

# 片上中红外波长调制光谱气体传感技术

皮明权<sup>1,2</sup>,黄一俊<sup>1,2</sup>,郑传涛<sup>1,2</sup>,赵焕<sup>1,2</sup>,彭子航<sup>1,2</sup>,杨悦<sup>1,2\*</sup>,闵昱婷<sup>1,2</sup>,宋芳<sup>1,2</sup>,王一丁<sup>1,2</sup> <sup>1</sup>吉林大学电子科学与工程学院集成光电子学国家重点联合实验室,吉林长春 130012; <sup>2</sup>吉林省红外气体传感技术工程研究中心,吉林长春 130012

**摘要** 制备了下包层为氟化镁、芯层为硫系玻璃的梯形光波导甲烷传感器,采用片上波长调制光谱技术,开展了气体检测实验,将仿真结果与实验结果进行了对比,证明了基于波长调制光谱的仿真模型的准确性。狭缝波导是常用的非悬浮 波导气体传感器结构,优化了下包层为氟化镁、芯层为硫系玻璃的狭缝波导传感器结构,外限制因子达到了42%。根据 实验测试得到的噪声幅值,理论研究了狭缝波导气体传感器和波长调制光谱技术结合的性能,分析了环境压强和工艺误 差对狭缝波导气体传感器性能的影响。本工作为基于波长调制光谱的片上气体传感器的设计提供了指导。

关键词 光波导; 波长调制光谱; 片上集成; 光波导传感器; 气体传感器 中图分类号 TN252 文献标志码 A

#### DOI: 10.3788/AOS231328

## 1引言

近年来,光学气体传感器逐渐由体积较大的分立 系统<sup>[18]</sup>向片上集成系统<sup>[9]</sup>演变,片上集成的光波导气 体传感器具有便携、功耗小、无需光路校准等优点。 2019年,Zhang等<sup>[9]</sup>在近红外波段实现了单一芯片上 的光源、探测器和传感波导的集成并用于气体检测。 气体分子在中红外波段的吸收系数比近红外大,所以 使用片上传感器在中红外波段进行气体检测可以获得 更好的性能。在单一芯片上集成中红外光源<sup>[10]</sup>和探测 器<sup>[11]</sup>是可行的,这为中红外气体传感系统的小型化提 供了支持。由于二氧化硅(SiO<sub>2</sub>)在中红外波段的损耗 相对较大,常用的绝缘衬底上的硅(SOI)材料体系不 适用于中红外波段,因此,片上气体传感器需要采用硫 系玻璃<sup>[12]</sup>、锗<sup>[13]</sup>等中红外透明材料来拓宽工作波段。

在片上传感技术方面,与广泛使用的直接吸收光 谱(DAS)技术相比,具有抑制噪声能力的波长调制光 谱(WMS)技术很少用于片上波导气体传感器。虽然 小型化是片上气体传感器的特点和优势,但是片上传 感器的光程同样也减小了,光程长度一般为厘米量级, 这限制了片上传感器的性能。因此,使用先进的中红 外激光气体传感技术可以补偿光程减小带来的传感性 能变差的问题。此外,提高波导的外限制因子(γ)也可 以提升传感器的性能,γ表示了光与分析物的作用效 果。条形波导的γ相对较小,但是其制备难度低,以矩 形波导为平台获取相关实验数据不失一般性,而且依据其实验结果进行仿真,可以提升其他类型片上气体 传感器仿真结果的准确性。狭缝波导是典型的波导传 感器结构,具有较大的γ<sup>[14+7]</sup>,是片上传感器的研究热 点。但是其制备难度较大,狭缝的宽度一般小于 100 nm,需要电子束曝光技术满足光刻精度需求,但 是该工艺技术成本较高,同时该结构对刻蚀参数要求 较高,需要获得垂直的狭缝侧壁,所以对狭缝波导的理 论研究工作较多。狭缝波导尚未与WMS技术结合进 行气体检测,因此对狭缝波导进行理论分析可以为实 验工作提供理论支持。

针对以上问题,本文主要探究了基于中红外硫系玻 璃材料的光波导气体传感器,利用剥离法制备了下包层 为氟化镁(MgF<sub>2</sub>)、芯层为硫系玻璃的波导,在3291 nm 波长处,利用WMS技术,开展了甲烷(CH<sub>4</sub>)检测实验。 优化了狭缝波导的结构后,在实验结果的基础上,根据 实验测试得到的噪声,理论分析了狭缝波导气体传感器 结合WMS技术的性能,研究了环境压强和工艺误差对 狭缝波导气体传感器性能的影响。本工作为基于WMS 的片上气体传感器的设计与制备提供了指导。

2 梯形光波导甲烷传感器的制备与 测试

## 2.1 传感原理

传感波导及系统的示意图如图1(a)所示,系统的

收稿日期: 2023-07-28; 修回日期: 2023-08-09; 录用日期: 2023-08-16; 网络首发日期: 2023-08-26

**基金项目**:国家自然科学基金(62175087,62235016,61960206004,62105118)、吉林省科技发展计划(20230201054GX)、长春市 重点研发项目(21ZGN24)

通信作者: \*yangyue@jlu.edu.cn

#### 第 43 卷 第 18 期/2023 年 9 月/光学学报

主要单元为光源和探测器,传感波导的长度为L。 基于红外吸收光谱的片上气体传感原理遵循朗 伯-比尔定律。光场的外限制因子γ<sup>[18]</sup>可以表示为

$$\gamma = \frac{n_{g} \iint_{gas} \epsilon(x, y) |E(x, y)|^{2} dx dy}{\iint_{total} \epsilon(x, y) |E(x, y)|^{2} dx dy}, \qquad (1)$$

式中:ng为群折射率; c为介电常数; E为电场强度。

在WMS技术中,在激光器的驱动信号上叠加高频调制信号,对吸收信号解调并提取二次谐波,二次谐波的幅值反映了气体浓度<sup>[19-21]</sup>。仿真WMS传感性能时,需要用到激光器的输出功率和输出波长随驱动电流的变化特性、气体吸收系数随波长的变化特性。详细的仿真方法可以参考先前的报道<sup>[22-23]</sup>。



图1 传感波导结构。(a)传感波导及系统的示意图;(b)梯形波导的截面结构;(c)狭缝波导的截面结构

Fig. 1 Sensing waveguide structure. (a) Schematic diagram of sensing waveguide and system; (b) cross-section structure of trapezoidal waveguide; (c) cross-section structure of slot waveguide

## 2.2 波导结构

波导的下包层为 MgF<sub>2</sub>, MgF<sub>2</sub>在中红外波段中具 有较高的透过率, 折射率约为1.4。波导的芯层为硫 系玻璃, 所用的硫系玻璃材料为 Ge<sub>28</sub>Sb<sub>12</sub>Se<sub>60</sub>, 折射率约 为2.6。梯形波导的截面结构如图1(b)所示。波导的 制备流程如下:用热蒸发法(IT-302, LJUHV)在硅 (Si)衬底上沉积 MgF<sub>2</sub>薄膜;用剥离法在 MgF<sub>2</sub>包层上 制备 Ge<sub>28</sub>Sb<sub>12</sub>Se<sub>60</sub>芯层。波导的上包层为 CH<sub>4</sub>, 目标吸 收波长为 3291 nm。传感波导的长度为2 cm。波导截 面的扫描电子显微镜图像如图 2 所示, 芯层呈现梯形 结构, 这是由剥离法的特性造成的。使用 COMSOL 软件进行仿真计算得到  $\gamma$ =8%。在波导上集成了聚 二甲基硅氧烷(PDMS)气室用于后续的气体传感 实验。

#### 2.3 传感系统

基于 WMS 的波导气体传感系统图如图 3 所示。 正交锁相放大器的功能由基于 LabVIEW 的锁相放大器实现。电流驱动器和温度控制器用于驱动带间级联激光器 (ICL, Nanoplus,德国)。ICL 发射的波长约 3291 nm 的光,通过反射形准直器 (RC08, Thorlabs,美国)耦合到单模氟化铟 (InF<sub>3</sub>)光纤 (Le Verre Fluoré,法国)。对波导与单模光纤进行端面耦合,用碲镉汞 (MCT)探测器 (PVI-4TE-5, VIGO System,波兰)探测波导的输出光。探测器输出的信号由数据采集卡 (USB6361, National Instruments,美国)采集,由 LabVIEW 进行数据处理,得到二次谐波信号。数据采







Fig. 3 Diagram of waveguide gas sensor system based on WMS

集卡产生叠加正弦波与三角波的信号用于控制电流驱动器,以驱动ICL。气体混合系统(Series 4000, Environics,芬兰)控制纯CH4和纯氮气的流速,以获得不同体积分数的CH4气体样品。仿真的纯CH4在 3291 nm波长的吸收光谱如图4所示,光程为1 cm。

#### 2.4 传感性能

对基于WMS的波导传感器性能进行了分析。将体积分数分别为0、1×10<sup>-1</sup>、2×10<sup>-1</sup>、3×10<sup>-1</sup>和4×10<sup>-1</sup>的CH<sub>4</sub>样品通入PDMS气室。将CH<sub>4</sub>样品注入气室之前,将纯N<sub>2</sub>通入气室以除去残留的CH<sub>4</sub>。图5(a)为CH<sub>4</sub>体积分数4×10<sup>-1</sup>条件下,测得的二次谐波信号。图5(b)为CH<sub>4</sub>体积分数从0到4×10<sup>-1</sup>条件下,二次谐波幅值数据点、相应拟合结果以及仿真的二次谐波幅值数据点。传感器的线性度较高,仿真结果与实验结果吻合较好,表明仿真模型具有较好的准确性,为后续狭缝波导气体传感器的仿真提供了支持。将纯





N₂通入气室,此时气体对光没有吸收,测得系统的噪声水平为0.15 mV,之后将根据实验测得的噪声结果进行理论研究。



图 5 CH<sub>4</sub>传感结果。(a)CH<sub>4</sub>体积分数4×10<sup>-1</sup>下的二次谐波信号;(b)不同甲烷体积分数下的二次谐波幅值、二次谐波幅值拟合结 果和仿真的二次谐波幅值

Fig. 5 CH<sub>4</sub> sensing results. (a) 2f signal under CH<sub>4</sub> volume fraction of  $4 \times 10^{-1}$ ; (b) 2f signal amplitude, fitting result of the 2f signal amplitude, and simulated 2f signal amplitude under different CH<sub>4</sub> volume fractions

## 3 狭缝波导传感器优化与性能模拟

## 3.1 狭缝波导的结构优化

狭缝波导的截面结构如图1(c)所示,狭缝波导在 非悬浮结构的波导中具有较大的γ,结构较悬浮波导 更加稳定。接下来,研究狭缝波导传感器的性能。设 定狭缝波导的下包层为 $MgF_2$ ,芯层为 $Ge_{28}Sb_{12}Se_{60}$ 。 在优化狭缝波导时,需要使狭缝波导的有效折射率大 于 $MgF_2$ 的折射率(1.36),获取较大的 $\gamma$ ,并考虑制备 工艺的可行性。 $\gamma$ 和波导的TE模式有效折射率随芯 层厚度的变化如图 6(a)所示,此时狭缝宽度为 50 nm,狭缝两侧条形结构的宽度为 0.6  $\mu$ m。 $\gamma$  和波



图 6 狭缝波导的优化。(a)γ和波导的TE模式有效折射率随芯层厚度的变化;(b)γ和波导的TE模式有效折射率随狭缝两侧条形 结构宽度的变化;(c)γ和波导的TE模式有效折射率随狭缝宽度的变化



导的有效折射率随芯层厚度的增大而增大,芯层厚度 要大于 390 nm 才能满足导模条件。同时,为了便于 狭缝的制备,需要尽可能地减小芯层厚度来降低刻蚀 难度,因此芯层厚度取为0.4 μm,芯层厚度可以通过 校准热蒸发设备的膜厚仪来保障。y 和波导的 TE 模 式有效折射率随狭缝两侧条形结构的宽度的变化如 图 6(b) 所示,此时狭缝宽度为 50 nm,芯层厚度为 0.4 μm。γ和波导的有效折射率随狭缝两侧条形结 构的宽度的增大而增大,狭缝两侧条形结构的宽度要 大于 590 nm 才能满足导模条件,狭缝两侧条形结构 的宽度对γ的影响相对于芯层厚度的影响较小,因此 狭缝两侧条形结构的宽度取 0.6 μm,狭缝两侧条形 结构的宽度可以通过优化光刻和刻蚀的工艺参数得 到保障。γ和波导的 TE 模式有效折射率随狭缝宽度 的变化如图 6(c)所示,此时狭缝两侧条形结构的宽 度为0.6 μm,芯层厚度为0.4 μm。γ和波导的有效折 射率随狭缝宽度的增大而减小,狭缝宽度要小于 55 nm 才能满足导模条件,狭缝宽度太小又会增加制 备难度,所以狭缝宽度取50 nm,狭缝宽度可以通过 优化光刻和刻蚀的工艺参数得到保障。狭缝宽度为

50 nm、芯层厚度为 0.4  $\mu$ m、狭缝两侧条形结构的宽 度为 0.6  $\mu$ m 时, 仿真得到  $\gamma$ =0.42, 光场分布见图 7 (a)的插图。

#### 3.2 狭缝波导传感器的性能模拟

狭缝波导传感器的二次谐波幅值在不同波导损耗  $\alpha_{wG}$ 条件下随L的变化如图7(a)所示,这里CH<sub>4</sub>体积分数 $C=1\times10^{-2}$ 。对于WMS技术,线性传感系统的检测下限( $C_{min}$ )<sup>[21]</sup>可以表示为

$$C_{\min} = C/R_{\mathrm{sn}\,\circ} \tag{2}$$

根据 2.4节的实验结果,取噪声幅值为 0.2 mV。 在不同  $\alpha_{wG}$ 条件下,狭缝波导传感器的  $C_{min}$ 随 L 的变化 如图 7(b)所示。可以发现,当  $\alpha_{wG}$ =0 dB/cm时,二次 谐波幅值随 L 的增加而线性增大。当  $\alpha_{wG}$ =3 dB/cm、 长度为  $L_{opt}$ 时,狭缝波导的  $C_{min}$ 约为 1×10<sup>-3</sup>。所以,当  $\alpha_{wG}$ <3 dB/cm时, $C_{min}$ 才可以小于 1×10<sup>-3</sup>,此时不同 损耗条件下的  $L_{opt}$ <5 cm。可知,同时制备长度为 1 cm、2 cm、3 cm、4 cm和 5 cm的波导可以尽可能地使 波导长度接近于不同  $\alpha_{wG}$ 条件下的  $L_{opt}$ ,最大限度地避 免波导损耗变化带来的影响。此外,进一步减小系统 的噪声也可以降低  $C_{min}$ 。



图 7 狭缝波导的仿真性能结果。(a)不同 $\alpha_{wG}$ 条件下,2f幅值随L的变化(插图:狭缝波导的光场分布);(b)不同 $\alpha_{wG}$ 条件下, $C_{min}$ 随L 的变化

Fig. 7 Simulation performance results of slot waveguide. (a) Variation of 2f signal amplitude with L under different  $\alpha_{WG}$  conditions (inset: optical field distribution of slot waveguides); (b) variation of  $C_{\min}$  with L under different  $\alpha_{WG}$  conditions

#### 3.3 环境压强对狭缝波导传感器的影响

环境压强会影响气体分子的吸收系数,以上仿真和实验工作是在常压环境下进行的,之后将理论分析改变环境压强对狭缝波导气体传感器性能的影响。改变气体分子的吸收系数将直接影响二次谐波的幅度。从图7的仿真结果可知,在狭缝波导损耗为3dB/cm、长度为1 cm、环境压强为1×10<sup>5</sup> Pa时,仿真的二次谐波幅度为1.81 mV, $C_{min}$ 为1.1×10<sup>-3</sup>。在环境压强为7×10<sup>4</sup>~1.3×10<sup>5</sup> Pa的范围内,环境压强对二次谐波的幅度和 $C_{min}$ 的影响如图8所示。随着压强的增大,气体分子的吸收系数减小,导致二次谐波幅度的降低和 $C_{min}$ 的升高,但是在该压强变化范围内, $C_{min}$ 的变化量小于1.2×10<sup>-5</sup>,因此环境压强变化带来的影响可以忽略。



图 8 环境压强对二次谐波的幅度和 C<sub>min</sub>的影响 Fig. 8 Influence of environmental pressure on the 2f signal amplitude and C<sub>min</sub>

#### 第 43 卷 第 18 期/2023 年 9 月/光学学报

#### 3.4 工艺误差对狭缝波导传感器的影响

工艺误差会直接影响γ,之后将理论分析工艺误 差对狭缝波导气体传感器性能的影响。在狭缝波导 损耗为3dB/cm、长度为1cm时,工艺误差对狭缝波 导传感器的影响如图9所示。芯层厚度的误差和狭 缝两侧条形结构的宽度的误差在±0.2 μm范围内 时, $\gamma$ 的相对误差分别在±8%和±5%范围内, $C_{min}$ 在±1×10<sup>-4</sup>范围内。狭缝宽度的误差在±5 nm范围 内时, $\gamma$ 的相对误差在±2%范围内, $C_{min}$ 在±7×10<sup>-5</sup> 范围内。在工艺较成熟的条件下,芯层厚度的误差对 传感器性能的影响最大,因此需要通过控制工艺精度 来确保芯层厚度的大小。



图 9 工艺误差对狭缝波导传感器性能的影响。(a)γ的相对误差和 C<sub>min</sub>随芯层厚度的变化;(b)γ的相对误差和 C<sub>min</sub>随狭缝两侧条形 结构宽度的变化;(c)γ的相对误差和 C<sub>min</sub>随狭缝宽度的变化

Fig. 9 Influence of fabrication errors on slot waveguide sensor performance. (a) Relative error of  $\gamma$  and  $C_{\min}$  with core layer height; (b) relative error of  $\gamma$  and  $C_{\min}$  with ridge width; (c) relative error of  $\gamma$  and  $C_{\min}$  with slot width

## 4 结 论

本文制备了下包层为MgF2、芯层为Ge28Sb12Se60的 光波导CH4传感器,将WMS技术与片上光波导气体 传感器相结合,进行了CH<sub>4</sub>传感实验,实验测试得到的 二次谐波幅度与仿真结果一致,证明了仿真模型的准 确性。根据实验测得的系统噪声结果,研究了狭缝波 导CH,传感器结合WMS技术后的性能,仿真了波导 参数对狭缝波导传感器性能的影响,减小 $\alpha_{wc}$ 选择合 适的波导长度可以增加二次谐波幅值,提升传感器的 性能。当 $\alpha_{wg} < 3 \text{ dB/cm}$ 时,  $C_{min} < 1 \times 10^{-3}$ 。理论分析 了环境压强和工艺误差对狭缝波导气体传感器性能的 影响,在狭缝波导损耗为3dB/cm,长度为1cm,环境 压在 $7 \times 10^4 \sim 1.3 \times 10^5$  Pa范围内变化时,  $C_{\min}$ 的变化量 小于1.2×10<sup>-5</sup>,环境压强变化带来的影响可以忽略。 芯层厚度的误差对传感器性能的影响最大,所以需要 确保芯层厚度的大小。本工作为基于WMS的片上气 体传感器的设计提供了指导。

#### 参考文献

- 张海鹏,郑凯元,李俊豪,等.离轴积分腔输出光谱气体传感 降噪技术[J].光学学报,2021,41(24):2430002.
   Zhang H P, Zheng K Y, Li J H, et al. Denoising technique in gas sensing based on off-axis integrated cavity output spectroscopy[J]. Acta Optica Sinica, 2021, 41(24): 2430002.
- [2] Zheng C T, Ye W L, Sanchez N P, et al. Development and field deployment of a mid-infrared methane sensor without pressure control using interband cascade laser absorption spectroscopy[J]. Sensors and Actuators B: Chemical, 2017, 244: 365-372.
- [3] Liu Z W, Zheng C T, Zhang T Y, et al. Midinfrared sensor system based on tunable laser absorption spectroscopy for dissolved carbon dioxide analysis in the South China Sea: system

-level integration and deployment[J]. Analytical Chemistry, 2020, 92(12): 8178-8185.

- [4] Zheng K Y, Zheng C T, Li J H, et al. Near-infrared methane sensor system using off-axis integrated cavity output spectroscopy with novel dual-input dual-output coupling scheme for mode noise suppression[J]. Sensors and Actuators B: Chemical, 2020, 308: 127674.
- [5] Zheng K Y, Zheng C T, Ma N N, et al. Near-infrared broadband cavity-enhanced spectroscopic multigas sensor using a 1650 nm light emitting diode[J]. ACS Sensors, 2019, 4(7): 1899-1908.
- [6] 赵之豪,陈兵,邓昊,等.基于高灵敏中红外吸收光谱的FeNO 检测方法[J].光学学报,2022,42(21):2130001.
  Zhao Z H, Chen B, Deng H, et al. FeNO detection method based on high sensitive mid-infrared absorption spectrum[J]. Acta Optica Sinica, 2022, 42(21):2130001.
- [7] 李振钢,刘家祥,司赶上,等.H型差分光声池的优化设计及 NO<sub>2</sub>气体检测研究[J].光学学报,2022,42(18):1830004.
  Li Z G, Liu J X, Si G S, et al. Optimal design of H-type differential photoacoustic cell and research on NO<sub>2</sub> gas detection [J]. Acta Optica Sinica, 2022, 42(18):1830004.
- [8] 董磊,武红鹏,郑华丹,等.石英增强光声传感技术研究进展
  [J].中国激光,2018,45(9):0911004.
  Dong L, Wu H P, Zheng H D, et al. Recent progress in quartzenhanced photoacoustic spectroscopy[J]. Chinese Journal of Lasers, 2018, 45(9): 0911004.
- [9] Zhang E J, Martin Y, Orcutt J S, et al. Monolithically integrated silicon photonic chip sensor for near-infrared trace-gas spectroscopy[J]. Proceedings of SPIE, 2019, 11010: 110100B.
- [10] Lin H T, Kim C S, Li L, et al. Monolithic chalcogenide glass waveguide integrated interband cascaded laser[J]. Optical Materials Express, 2021, 11(9): 2869-2876.
- [11] Su P, Han Z, Kita D, et al. Monolithic on-chip mid-IR methane gas sensor with waveguide-integrated detector[J]. Applied Physics Letters, 2019, 114(5): 051103.
- [12] Pi M Q, Zheng C T, Ji J L, et al. Surface-enhanced infrared absorption spectroscopic chalcogenide waveguide sensor using a silver island film[J]. ACS Applied Materials & Interfaces, 2021, 13(27): 32555-32563.
- [13] Griskeviciute U, Millar R W, Gallacher K, et al. Ge-on-Si waveguides for sensing in the molecular fingerprint regime[J].

#### 第 43 卷 第 18 期/2023 年 9 月/光学学报

Optics Express, 2020, 28(4): 5749-5757.

- [14] Kumari B, Barh A, Varshney R K, et al. Silicon-on-nitride slot waveguide: a promising platform as mid-IR trace gas sensor[J]. Sensors and Actuators B: Chemical, 2016, 236: 759-764.
- [15] Kumari B, Varshney R K, Pal B P. Design of chip scale silicon rib slot waveguide for sub-ppm detection of N<sub>2</sub>O gas at mid-IR band[J]. Sensors and Actuators B: Chemical, 2018, 255: 3409-3416.
- [16] Pi M Q, Zheng C T, Bi R, et al. Design of a mid-infrared suspended chalcogenide/silica-on-silicon slot-waveguide spectroscopic gas sensor with enhanced light-gas interaction effect[J]. Sensors and Actuators B: Chemical, 2019, 297: 126732.
- [17] Pi M Q, Zheng C T, Peng Z H, et al. Theoretical study of microcavity-enhanced absorption spectroscopy for mid-infrared methane detection using a chalcogenide/silica-on-fluoride horizontal slot-waveguide racetrack resonator[J]. Optics Express, 2020, 28(15): 21432-21446.
- [18] Vlk M, Datta A, Alberti S, et al. Extraordinary evanescent field confinement waveguide sensor for mid-infrared trace gas spectroscopy[J]. Light: Science & Applications, 2021, 10: 26.

- [19] Li C G, Zheng C T, Dong L, et al. Ppb-level mid-infrared ethane detection based on three measurement schemes using a 3.34- μm continuous-wave interband cascade laser[J]. Applied Physics B, 2016, 122(7): 185.
- [20] Bi R, Pi M Q, Zheng C T, et al. A niobium pentoxide waveguide sensor for on-chip mid-infrared absorption spectroscopic methane measurement[J]. Sensors and Actuators B: Chemical, 2023, 382: 133567.
- [21] Pi M Q, Zheng C T, Zhao H, et al. Ultra-wideband midinfrared chalcogenide suspended nanorib waveguide gas sensors with exceptionally high external confinement factor beyond freespace[J]. ACS Nano, 2023: 02699.
- [22] Pi M Q, Huang Y J, Zhao H, et al. Theoretical and experimental investigation of on-chip mid-infrared chalcogenide waveguide CH<sub>4</sub> sensor based on wavelength modulation spectroscopy[J]. Sensors and Actuators B: Chemical, 2022, 362: 131782.

## On-Chip Mid-Infrared Wavelength Modulation Spectroscopy Gas Sensing Technique

Pi Mingquan<sup>1,2</sup>, Huang Yijun<sup>1,2</sup>, Zheng Chuantao<sup>1,2</sup>, Zhao Huan<sup>1,2</sup>, Peng Zihang<sup>1,2</sup>, Yang Yue<sup>1,2\*</sup>, Min Yuting<sup>1,2</sup>, Song Fang<sup>1,2</sup>, Wang Yiding<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>State Key Laboratory of Integrated Optoelectronics, College of Electronic Science and Engineering, Jilin University, Changchun 130012, Jilin, China;

 $^{2} \textit{Jilin Provincial Engineering Research Center of Infrared Gas Sensing Technique, Changchun 130012, \textit{Jilin, Provincial Engineering Research Center of Infrared Gas Sensing Technique, Changchun 130012, \textit{Jilin, Provincial Engineering Research Center of Infrared Gas Sensing Technique, Changchun 130012, \textit{Jilin, Provincial Engineering Research Center of Infrared Gas Sensing Technique, Changchun 130012, \textit{Jilin, Provincial Engineering Research Center of Infrared Gas Sensing Technique, Changchun 130012, \textit{Jilin, Provincial Engineering Research Center of Infrared Gas Sensing Technique, Changchun 130012, \textit{Jilin, Provincial Engineering Research Center of Infrared Gas Sensing Technique, Changchun 130012, \textit{Jilin, Provincial Engineering Research Center of Infrared Gas Sensing Technique, Changchun 130012, \textit{Jilin, Provincial Engineering Research Center of Infrared Gas Sensing Technique, Changchun 130012, \textit{Jilin, Provincial Engineering Research Center of Infrared Gas Sensing Technique, Changchun 130012, \textit{Jilin, Provincial Engineering Research Center of Infrared Gas Sensing Technique, Changchun 130012, \textit{Jilin, Provincial Engineering Research Center of Infrared Gas Sensing Technique, Changchun 130012, \textit{Jilin, Provincial Engineering Research Center of Infrared Gas Sensing Technique, Changchun 130012, \textit{Jilin, Provincial Engineering Research Center of Infrared Gas Sensing Technique, Changchun 130012, \textit{Jilin, Provincial Engineering Research Center of Infrared Gas Sensing Technique, Changchun 130012, \textit{Jilin, Provincial Engineering Research Center of Infrared Gas Sensing Technique, Changchun 130012, \textit{Jilin, Provincial Engineering Research Center of Infrared Gas Sensing Technique, Changchun 130012, \textit{Jilin, Provincial Engineering Research Center of Infrared Gas Sensing Technique, Changchun 130012, \textit{Jilin, Provincial Engineering Research Center of Infrared Gas Sensing Research Center of Sensing Research Center$ 

China

#### Abstract

**Objective** On-chip gas sensor based on infrared absorption spectroscopy is useful for environmental detection because of its small size and low power consumption. Direct absorption spectroscopy is a commonly used detection technique for on-chip gas sensors, but the noise of this detection method is high. The wavelength modulation spectroscopy technique can suppress noise. The combination of the wavelength modulation spectroscopy technique with the on-chip gas sensor can improve the performance of the sensor. However, the waveguide parameters including external confinement factor, loss, and length influence the second harmonic signal. A slot waveguide can increase the external confinement factor by using the mode field distributed in the slot for sensing. We provide guidance for the design of on-chip gas sensors based on wavelength modulation spectroscopy.

**Methods** The optical field distribution results and external confinement factor are obtained by COMSOL Multiphysics with electromagnetic waves and frequency domain module. The optical parameters of the waveguide are set at the wavelength of 3291 nm. The chalcogenide rectangular waveguide is fabricated by the lift-off method. The process of the lift-off method includes spinning photoresist, lithography, development, thermal evaporation, and removal of photoresist. The noise of the waveguide sensing system is used for simulation analysis. The second harmonic signal amplitude of the on-chip gas sensor is simulated by MATLAB. The important parameters of the simulation model include gas absorption parameters at 3291 nm, waveguide parameters, and laser parameters. The simulated limit of detection is calculated based on the signal-to-noise ratio.

**Results and Discussions** The trapezoid waveguide morphology is shown in Fig. 2, and the external confinement factor of the waveguide is about 8%. The  $CH_4$  sensing results based on wavelength modulation spectroscopy at 3291 nm show that the response result is linear (Fig. 5). The slot waveguide structure with magnesium fluoride as the lower cladding

layer and chalcogenide glass as the core layer is optimized, and the external confinement factor reaches 42% (Fig. 6). Based on the experimental results, the effects of waveguide loss and waveguide length on the second harmonic signal amplitude are studied (Fig. 7). Decreasing waveguide loss and selecting an appropriate waveguide length can increase the sensing performance. The influence of the change of environmental pressure on the slot waveguide sensor can be ignored (Fig. 8). The influence of fabrication errors on slot waveguide sensor performance is analyzed (Fig. 9).

**Conclusions** In this paper, an optical waveguide  $CH_4$  sensor with a lower cladding of magnesium fluoride and a core layer of chalcogenide glass is fabricated. With the combination of wavelength modulation spectroscopy technique and on-chip optical waveguide gas sensor, the  $CH_4$  sensing performance is analyzed. The performance of the slot waveguide  $CH_4$  sensor combined with the wavelength modulation spectroscopy technique is studied. Decreasing waveguide loss and choosing an appropriate waveguide length can increase the amplitude of the second harmonic signal and improve the performance of the waveguide gas sensor. When the waveguide loss is <3 dB/cm, the limit of detection can be  $<1 \times 10^{-3}$ . Further reducing the noise of the system can also reduce the limit of detection. The influence of the change of environmental pressure on the slot waveguide sensor can be ignored. The influence of fabrication errors on slot waveguide sensor performance is analyzed. We provide guidance for the design of an on-chip gas sensor based on wavelength modulation spectroscopy.

**Key words** optical waveguide; wavelength modulation spectroscopy; on-chip integration; optical waveguide sensor; gas sensor