PHENOMENON-BASED BIOSENSOR

Theoretical and simulation studies have been done related to the phenomenon on surface plasmon resonance (SPR) on the system with the addition of *core-shell* $\text{Fe}_3\text{O}_4@Au$ nanoparticles that was modeled as Hemoglobin (Hb) concentration sensing in the wavelength 632.8 nm, where in this range, the material permittivity have been found completely from references. In this SPR biosensor, the value of SPR angle and the attenuated reflectance occurs when surface plasmon (SP) waves coupled with evanescent wave (*ev*) and very sensitive to a slight change of refractive index of the dielectric or material in the near vicinity of the thin metal surface.

Models were build on two different SPR-based biosensor systems in Kretschmann's configuration. Four-layer (Prism/Ag/PEG/Hb), and five-layer (Prism/Ag/ $\text{Fe}_3\text{O}_4@Au$ /PEG/Hb). Core-shell $\text{Fe}_3\text{O}_4@Au$ is the spherical nanoparticle consisting of a spherical Fe_3O_4 as the core covered by Au shell. Effective permittivity determination of the core-shell $\text{Fe}_3\text{O}_4@Au$ was done by applying the *Effective Medium Theory* approximation. Quantitative analysis of the two model provide a response in the form of 1) Reflectance spectrum as a function of incident angle and 2) Relation Dispersion. The calculation of the reflectance is carried out by varying the size at 2,5 nm, 5 nm, 7,5 nm, and 10 nm and by varying the volume fraction (*F*) of the core-shell at 0,27; 0,42; 0,61 and 0,85. The detected Hb concentration was varying at 20 g/L, 60 g/L, 100 g/L, and 100 g/L. To know how the $\text{Fe}_3\text{O}_4@Au$ in various size, thickness and volume fraction affect the resonance coupling, it will be calculated the dispersion relation curves obtained as the solution of Maxwell's equation involving the interface boundary condition. The selectivity is not calculated in this research because it is needed monitoring the reflectivity to the time.

Our results show that by varying the radius of the core, the shell thickness, and the volume fraction of the core-shell, the dip of the reflectivity (ATR) spectrum is shifted to the larger angle of incident light. The involvement of the core-shell in the SPR-based biosensor leads to enhancement of the SPR biosensor performance for Hb concentration detection. For BK7/Ag/core-shell/PEG/Hb, at the size of the core-shell is 2,5 nm, the volume fraction (*F*) is 0,27 and the Hb concentration is 20 g/L, the simulation results that the calibration value for core-shell involvement configuration is $0,022 \text{ } ^0/\text{gL}^{-1}$, the resolution of Hb concentration detection is 0,0476 g/L, and the sensitivity increased by 22,22 % was compared to the conventional SPR-based biosensor without *core-shell* addition.

Keyword: Surface Plasmon Resonance (SPR), Core-shell $\text{Fe}_3\text{O}_4@Au$, Hemoglobin (Hb).