

引用格式: WANG Xueying, ZHANG Zhening, PI Mingquan, et al. On-chip Mid-infrared Indium Gallium Arsenic Suspended Waveguide Gas Sensors[J]. Acta Photonica Sinica, 2023, 52(10):1052414  
王雪莹,张哲宁,皮明权,等.片上中红外铟镓砷悬浮波导气体传感器[J].光子学报,2023,52(10):1052414

# 片上中红外铟镓砷悬浮波导气体传感器

王雪莹<sup>1,2</sup>,张哲宁<sup>1,2</sup>,皮明权<sup>1,2</sup>,彭子航<sup>1,2</sup>,郑传涛<sup>1,2</sup>,宋芳<sup>1,2</sup>,杨悦<sup>1,2</sup>,  
王一丁<sup>1,2</sup>

(1 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大学实验区,长春 130012)

(2 吉林省红外气体传感技术工程研究中心,长春 130012)

**摘要:**为研究中红外波段的片上波导传感性能,针对  $2\ 172.75\ \text{cm}^{-1}$  处的一氧化碳吸收线,提出基于 InGaAs-InP 平台的悬浮光子晶体波导传感器和悬浮脊形波导传感器。基于朗伯—比尔定律,通过 Rsoft 和 COMSOL 软件设计波导结构,优化了光子晶体波导的晶格常数、孔半径、中心孔半径和脊形波导的脊宽、条宽、脊高和条高。仿真结果表明,光子晶体波导和脊形波导的功率限制因子分别为 250.69% 和 115.65%。对两种传感器进行计算和性能评估,得到两种传感器的传输损耗分别为 27.5 dB/cm 和 3 dB/cm,最佳波导长度分别为  $72\ \mu\text{m}$  和  $162\ \mu\text{m}$ 。设定探测器最小可检测信噪比为 10,得到两种传感器的最小可检测气体浓度分别为  $9.13 \times 10^{-6}$  和  $8.51 \times 10^{-6}$ 。讨论了波导传输损耗对传感器性能的影响,若能有效降低波导损耗,可进一步降低最小可检测气体浓度。对比两种传感器,光子晶体波导具有更大的功率限制因子,脊形波导具有低传输损耗和横磁模兼容性的优点。

**关键词:**波导传感器;中红外;吸收光谱;气体传感器;光子晶体波导;脊形波导

中图分类号:TN252

文献标识码:A

doi:10.3788/gzxb20235210.1052414

## 0 引言

近年来,中红外光子学在工业、军事和公共安全领域中的应用被广泛研究和报道。大多数气体分子在中红外光谱范围( $2.5\sim 20\ \mu\text{m}$ )内具有振动特征吸收峰<sup>[1]</sup>,这一特性可应用于痕量气体检测和定量分析。人们通常围绕气室、傅里叶变换红外光谱或光声光谱方法、基于腔衰荡光谱的自由空间光学和可调谐二极管激光吸收光谱法开展中红外痕量气体传感系统研究。该类系统可以实现十亿分之一甚至万亿分之一的灵敏度,但这依赖于庞大的体积和昂贵的光学元件<sup>[2]</sup>。片上波导传感器体积小、功耗低,更适用于环境检测<sup>[3]</sup>、生物检测<sup>[4]</sup>、临床诊断<sup>[5]</sup>和气体测量<sup>[6]</sup>等便携应用。

到目前为止,用于中红外光子器件的几种低损耗材料平台,例如绝缘体上硅(Silicon-On-Insulator, SOI)、蓝宝石上硅(Silicon-On-Sapphire, SOS)、硅上锗(Germanium-On-Silicon, GOS)、锗(Ge)、Ge-GaAs、GaAs-AlGaAs 和 InGaAs-InP,覆盖了波长  $\lambda = 3\sim 15\ \mu\text{m}$  的整个分子指纹吸收区域<sup>[2]</sup>。尽管硅(Si)在波长  $< 8.5\ \mu\text{m}$  时具有低吸收损耗<sup>[7]</sup>,但二氧化硅( $\text{SiO}_2$ )仅在  $3.6\ \mu\text{m}$  以下透明<sup>[8]</sup>,因此 SOI 平台在中红外波段的吸收损耗较大<sup>[9]</sup>。InGaAs-InP 平台是非常适合作为中红外气体传感的波导材料。首先,InGaAs 和 InP 材料在  $3\sim 15\ \mu\text{m}$  波段近乎完全透明<sup>[3]</sup>;其次,中红外光源主要为量子级联激光器(Quantum Cascade Laser, QCL),目前性能最好的室温中红外 QCL 是基于 InP 材料设计制造的<sup>[10]</sup>。

近年来,中红外波导集成与传感应用方面取得了显著进展。2019年,CHAKRAVARTY S等<sup>[11]</sup>提出了

**基金项目:**国家自然科学基金(Nos. 62175087, 62235016, 61960206004, 62105118),吉林省科技发展计划(Nos. 20200401059GX, 20230201054GX),吉林省教育厅科技发展规划项目(No. JJKH20211088KJ),长春市重点研发项目(No. 21ZGN24),吉林大学科技创新团队项目(Nos. JLUSTIRT, 2021TD-39)

**第一作者:**王雪莹, xueyingw22@mails.jlu.edu.cn

**通讯作者:**杨悦, yangyue@jlu.edu.cn

**收稿日期:**2023-08-14; **录用日期:**2023-10-12

<http://www.photon.ac.cn>

一种 InGaAs-InP 中红外气体传感平台,用于片上集成光子晶体波导、QCL 和量子级联探测器(Quantum Cascade Detector, QCD),但未开展气体实验。同年, JUNG S Y 等<sup>[12]</sup>实现了 InGaAs-InP 脊形波导和 QCL 的集成,该激光器发射波长为 4.6  $\mu\text{m}$ 。2020 年, YOO K M 等<sup>[2]</sup>提出了用于中红外传感的悬浮光子晶体和亚波长光栅 InGaAs-InP 波导平台,实现了 QCL/QCD 和无源器件的集成,在 6.15  $\mu\text{m}$  波长下,光子晶体波导和亚波长光栅波导对氨气( $\text{NH}_3$ )的检测下限分别为  $232 \times 10^{-9}$  和  $84 \times 10^{-9}$ 。2021 年, ALI R 等<sup>[13]</sup>设计了基于光子晶体的乙醇传感器,实现了光子晶体波导与 QCL/QCD 的集成,传感器在 3.4  $\mu\text{m}$  处的检测限达到  $250 \times 10^{-9}$ 。同年, WANG Yuefeng 等<sup>[14]</sup>提出了一种硫系玻璃悬浮狭缝波导,在 3.67  $\mu\text{m}$  波长下,对  $\text{CH}_4$  检测下限为  $18.17 \times 10^{-9}$ 。

为了对比不同结构的中红外 InGaAs 传感波导的性能,本文设计了悬浮光子晶体波导和脊形波导,以一氧化碳(CO)为目标气体,进行了理论研究。在  $2172.75 \text{ cm}^{-1}$  的吸收线处,对所设计的波导传感器进行优化和性能评估,包括灵敏度、最佳波导长度和检测下限。功率限制因子(Power Confinement Factor, PCF)反映了气体与光的相互作用强度,为增大 PCF,在保证导模传输条件下,对波导参数进行了优化,包括光子晶体波导的晶格常数、孔半径、中心孔半径和脊形波导的脊宽、条宽、脊高和条高。

## 1 光波导气体传感理论

通过仿真研究中红外 InGaAs 传感波导的气体传感性能。采用中红外激光器和探测器,其中中红外激光器为分布反馈 QCL(Thorlabs, QD6500CM1),波长为 4.6025  $\mu\text{m}$ ,最大输出功率为 40 mW,定义激光器输出功率  $P_0 = 10^{-2} \text{ W}$ 。使用 HgCdTe 探测器(Thorlabs, PDA10JT)探测激光功率,噪声等效功率  $P_{\text{NE}} = 2.08 \times 10^{-11} \text{ W} \cdot \text{Hz}^{-1/2}$ ,带宽  $B = 1.6 \times 10^5 \text{ Hz}$ 。

利用波导传感器探测气体时,目标气体作为波导包层材料。部分光未被芯层限制,称为消逝场,消逝场与分析物相互作用,实现气体检测。基于朗伯-比尔定律,波导的输出功率  $P$  可以表示为<sup>[15]</sup>

$$P = P_0 \exp(-\alpha_{\text{int}}L - f_{\text{PC}}\alpha_{\text{gas}}CL) \quad (1)$$

式中,  $P_0$  为波导的输入功率,  $L$  为波导长度,  $f_{\text{PC}}$  为功率限制因子,  $C$  为气体浓度,  $\alpha_{\text{gas}}$  为目标气体在相应波长处的吸收系数,  $\alpha_{\text{int}}$  为波导的传输损耗。

$\alpha_{\text{int}}$  计算公式为

$$\alpha_{\text{int}} = 10 \log \left( \frac{I_{\text{in}}}{I_{\text{out}}} \right) / L \quad (2)$$

式中,  $I_{\text{in}}$  为波导的输入光强,  $I_{\text{out}}$  为波导的输出光强。

$f_{\text{PC}}$  可表示为<sup>[16]</sup>

$$f_{\text{PC}} = f \times n_{\text{g}} \quad (3)$$

式中,  $f$  为填充因子,表示待测气体空间中光功率的占比,即

$$f = \frac{\iint_{\text{gas}} \epsilon(x, y) |E(x, y)|^2 dx dy}{\iint_{\text{total}} \epsilon(x, y) |E(x, y)|^2 dx dy} \quad (4)$$

式中,  $\epsilon$  为介电常数,  $E$  为电场。

群折射率  $n_{\text{g}}$  计算公式为

$$n_{\text{g}} = N_{\text{eff}} - \lambda dN_{\text{eff}}/d\lambda \quad (5)$$

式中,  $N_{\text{eff}}$  为有效折射率,  $\lambda$  为气体吸收波长。

波导传感器的灵敏度  $S$ , 定义为由气体吸收引起的光强变化与气体浓度变化的比值, 计算公式为<sup>[8]</sup>

$$S = f_{\text{PC}}\alpha_{\text{gas}}L \exp(-f_{\text{PC}}\alpha_{\text{gas}}CL - \alpha_{\text{int}}L) \quad (6)$$

随着  $L$  的增大,  $S$  先增大后减小,  $S$  有最大值, 对应的长度  $L$  被定义为光波导的最佳长度  $L_{\text{opt}}$ 。在  $L_{\text{opt}}$  下, 波导损耗对光强衰减的影响比气体吸收更加明显, 表示为<sup>[8]</sup>

$$L_{\text{opt}} = \frac{1}{f_{\text{PC}}\alpha_{\text{gas}}C + \alpha_{\text{int}}} \quad (7)$$

当待测气体浓度达到检测下限  $C_{\text{LoD}}$  时,即在可探测到的最低气体浓度水平处,输出功率降低到近似噪声水平,被定义为最小输出功率  $P_{\text{min}}$ , 写为<sup>[8]</sup>

$$P_{\text{min}} = P|_{C=0} - P|_{C=C_{\text{LoD}}} \quad (8)$$

基于直接吸收光谱的光波导气体传感器理论上只考虑探测器的噪声,探测器的噪声功率  $P_{\text{noise}}$  为<sup>[8]</sup>

$$P_{\text{noise}} = P_{\text{NE}} \sqrt{B} \quad (9)$$

将  $\text{SNR}_{\text{min}}$  定义为光波导传感系统的最小可检测信噪比<sup>[8]</sup>, 即

$$\text{SNR}_{\text{min}} = [P_0 \exp(-\alpha_{\text{int}} L) - P_0 \exp(-\alpha_{\text{int}} L - f_{\text{PC}} \alpha_{\text{gas}} C_{\text{LoD}} L)] / P_{\text{noise}} \quad (10)$$

通过式(10)可以得到  $C_{\text{LoD}}$ <sup>[8]</sup>

$$C_{\text{LoD}} = \frac{-\ln\left(1 - \frac{P_{\text{noise}} \text{SNR}_{\text{min}}}{P_0 \exp(-\alpha_{\text{int}} L)}\right)}{f_{\text{PC}} \alpha_{\text{gas}} L} \quad (11)$$

## 2 器件设计

令目标气体为 CO, 其基频吸收带位于  $4.6 \mu\text{m}$  附近。基于高分辨率透射(High Resolution Transmission, HITRAN)分子吸收数据库, 在  $4602.5 \text{ nm}$  波长附近, 浓度为 100% 的 CO 和 2% 的水蒸气( $\text{H}_2\text{O}$ ) 的模拟吸收光谱如图 1 所示, 其中温度  $T = 293 \text{ K}$ 、压力  $P = 101325 \text{ Pa}$ 、光程  $L_{\text{op}} = 1 \text{ cm}$ 。水蒸气在  $4.6 \mu\text{m}$  附近存在吸收, 可以使用干燥剂(例如氯化钙)消除水蒸气对气体样品的影响, 确保  $\text{H}_2\text{O}$  的吸收在数据处理时仅为背景信息<sup>[17]</sup>。纯 CO 样品在  $2172.75 \text{ cm}^{-1}$  处的吸收系数  $\alpha_{\text{gas}}$  为  $52.87 \text{ cm}^{-1}$ , 这一系数将用于传感器性能的理论分析。

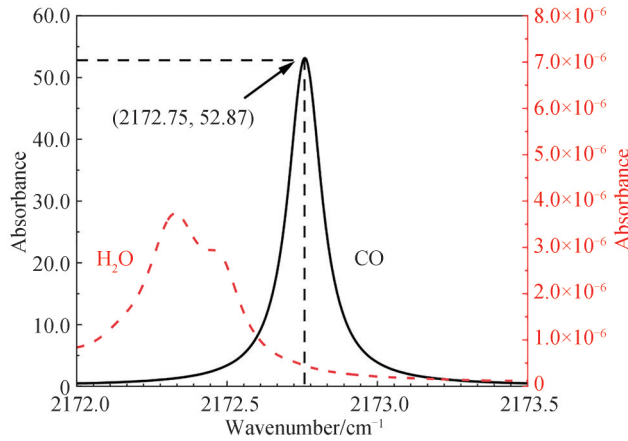


图 1 CO 和  $\text{H}_2\text{O}$  在  $4602.5 \text{ nm}$  附近的吸收光谱 ( $T = 293 \text{ K}$ ,  $P = 101325 \text{ Pa}$ ,  $L = 1 \text{ cm}$ ), 其中 CO 浓度为 100%,  $\text{H}_2\text{O}$  浓度为 2%

Fig. 1 The simulated absorption spectra of CO and  $\text{H}_2\text{O}$  near  $4602.5 \text{ nm}$  ( $T = 293 \text{ K}$ ,  $P = 101325 \text{ Pa}$ ,  $L = 1 \text{ cm}$ ), where the CO concentration is 100% and the  $\text{H}_2\text{O}$  concentration is 2%

### 2.1 中红外悬浮多孔光子晶体波导传感器

光子晶体波导通过波导中心的小孔缺陷引导横电(Transverse Electric, TE)模, 借助慢光效应, 可实现高检测灵敏度。由于二维光子晶体波导中的光被全内反射限制在芯层, 为确保有较大的带隙, 芯层和包层之间的折射率差值至少为 1.5<sup>[3]</sup>。在 InGaAs-InP 材料平台上, 在  $\lambda = 4.6025 \mu\text{m}$  处的折射率  $n_{\text{InGaAs}} = \sim 3.4$  和  $n_{\text{InP}} = \sim 3.1$ , 不足以实现芯层与衬底之间的全内反射约束。为确保传导缺陷模式, 刻蚀掉 InP 衬底以构建悬浮波导, 使芯层与包层的折射率差值约为 2.4。此时气体可以分布在悬浮结构的上、下包层, 与红外光实现更强的相互作用。

#### 2.1.1 传感器结构与优化

InGaAs 多孔光子晶体波导(Holey Photonic Crystal Waveguide, HPCW)的 3D 示意图如图 2(a)所示, 采

用六角形晶格空气孔结构,晶格常数为 $a$ ,并沿着 $\Gamma$ -K方向引入线缺陷。PCW的宽度 $W_1 = \sqrt{3}a$ ,在光子晶体的中心行放置一排缺陷孔,与其他行的孔半径相比,缺陷孔半径较小。中红外悬浮多孔光子晶体波导传感器 $TE_0$ 模的光模场分布如图2(b)所示,模场集中在缺陷孔附近。

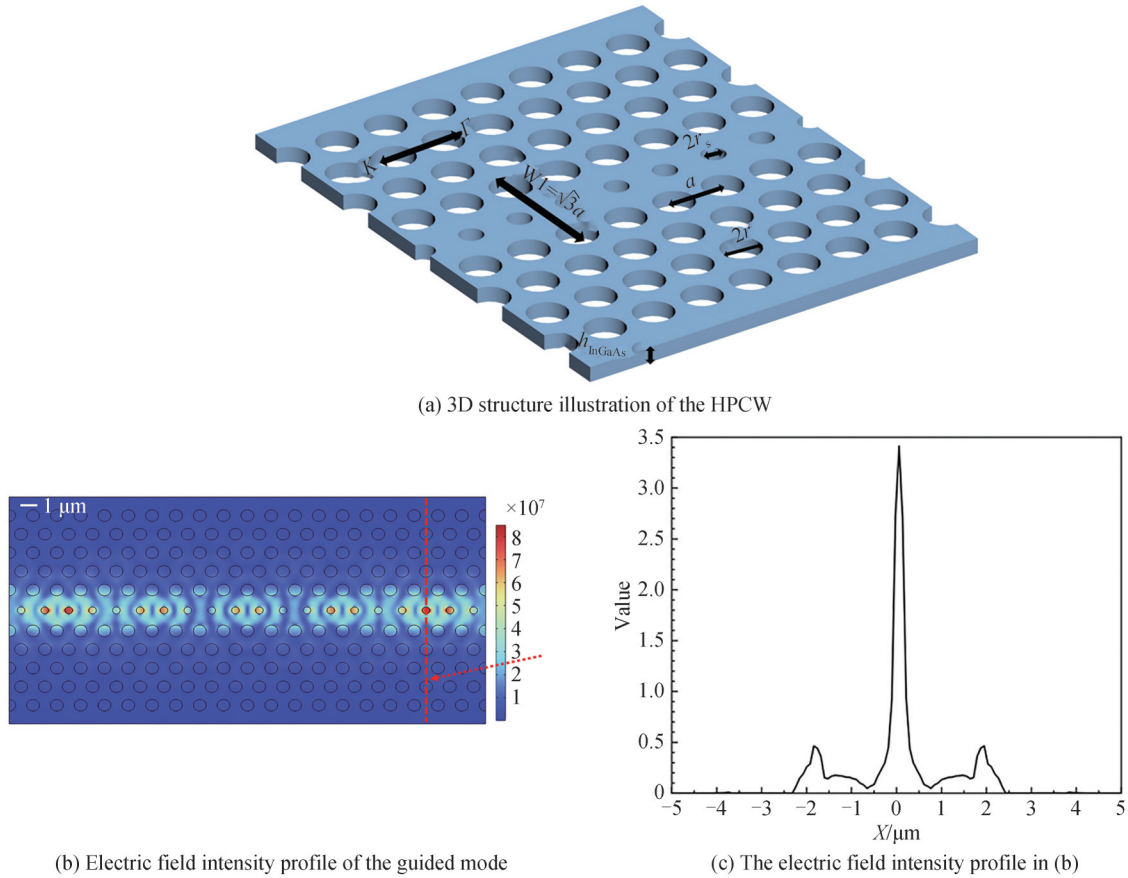


图2 多孔光子晶体波导结构及光场分布  
Fig. 2 Structure and optical field of the HPCW

光子晶体的能带分布与其结构参数有关,利用Rsoft软件和基于有限元法的COMSOL Multiphysics软件对波导结构参数进行了设计和优化,包括孔半径 $r$ 、中心孔半径 $r_s$ 、晶格常数 $a$ 和波导长度 $L$ 。首先优化平板结构。选取长度为一个周期的光子晶体,来优化平板厚度和孔半径。依据晶格常数 $a$ ,对平板厚度和孔半径进行归一化处理。当 $r = 0.27a$ ,优化平板厚度 $h_{\text{InGaAs}}$ 。能带0和1之间的带隙和 $f$ 随 $h_{\text{InGaAs}}$ 的变化曲线如图3(a)所示。随着 $h_{\text{InGaAs}}$ 增大, $f$ 呈减小趋势,但变化较小。当 $h_{\text{InGaAs}}$ 处于 $0.5 \sim 1.0 \mu\text{m}$ 范围内,带隙没有明显变化;当 $h_{\text{InGaAs}}$ 处于 $1.0 \sim 1.25 \mu\text{m}$ 范围内,带隙呈减小趋势;当 $h_{\text{InGaAs}}$ 大于 $1.25 \mu\text{m}$ 时,不存在带隙。带宽指在空气光线下导模的归一化频率最大值和最小值之差,随着 $h_{\text{InGaAs}}$ 增大,导模的归一化频率降低,可以获得更宽的带宽。考虑到获得更宽的带宽,选择 $h_{\text{InGaAs}} = 1.15 \mu\text{m}$ 。当平板厚度为 $1.15 \mu\text{m}$ 时,进一步优化孔半径 $r$ 。图3(b)显示,在能带0和1之间,当 $r = 0.2a$ 时开始出现带隙,带隙随着孔半径的增大,先增加再减小。当 $r$ 达到 $0.27a$ 附近时带隙达到最大,故取 $r = 0.27a$ 。

随后优化缺陷孔的半径。当 $h_{\text{InGaAs}} = 1.15 \mu\text{m}$ 、 $r = 0.27a$ 时, $f$ 和带宽随缺陷孔半径与孔半径的比值的曲线如图3(c)所示。随着比值增大, $f$ 增大,带宽先增大后减小,为保证较大的 $f$ 和带宽,选取 $r_s = 0.6r$ 。

当 $h_{\text{InGaAs}} = 1.15 \mu\text{m}$ 、 $r = 0.27a$ 、 $r_s = 0.6r$ 时,悬浮InGaAs HPCW的色散图如图4(a)所示。图中虚线对应光子晶体波导的导模,箭头所指的实线表示目标气体折射率为 $n_{\text{air}} = 1.0$ 。群折射率的大小将影响传感性能,过小的群折射率使传感器性能变差,但过大的群折射率会增大波导损耗。晶格常数 $a$ 与 $n_g$ 之间的关系如图4(b)所示。选取群折射率 $n_g$ 为43.97,此时晶格常数 $a = 1018 \text{ nm}$ 。

根据式(6)和(7),灵敏度相关因子 $S$ 、最佳波导长度 $L_{\text{opt}}$ 均和传输损耗 $\alpha_{\text{int}}$ 有关。仿真得到优化后的光子

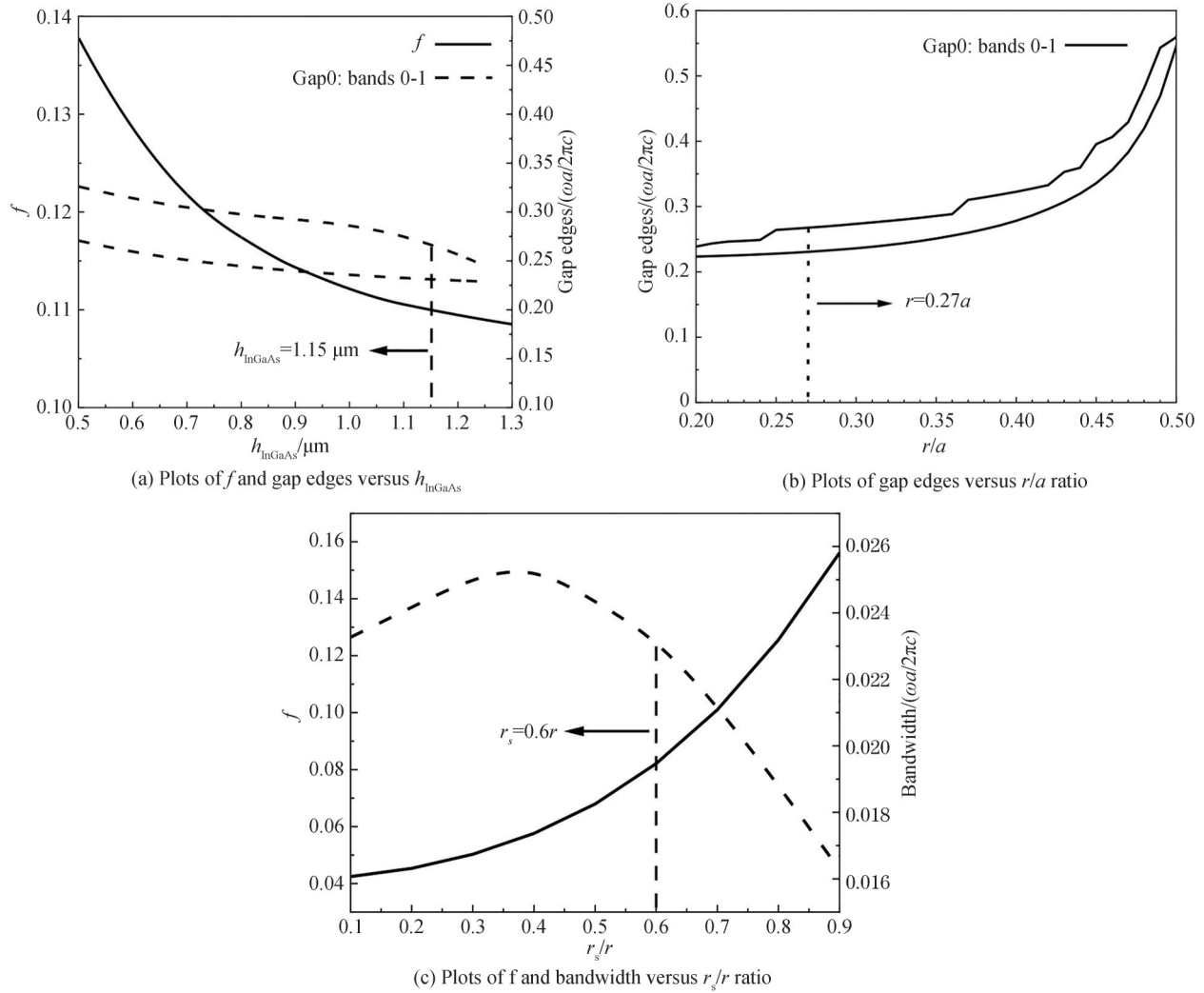


图3 多孔光子晶体波导平板结构优化  
Fig. 3 Optimization of HPCW plate structure

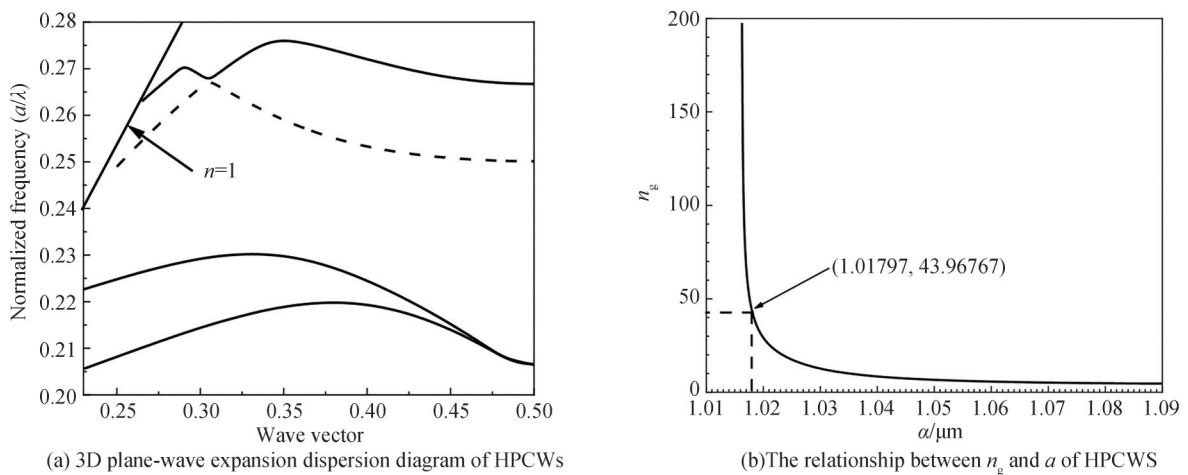


图4 多孔光子晶体波导晶格常数优化  
Fig. 4 Optimization of HPCW lattice constant

晶体波导损耗  $\alpha_{\text{int}} = 27.5 \text{ dB/cm}$ ,  $S$ 与 $L$ 的关系曲线如图5所示。最佳波导长度 $L_{\text{opt}}$ 处对应 $S$ 最大值,由此可以确定,当最佳波导长度 $L_{\text{opt}} = 72 \mu\text{m}$ 时,最大灵敏度为 $S = 3.51 \times 10^{-7}$ ,此时通过式(11)得到 $C_{\text{LoD}} = 9.13 \times 10^{-6}$ 。

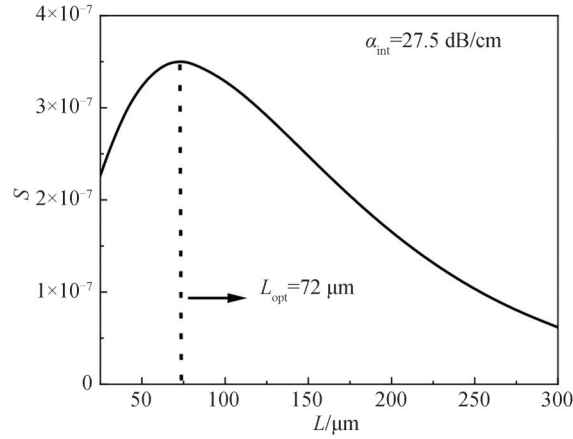


图5 多孔光子晶体波导损耗为 27.5 dB/cm 时,  $S$  与  $L$  的曲线  
Fig. 5 Plot of  $S$  versus  $L$ , where  $\alpha_{\text{int}} = 27.5$  dB/cm for HPCW

### 2.1.3 优化总结

表1列出了最终优化的光子晶体波导参数。悬浮光子晶体波导的  $\text{TE}_0$  模的模场分布如图2(b)所示,大部分光被限制在中心孔区域。HPCW 中心孔的峰值电场强度如图2(c)所示,中心孔中的峰值电场强度较其他行小孔增强约 3.41 倍。六角形晶格的光子晶体波导的最佳参数:  $h_{\text{InGaAs}} = 1.15 \mu\text{m}$ 、 $a = 1018 \text{ nm}$ 、 $r = 0.27a$ 、 $r_s = 0.6r$ 、 $L_{\text{opt}} = 72 \mu\text{m}$ 。此时波导  $f_{\text{PC}} = 250.69\%$ 、 $C_{\text{LoD}} = 9.13 \times 10^{-6}$ 。

表1 4.6025  $\mu\text{m}$  波长处悬浮 InGaAs 多孔光子晶体波导传感器的优化参数  
Table 1 Optimized parameters of the suspended InGaAs HPCW sensor at 4.6025  $\mu\text{m}$

Parameters of HPCW sensor	Value
$a$	1018 nm
W1	$\sqrt{3}a$
$h_{\text{InGaAs}}$	1.15 $\mu\text{m}$
$r$	0.27 $a$
$r_s$	0.6 $r$
$L_{\text{opt}}$	72 $\mu\text{m}$

## 2.2 中红外悬浮脊形波导传感器

### 2.2.1 传感器结构设计与优化

中红外悬浮脊形波导(Ridge Waveguide, RWG)传感器的结构如图6(a)所示,采用 InGaAs 作为下缓冲层和芯层。有效折射率  $N_{\text{eff}}$  应满足导模条件  $n_{\text{air}} < N_{\text{eff}} < n_{\text{InGaAs}}$ , 芯层总厚度设置为 780 nm。

当工作波长为 4.6025  $\mu\text{m}$ 、且满足导模条件时,为了获得较大的  $f_{\text{PC}}$ ,利用 COMSOL 软件对波导结构参数进行优化,包括脊宽  $w_1$ 、平板层宽度  $w_2$ 、脊高  $h_1$ 、平板层厚度  $h_2$  和波导长度  $L$ 。

首先优化平板层的参数。考虑到实际制备中存在工艺误差,当波导的  $N_{\text{eff}}$  接近 1 时,模式可能变为泄露模,为避免这种情况,确定仿真参数的最小值对应的  $N_{\text{eff}}$  在 1.3 附近。当  $w_1 = 1 \mu\text{m}$ 、 $h_1 = 315 \text{ nm}$ 、 $h_2 = 405 \text{ nm}$  时,优化  $w_2$ 。  $f_{\text{PC}}$  和  $N_{\text{eff}}$  随  $w_2$  的变化曲线如图7(a)所示,随着  $w_2$  的增大,  $N_{\text{eff}}$  变大,  $f_{\text{PC}}$  减小。较大的  $f_{\text{PC}}$  代表较高的灵敏度,所以选择  $w_2 = 4 \mu\text{m}$ 。当  $w_1 = 1 \mu\text{m}$ 、 $h_1 = 315 \text{ nm}$ 、 $w_2 = 4 \mu\text{m}$  时,对  $h_2$  进行优化。  $f_{\text{PC}}$  和  $N_{\text{eff}}$  随  $h_2$  的变化曲线如图7(b)所示。随着  $h_2$  的增加,  $N_{\text{eff}}$  保持增大趋势,同时  $f_{\text{PC}}$  减小,因此选取  $h_2 = 405 \text{ nm}$ 。最终,脊形波导平板层参数选取为  $w_2 = 4 \mu\text{m}$ 、 $h_2 = 405 \text{ nm}$ 。

随后优化脊的参数。当  $w_2 = 4 \mu\text{m}$ 、 $h_1 = 315 \text{ nm}$ 、 $h_2 = 405 \text{ nm}$  时,  $N_{\text{eff}}$  和  $f_{\text{PC}}$  随  $w_1$  的变化曲线如图8(a)所示,随着  $w_1$  增大,  $N_{\text{eff}}$  增大,  $f_{\text{PC}}$  减小,因此选择  $w_1 = 1 \mu\text{m}$  使  $f_{\text{PC}}$  最大。在  $w_1 = 1 \mu\text{m}$ 、 $w_2 = 4 \mu\text{m}$ 、 $h_2 = 405 \text{ nm}$  时,  $N_{\text{eff}}$  和  $f_{\text{PC}}$  随  $h_1$  的变化曲线如图8(b)所示,随着  $h_1$  增大,  $N_{\text{eff}}$  不断减小,  $f_{\text{PC}}$  先增大后减小,同样地,为了得到较大的  $f_{\text{PC}}$ ,选取  $h_1 = 315 \text{ nm}$ ,此时  $f_{\text{PC}}$  达到最大值为 115.65%,对应的有效折射率  $N_{\text{eff}} = 1.3819$ 。

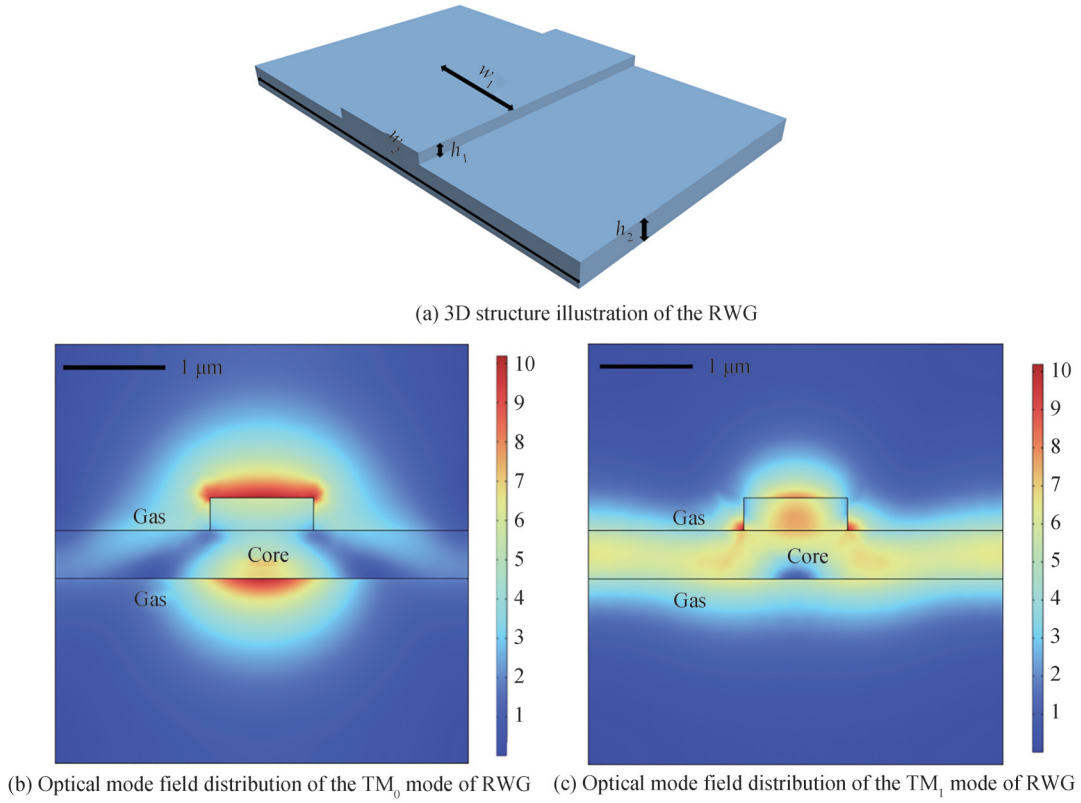


图6 脊形波导结构及光场分布  
Fig. 6 Structure and optical field of the RWG

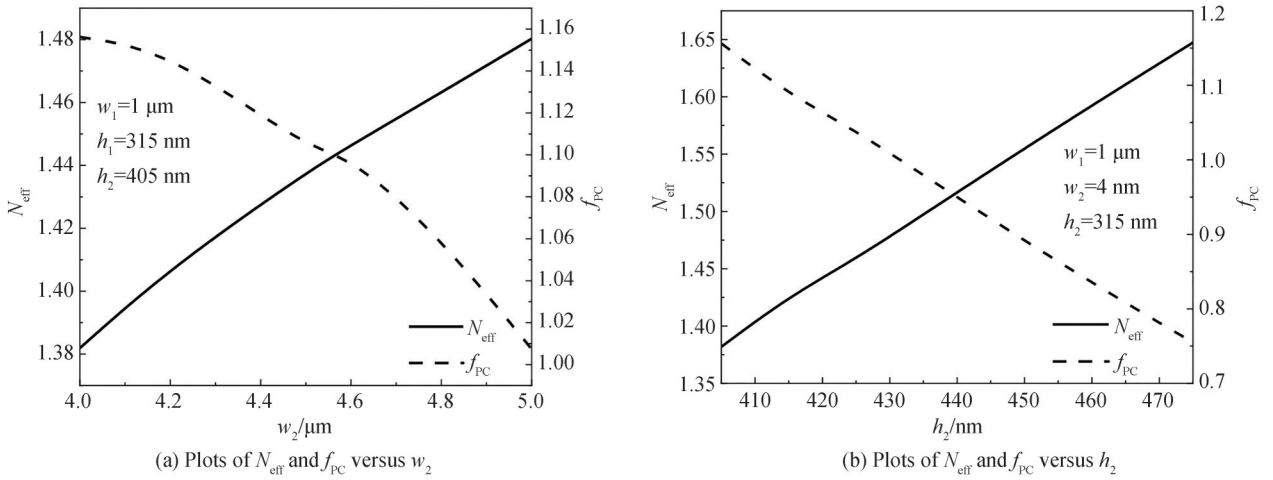


图7 脊形波导平板层结构优化  
Fig. 7 Structure optimization of the panel of ridge waveguide

根据式(6)和(7),优化传感器灵敏度因子  $S$  和波导长度  $L$ 。仿真得到优化后的脊形波导损耗  $\alpha_{\text{int}} = 3 \text{ dB/cm}$ 。 $S$  随  $L$  的变化曲线如图9所示,最佳波导长度  $L_{\text{opt}}$  处对应  $S$  的最大值拐点,因此可以确定最佳波导长度  $L_{\text{opt}} = 162 \mu\text{m}$  时对应的最大灵敏度  $S = 3.64 \times 10^{-7}$ ,通过式(11)计算得到  $C_{\text{LOD}}$  为  $8.51 \times 10^{-6}$ 。

### 2.2.2 优化总结

表2列出了最终优化的脊形波导参数。悬浮脊形波导的最佳参数:  $w_2 = 4 \mu\text{m}$ 、 $h_2 = 405 \text{ nm}$ 、 $w_1 = 1 \mu\text{m}$ 、 $h_1 = 315 \text{ nm}$ 、 $L_{\text{opt}} = 162 \mu\text{m}$ ,此时  $f_{\text{PC}} = 115.654 \%$ ,有效折射率  $N_{\text{eff}} = 1.3819$ ,最小检测下限为  $8.51 \times 10^{-6}$ 。悬浮脊形波导仅有横磁(Transverse Magnetic, TM)模,没有TE模。  $TM_0$ 、 $TM_1$  模的光场分布如图6(b)、图6(c)所示,  $TM_0$  模大部分光被限制在脊上、下区域。

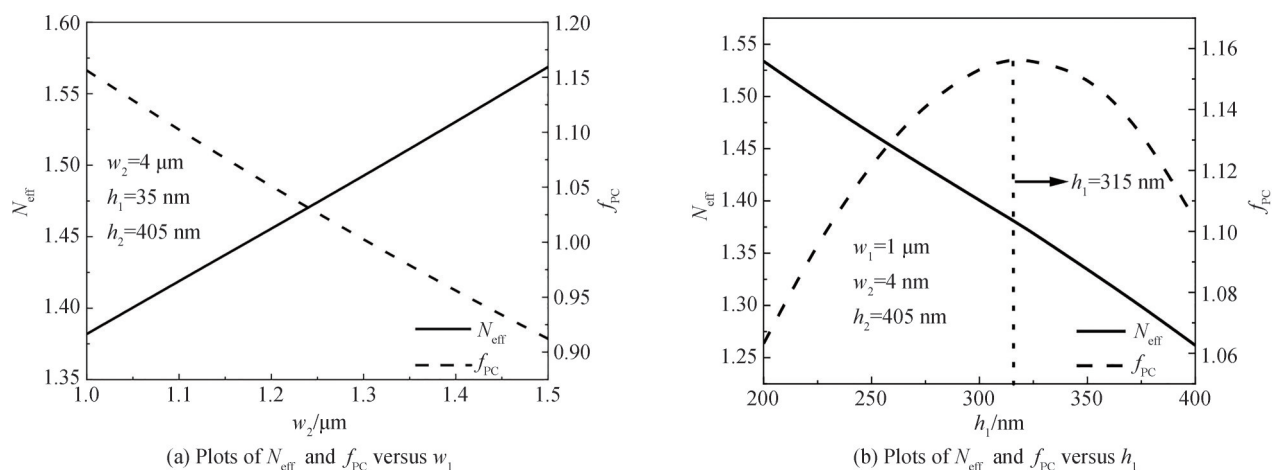


图8 脊形波导脊结构优化

Fig. 8 Ridge structure optimization of ridge waveguide

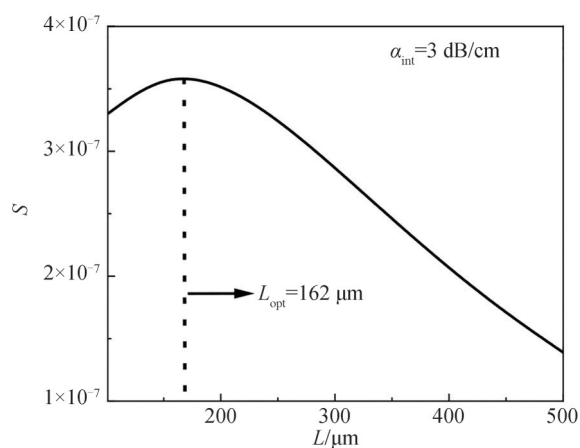


图9 脊形波导损耗为3 dB/cm时, S与L的曲线

Fig. 9 Plot of  $S$  versus  $L$ , where  $\alpha_{\text{int}}=3$  dB/cm for RWG

表2 4.602 5 μm 波长处的悬浮 InGaAs 脊形波导传感器的优化参数

Table 2 Optimized parameters of the suspended InGaAs RWG sensor at 4.602 5 μm

Parameters of RWG sensor	Value
$w_2$	4 μm
$h_2$	405 nm
$w_1$	1 μm
$h_1$	315 nm
$L_{\text{opt}}$	162 μm

### 3 结果和讨论

表3显示了光子晶体波导和脊形波导之间的对比结果。HPCW只能引导TE模,因此需要偏振旋转器才能将其与TM偏振的量子级联器件集成。RWG支持TM偏振光,集成时不需要偏振旋转器,可以减少总传输损耗和集成器件面积,制备过程更加简单。

悬浮HPCW具有高的群折射率值,因此可以有效减小光吸收路径长度,但是它具有更高的传输损耗,集成时不利于提高气体传感器灵敏度。悬浮RWG较低的传输损耗允许波导长度更长,进而可提高气体传感器灵敏度。根据式(7)和(14),分别计算传输损耗对两种传感器性能的影响, $L_{\text{opt}}$ 和 $C_{\text{LoD}}$ 随 $\alpha_{\text{int}}$ 的变化曲线如图10所示。随着传输损耗增大,传感器最佳波导长度 $L_{\text{opt}}$ 减小, $C_{\text{LoD}}$ 增大。若能有效降低波导传输损耗,可以进一步降低检测下限。



表3 悬浮 InGaAs 多孔光子晶体波导和悬浮 InGaAs 脊形波导的比较  
Table 3 Comparison between the suspended InGaAs HPCW and the suspended InGaAs RWG

Waveguide type	HPCW	RWG
TE/TM mode guiding	TE	TM
$n_g$	43.97	4.89
$f_{PC}$	250.69%	115.65%
$C_{LoD}$	$9.13 \times 10^{-6}$	$8.51 \times 10^{-6}$
Propagation loss	27.5 dB/cm	3 dB/cm
Polarization rotator	Required	—
$L_{opt}$	72 $\mu\text{m}$	162 $\mu\text{m}$

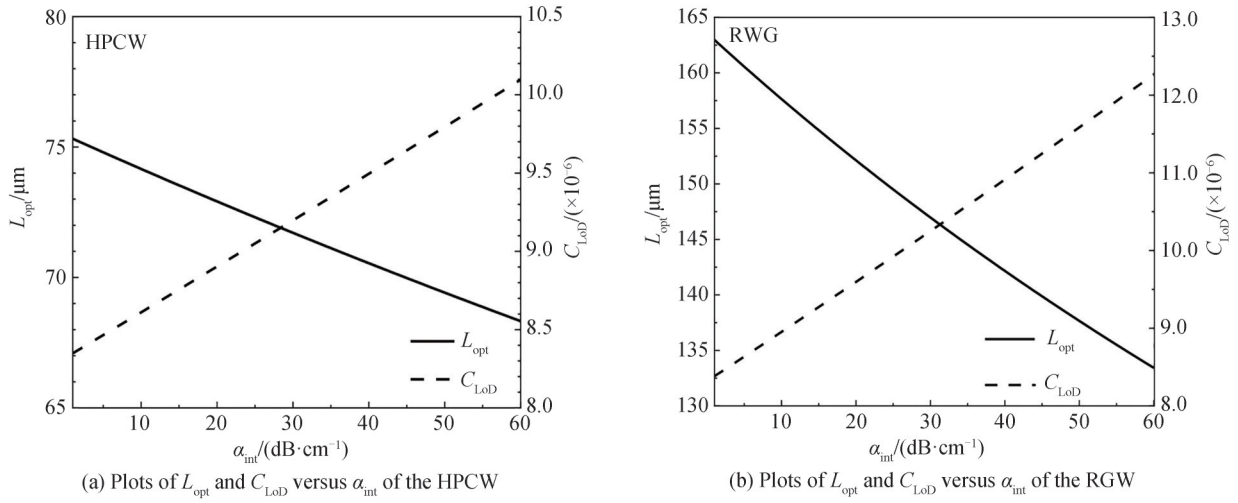


图10  $L_{opt}$ 和 $C_{LoD}$ 随 $\alpha_{int}$ 的变化曲线  
Fig. 10 Plots of  $L_{opt}$  and  $C_{LoD}$  versus  $\alpha_{int}$

## 4 结论

本文采用CO作为目标气体,使用InGaAs-InP平台进行悬浮光子晶体波导和脊形波导的模拟设计。在单模传输条件下优化了波导参数,以达到更高的功率限制因子。优化后,悬浮光子晶体波导和脊形波导的功率限制因子分别为250.69%、115.65%。计算波导损耗分别为27.5 dB/cm和3 dB/cm时,确定了两种波导的最佳波导长度分别为72  $\mu\text{m}$ 和162  $\mu\text{m}$ 。当 $\text{SNR}_{min}$ 为10时,两种传感器的检测下限分别为 $9.13 \times 10^{-6}$ 和 $8.51 \times 10^{-6}$ 。对比了设计的两种传感器性能,讨论了它们与TM偏振器件集成的可能性以及波导传输损耗对波导传感性能的影响。

## 参考文献

- [1] MIZAIKOFF B. Waveguide-enhanced mid-infrared chem/biosensors [J]. Chemical Society Reviews, 2013, 42: 8683-8699.
- [2] YOO K M, MIDKIFF J, ROSTAMIAN A, et al. InGaAs membrane waveguide: a promising platform for monolithic integrated mid-infrared optical gas sensor[J]. ACS Sensors, 2020, 5(3): 861-869.
- [3] NIU Donghai, WANG Xibin, SUN Shiqi, et al. Polymer/silica hybrid waveguide temperature sensor based on asymmetric Mach-Zehnder interferometer[J]. Journal of Optics, 2018, 20(4): 045803.
- [4] WANG Guiqiang, WANG Chuannan, SUN Shuqing. An optical waveguide sensor based on mesoporous silica films with a comparison to surface plasmon resonance sensors[J]. Sensors and Actuators B: Chemical, 2018, 255: 3400-3408.
- [5] HENDERSON B, KHODABAKHSH A, METSÄLÄ M, et al. Laser spectroscopy for breath analysis: towards clinical implementation[J]. Applied Physics B, 2018, 124(8): 161.
- [6] CHRISTIAN K, MARTINEZ-HURTADO J L, ALEXANDRU P, et al. Slow light enhanced gas sensing in photonic crystals [J]. Optical Materials, 2018, 76: 106-110.
- [7] HU Ting, DONG Bowei, LUO Xianshu, et al. Silicon photonic platforms for mid-infrared applications (invited) [J]. Photonics Research, 2017, 5(5): 417-430.

- [8] PI Mingquan, ZHENG Chuantao, BI Ran, 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.
- [9] GUTIERREZ-ARROYO A, BAUDET E, BODIOU L, et al. Optical characterization at 7.7  $\mu\text{m}$  of an integrated platform based on chalcogenide waveguides for sensing applications in the mid-infrared[J]. *Optics Express*, 2016, 24(20): 23109-23117.
- [10] CHUNG C J, MIDKIFF J, YOO K M, et al. InP-based polarization rotator-splitter for mid-infrared photonic integration circuits[J]. *AIP Advances*, 2019, 9(1): 015303.
- [11] CHAKRAVARTY S, MIDKIFF J, YOO K, et al. Monolithic integration of quantum cascade laser, quantum cascade detector, and subwavelength waveguides for mid-infrared integrated gas sensing [C]. *Quantum Sensing and Nano Electronics and Photonics XVI*, 2019: 109261V.
- [12] JUNG S Y, PALAFERRI D, ZHANG K, et al. Belkin. Homogeneous photonic integration of mid-infrared quantum cascade lasers with low-loss passive waveguides on an InP platform[J]. *Optica*, 2019, 6(8): 1023-1030.
- [13] ALI R, EHSAN M K, HAMED D, et al. Towards lab-on-chip ultrasensitive ethanol detection using photonic crystal waveguide operating in the mid-infrared[J]. *Nanophotonics*, 2021, 10(6): 1675-1682.
- [14] WANG Yuefeng, CHEN Weiwei, WANG Pengjun, et al. Ultra-high-power-confinement-factor integrated mid-infrared gas sensor based on the suspended slot chalcogenide glass waveguide[J]. *Sensors and Actuators B: Chemical*, 2021, 347: 130466.
- [15] TOMBEZ L, ZHANG E J, ORCUTT J S, et al. Methane absorption spectroscopy on a silicon photonic chip[J]. *Optica*, 2017, 4(11): 1322-1325.
- [16] PI Mingquan, HUANG Yijun, ZHAO Huan, et al. Theoretical and experimental investigation of on-chip mid-infrared chalcogenide waveguide  $\text{CH}_4$  sensor based on wavelength modulation spectroscopy [J]. *Sensors and Actuators B: Chemical*, 2022, 362: 131782.
- [17] ZHENG Chuantao, YE Weilin, 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.

## On-chip Mid-infrared Indium Gallium Arsenic Suspended Waveguide Gas Sensors

WANG Xueying<sup>1,2</sup>, ZHANG Zhening<sup>1,2</sup>, PI Mingquan<sup>1,2</sup>, PENG Zihang<sup>1,2</sup>, ZHENG Chuantao<sup>1,2</sup>,  
SONG Fang<sup>1,2</sup>, YANG Yue<sup>1,2</sup>, WANG Yiding<sup>1,2</sup>

(1 *State Key Laboratory of Integrated Optoelectronics, Jilin University Region, College of Electronic Science and Engineering, Jilin University, Changchun 130012, China*)

(2 *Jilin Provincial Engineering Research Center of Infrared Gas Sensing Technique, Changchun 130012, China*)

**Abstract:** Most gas molecules have vibration characteristic absorption peaks in the mid-infrared spectral range (2.5~20  $\mu\text{m}$ ), which can be used for trace gas detection and quantitative analysis. On-chip gas sensing that enables waveguide interconnection can improve system portability. Because quantum cascade laser and quantum cascade detector material structures can be epitaxially grown on the InGaAs-InP platform, it can be used for the preparation of on-chip integrated gas sensors. On the InGaAs-InP platform, the refractive indices of  $n_{\text{InGaAs}} = \sim 3.4$  and  $n_{\text{InP}} = \sim 3.1$  at  $\lambda = 4.6025 \mu\text{m}$  are insufficient to realize the total internal reflection constraint between core and substrate. We can etch the InP substrate by using hydrochloric acid so that the refractive index between the core and cladding is approximately 2.4. At this point, the suspension structure allows gas to flow through the upper and lower cladding, allowing stronger interaction between gas molecules and light. In order to study the sensing performance of on-chip waveguide in the mid-infrared band, a suspended photonic crystal waveguide and a suspended ridge waveguide sensor based on InGaAs-InP platform are proposed for targeting the  $2172.75 \text{ cm}^{-1}$  absorption line of carbon monoxide. Based on Lambert-Beer law, Rsoft software and COMSOL software are used to optimize the waveguide structure. The lattice constant, hole radius, central hole radius, ridge width, strip width, ridge height and strip height of the photonic crystal waveguide are optimized, and the performances

of the two sensors are calculated.

Firstly, a mid-infrared suspended InGaAs-InP photonic crystal waveguide sensor is proposed. The InGaAs photonic crystal waveguide adopts a hexagonal lattice with a lattice constant of  $a$ . The width of Holey Photonic Crystal Waveguide (HPCW) is  $\sqrt{3}a$ , and the thickness of InGaAs layer  $h_{\text{InGaAs}}$  is  $1.15 \mu\text{m}$ . The lattice constant, hole radius and central hole radius parameters of the photonic crystal waveguide are optimized by constructing a defect row in the  $\Gamma$ -K direction. The central defect row radius of the constructed waveguide is  $r_s = 0.6r$ , where  $r = 0.27a$  is the aperture radius of the photonic crystal. The relationship between the lattice constant of the photonic crystal waveguide and the group index ( $n_g$ ) is obtained by simulation. When the lattice constant  $a = 1018 \text{ nm}$  and the photonic crystal waveguide  $n_g$  is  $43.97$ , the optimal waveguide structure is obtained at  $\lambda = 4.6025 \mu\text{m}$ . It is found that most of the light is confined to the center hole region, and the peak electric field intensity of the center hole cross-section is increased by  $\sim 3.41$  times. At this time, the power confinement factor  $f_{\text{PC}}$  of the photonic crystal waveguide is  $250.69\%$ , the optimal waveguide length  $L_{\text{opt}} = 72 \mu\text{m}$ , and the limit of detection  $C_{\text{LoD}} = 9.13 \times 10^{-6}$ .

Then, a mid-infrared suspended InGaAs-InP ridge waveguide sensor is proposed. The total thickness of the core layer is set to  $780 \text{ nm}$ . In order to obtain a large  $f_{\text{PC}}$  under guided mode condition, COMSOL Multiphysics software based on finite element method is used to optimize the waveguide structural parameters, including ridge width  $w_1$ , plate width  $w_2$ , ridge height  $h_1$ , plate thickness  $h_2$  and waveguide length  $L$ . The optimum waveguide structure and the optical mode field distribution of  $\text{TM}_0$  mode of the mid-infrared suspended ridge waveguide are obtained. Most of the light is concentrated around the ridge.  $f_{\text{PC}} = 115.65\%$ ,  $L_{\text{opt}} = 162 \mu\text{m}$ , and  $C_{\text{LoD}} = 8.51 \times 10^{-6}$ .

Comparing the two sensors designed, since HPCW can only guide TE mode, a polarization rotator is required to integrate it with the quantum cascade device with TM polarization. Ridge Waveguide (RWG) can support TM polarized light and does not require a polarization rotator for integration, which reduces total transmission loss and integrated device area, and simplifies the preparation process. The advantage of suspended HPCW is that it has a high group refractive index, so it can effectively reduce the light absorption path length. But HPCW has a higher propagation loss, which is not conducive to improving the sensitivity of integrated gas sensors. The lower propagation loss of the suspended RWG allows for longer waveguide lengths, which in turn improves gas sensor sensitivity. The influence of propagation loss on the performance of the two sensors is analyzed and calculated, and the variation curves of  $L_{\text{opt}}$  and  $C_{\text{LoD}}$  versus  $\alpha_{\text{int}}$  are obtained.  $L_{\text{opt}}$  decreases and  $C_{\text{LoD}}$  increases with the increase of propagation loss. If the waveguide propagation loss can be effectively reduced, the lower detection limit can be further reduced.

With CO as the target gas, the InGaAs-InP platform is used to simulate the design of suspended photonic crystal waveguide and ridge waveguide. The waveguide parameters are optimized to achieve single-mode transmission and higher  $f_{\text{PC}}$ . After optimization,  $f_{\text{PC}}$  of the suspended photonic crystal waveguide and ridge waveguide are  $250.69\%$  and  $115.65\%$ , respectively. When the waveguide loss is  $27.5 \text{ dB/cm}$  and  $3 \text{ dB/cm}$ , respectively, the optimum waveguide lengths of the two sensors are determined, respectively. When  $\text{SNR}_{\text{min}} = 10$ ,  $C_{\text{LoD}}$  of the two sensors are  $9.13 \times 10^{-6}$  and  $8.51 \times 10^{-6}$ , respectively.

**Key words:** Waveguide sensor; Middle infrared; Absorption spectrum; Gas sensor; Photonic crystal waveguide; Ridge waveguide

**OCIS Codes:** 070.4790; 130.6010; 230.7370; 300.6340; 130.5296