

ТЕХНИЧЕСКИЕ НАУКИ

УДК 535.8

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДАТЧИКА ГАЗА НА ПЛАТФОРМЕ ИНТЕГРАЛЬНОЙ ФОТОНИКИ НИТРИД КРЕМНИЯ

Я. В. АЛЕКСАКИНА¹, А. Г. ЗАКОЯН², Г. С. ВОРОНКОВ³, В. В. ИВАНОВ⁴, Р. В. КУТЛЮАРОВ⁵

¹aleksakina.yv@ugatu.su, ²zakoyan.ag@ugatu.su, ³voronkov.gs@ugatu.su, ⁴ivanov.vv@ugatu.su,
⁵kutluyarov.rv@ugatu.su

¹⁻⁵ ФГБОУ ВО «Уфимский университет науки и технологий» (УУНИТ)

Поступила в редакцию 26.04.2023

Аннотация. В статье описан подход к моделированию микрокольцевой резонаторной структуры на платформе интегральной фотоники нитрид кремния при воздействии на него разных газов, опасных для здоровья человека. Газ меняется путем изменения показателя преломления среды, окружающей резонатор, от 1 (вакуум) до 1,001768 (CCl₄). Для различных газов были получены резонансные длины волн микрокольцевой структуры, определены добротность, чувствительность и предел обнаружения. По результатам симуляции видно, что с помощью разработанного сенсора возможно обнаружение широкого спектра опасных для здоровья человека газов, в том числе тетрахлорметана, паров ртути, угарного газа и монооксида азота, хотя различение двух последних газов по итогам текущей работы невозможно.

Ключевые слова: микрокольцевые резонаторы, нитрид кремния, газовый датчик, оптический датчик.

ВВЕДЕНИЕ

Интегральная фотоника стремительно развивается и предлагает все новые решения. В настоящее время ее используют в качестве основы для различных устройств, например, для создания фотодетекторов и фотоприемников. В то же время интегральная фотоника обладает большими возможностями. Она включает в себя интегральные устройства, которые работают быстрее и точнее электронных. Кроме того, такие устройства обладают достаточно большим сроком службы, малым энергопотреблением, малыми массой и габаритами. В том числе на основе интегральной фотоники могут быть реализованы сенсоры, способные детектировать наличие и состав газа. Благодаря перечисленным преимуществам сенсоры могут использоваться не только на бытовом уровне, но и могут быть безопасно использованы на взрывоопасных предприятиях [1], а также в медицине [2]. Датчики могут исполняться на базе брэгговских решеток [3], оптических ответвителей [4], интерферометра Маха-Цендера (MZI) [5]. Самыми простыми по структуре и исполнению являются датчики на основе микрокольцевых резонаторов, которые могут иметь структуру all-pass (с одним волноводом) и add-drop (с подводящим волноводом, рис. 1).

Одной из перспективных платформ интегральной фотоники, позволяющей реализовывать датчики газа, является нитрид кремния (SiN). При использовании указанной платформы сенсоры обладают большими размерами, ввиду чего их добротность выше, чем у датчиков на платформе кремний-на-изоляторе (КНИ) [6, 7]. Датчики на платформе нитрида кремния могут выполняться на основе MZI [8], на основе микрокольцевых резонаторов (МКР) [6], а также на более сложных структурах, например, на основе петлевого волнового зеркала [7].

Помимо этого, в датчиках могут использоваться полимерные покрытия [9–10], благодаря которым устройство становится более избирательным к конкретным изменениям условий окружающей среды. Однако в литературе не упоминается, какой срок жизни имеют данные покрытия, а потому практический интерес представляет изучение датчиков без функционального слоя. Это позволит определить, как меняется чувствительность устройства к внешним влияниям и, следовательно, степень его избирательности к изменениям внешней среды.

ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ СВЕДЕНИЯ

Расчет затухания в кольце и коэффициентов связи (каплинга) был произведен с использованием метода конечных разностей во временной области (FDTD, англ. Finite-Difference Time-Domain method) в ПО Ansys Lumerical. Наиболее близким к выполнению условия критического каплинга оказалось значение зазора между волноводами, равное 0,35 мкм:

$$1 - a^2 = k^2 \text{ или } r = a;$$

где $a = \exp(-\alpha L/2)$ – коэффициент передачи в кольце, измеренный в FDTD, α – коэффициент затухания в кольце, r_1 и r_2 – коэффициенты передачи каплеров на in-through и add-drop волноводы соответственно.

Дополнительное затухание в систему МКР вносит наличие add-drop волновода (рис. 1), поскольку оно влечет за собой переход энергии из кольца в drop-порт. Поэтому выбор величины зазора add-drop волновода осуществлялся с учетом необходимости обеспечения высокой добротности в режиме, не достигшем условия критического каплинга, поскольку он позволяет повысить чувствительность [11]. Резонансные свойства микрокольцевого резонатора оценивались по добротности Q и полной ширине на уровне половины высоты (FWHM), определяемым по формулам [12]:

$$Q = \frac{\lambda_{res}}{FWHM};$$

$$FWHM = \frac{(1 - r_1 r_2 a) \lambda_{res}^2}{\pi n_g L \sqrt{r_1 r_2 a}},$$

где λ_{res} – резонансная длина волны МКР, $L = 2\pi R$ – длина окружности кольца, R – радиус кольца, n_g , n_{eff} – значения группового и эффективного показателей преломления соответственно (определены численно).

Также был произведен расчет чувствительности [12] микрокольцевого резонатора и предел обнаружения (LoD, англ. Limit of Detection) [13]:

$$S = \frac{\lambda_{CCl_4} - \lambda_{air}}{n_{CCl_4} - n_{air}};$$

$$LoD = \frac{\lambda_{res}}{S \cdot Q},$$

где λ_{CCl_4} , λ_{air} – резонансные длины газа с наибольшим показателем преломления (CCl_4) и воздуха соответственно, n_{CCl_4} , n_{air} – значения показателя преломления газа CCl_4 и воздуха соответственно.

МОДЕЛИРОВАНИЕ

Для моделирования микрокольцевого резонатора на платформе нитрида кремния в ПО Ansys Lumerical был использован метод конечных разностей во временной области (FDTD), пакеты MODE и INTERCONNECT. Схема модели представлена на рис. 1, а ее геометрические параметры – в табл. 1:

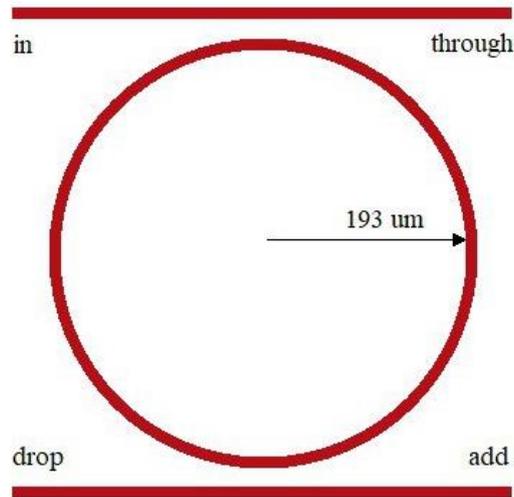


Рис. 1. Модель микрокольцевого резонатора

Таблица 1

Геометрические параметры микрокольцевого резонатора

Параметр	Величина
Внешний радиус	193 мкм
Высота волновода	438,5 нм
Ширина волновода	1 мкм
Ширина зазора (gap)	0,35 мкм
Материал волновода	Si ₃ N ₄ (n=1,9964 [14])

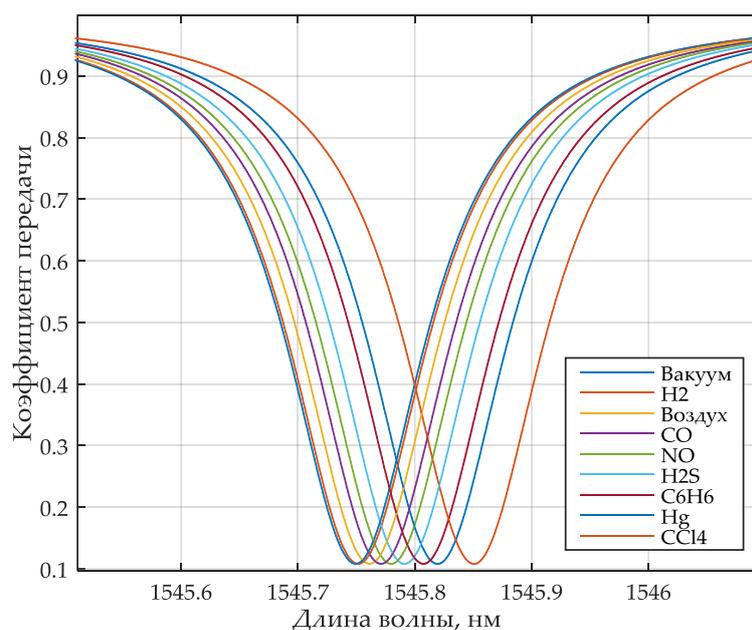


Рис. 2. Зависимость коэффициента передачи микрокольцевого резонатора от длины волны для различных газов

В модели показатель преломления окружающей среды менялся на показатели преломления газов: вакуума ($n=1,0$), водорода ($n=1,000132$ [15]), воздуха ($n=1,000273$ [16]), окиси углерода ($n=1,000334$ [17]), закиси азота ($n=1,000516$ [17]), сероводорода ($n=1,000641$ [18]), бензола ($n=1,000788$ [18]), паров ртути ($n=1,000933$ [19]), углерода четыреххлористого ($n=1,001768$ [18]). Датчик был рассчитан с использованием метода конечных элементов и затем импортирован в среду системного моделирования INTERCONNECT. В результате расчетов были получены зависимости коэффициента передачи микрокольцевого резонатора от длины волны (рис. 2) для перечисленных газообразных веществ.

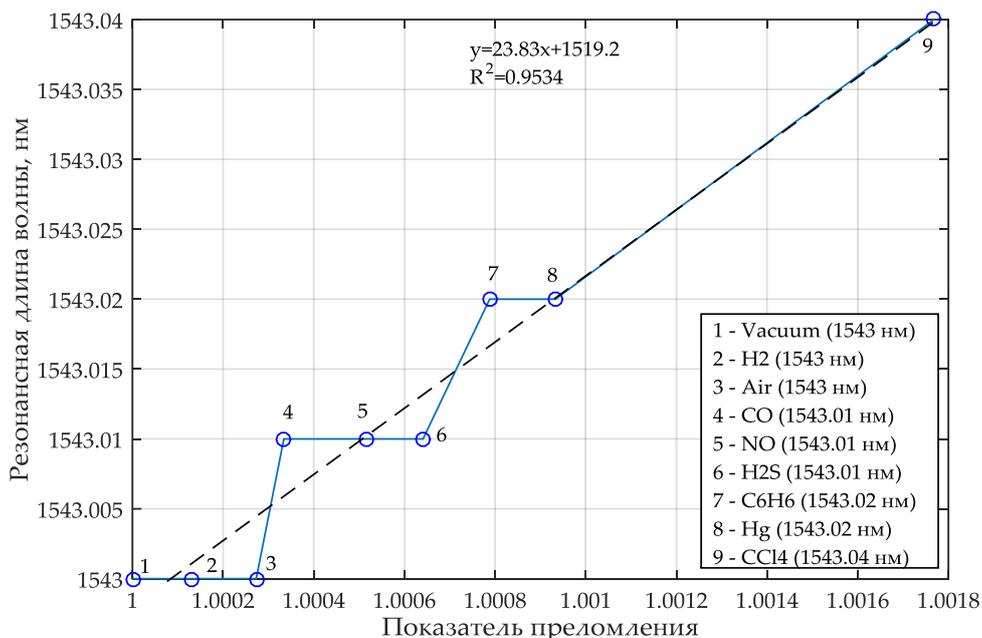


Рис. 3. Линейная зависимость между показателем преломления и резонансной длиной волны

Из рисунка 2 видно, что сдвиг резонансной длины волны для перечисленных газов имеется, но он варьируется в пределах единиц пикометров. Данные о резонансной длине волны (зависимость между ней и показателем преломления представлена на рисунке 3), а также вычисленные по формулам 1-4 характеристики сведены в таблицу 2.

Таблица 2

Характеристики датчика для различных газов

Газ	Химическая формула	Показатель преломления n	Резонансная длина волны, нм	Чувствительность, нм/RIU	FWHM, пм	Добротность Q	LoD, 10^{-4} RIU
Вакуум	-	1,0	1543	20	90	17444	44,8
Водород	H ₂	1,000132	1543				
Воздух	-	1,000273	1543				
Угарный газ	CO	1,000334	1543,01				
Моноксид азота	NO	1,000516	1543,01				
Сероводород	H ₂ S	1,000641	1543,01				
Бензол	C ₆ H ₆	1,000788	1543,02				
Пары ртути	Hg	1,000933	1543,02				
Тетрахлорметан	CCl ₄	1,001768	1543,04				

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Исходя из полученных данных можно сделать вывод, что в диапазоне показателей преломления от 1,000334 до 1,000641 датчик газа позволяет обнаруживать опасные для здоровья человека газы, включая пары ртути и хлористый углерод. Несмотря на достаточно малую чувствительность (20 нм/RIU), датчик можно использовать на производстве, где существуют риски утечки определенных газов (например, угарного газа, паров ртути и тетрахлорметана), но исключено наличие в окружающей среде монооксида азота, сероводорода и бензола.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Noh, J.-S., Lee, J.M., Lee, W.** Low-Dimensional Palladium Nanostructures for Fast and Reliable Hydrogen Gas Detection. *Sensors* 2011, 11, 825-851.
2. **Tai H. et al.** Evolution of breath analysis based on humidity and gas sensors: Potential and challenges // *Sensors and Actuators B: Chemical*. 2020. Т. 318. С. 128104.
3. **Liu C. et al.** Grating double-slot micro-ring resonator for sensing // *Optics Communications*. 2021. Т. 499. С. 127280.
4. **Sun L., Semenova Y., Wu Q., Liu D., Yuan J., Ma T., Sang X., Yan B., Wang K., Yu Ch., and Farrell G.** High Sensitivity Ammonia Gas Sensor Based on a Silica-Gel-Coated Microfiber Coupler // *J. Lightwave Technol.* 35. 2864-2870 (2017).
5. **Fabricius N., Gauglitz G., Ingenhoff J.** A gas sensor based on an integrated optical Mach-Zehnder interferometer // *Sensors and Actuators B: Chemical*. 1992. Т. 7. №. 1-3. С. 672-676.
6. **Kuzin A. et al.** Hybrid nanophotonic-microfluidic sensor for highly sensitive liquid and gas analyses // *Optics Letters*, 2022. 47(9) – 2358-2361 p.
7. **Elmanova A. et al.** Integrated optical gas sensor based on O-ring resonator and loop waveguide mirror on silicon nitride platform // *32nd European Modeling & Simulation Symposium, EMSS 2021*, pp. 333-339.
8. **Antonacci, G., Goyvaerts, J., Zhao, H., Baumgartner, B., Lendl, B., & Baets, R.** Ultra-sensitive refractive index gas sensor with functionalized silicon nitride photonic circuits // *APL photonics*. 2020. 5(8). 081301.
9. **Das C., Mohammad Z. and Alam M. M.** Optical Hydrogen Gas Sensor Based on Palladium Coated Microring Resonator // *2018 International Conference on Innovation in Engineering and Technology (ICIET)*. 2018. Pp. 1-5.
10. **Eryürek M. et al.** Optical sensor for hydrogen gas based on a palladium-coated polymer microresonator // *Sensors and Actuators B: Chemical*. 2015. Т. 212. С. 78-83.
11. **Cardenosa-Rubio M., Heather M.** Recent advances in environmental and clinical analysis using microring resonator-based sensors // *Curr Opin Environ Sci Health*. 2019. 1-14.
12. **Bogaerts W. et al.** Silicon microring resonators // *Laser Photonics Reviews*. Vol. 6. No. 1. Pp. 47–73. Sept 2012.
13. **Wang X., Flueckiger J., Schmidt S., Grist S., Fard S.T., Kirk J., Doerfler M., Cheung K.C., Ratner D.M., Chrostowski L.** A Silicon Photonic Biosensor Using Phase-Shifted Bragg Gratings in Slot Waveguide // *J. Biophoton*. 2013.
14. **Luke K., Okawachi Y., Lamont M. R. E., Gaeta A. L., and Lipson M.** Broadband mid-infrared frequency comb generation in a Si₃N₄ microresonator // *Opt. Lett.* 2015. 40. 4823-4826.
15. **Peck E.R., Huang S.** Refractivity and Dispersion of Hydrogen in the Visible and near Infrared // *J. Opt. Soc. Am.* 1977. 67. 1550.
16. **Ciddor P.E.** Refractive Index of Air: New Equations for the Visible and near Infrared // *Appl. Opt.* 1996. 35. 1566.
17. **Smith P. L., Huber M. C. E., Parkinson W. H.** Refractivities of H₂, He, O₂, CO, and Kr for 168 ≤ λ ≤ 288 Nm // *Phys. Rev. A*. 1976. 13. 1422-1434.
18. **Moutzouris K., Papamichael M., Betsis S. C., Stavrakas I., Hloupis G., Triantis D.** Refractive, Dispersive and Thermo-Optic Properties of Twelve Organic Solvents in the Visible and near-Infrared // *Appl. Phys. B*. 2014. 116, 617-622.
19. **Inagaki T., Arakawa E. T., Williams M. W.** Optical Properties of Liquid Mercury // *Phys. Rev. B*. 1981. 23. 5246-5262.

ОБ АВТОРАХ

АЛЕКСАКИНА Яна Витальевна, асп. каф. ТС. Дипл. инженер (УГАТУ, 2022).

ЗАКОЯН Аида Гайковна, магистрант каф. ТС. Дипл. бакалавр (УГАТУ, 2021).

ВОРОНКОВ Григорий Сергеевич, доцент каф. ТС. Дипл. инженер (УГАТУ, 2007). Кандидат техн. наук в телекоммуникационных системах, сетях и устройствах (УГАТУ, 2017). Иссл. в лаборатории «Сенсорные системы на основе устройств интегральной фотоники».

ИВАНОВ Влад Викторович, асп. каф. ТС. Дипл. инженер (УГАТУ, 2017).

КУТЛУЯРОВ Руслан Владимирович, доцент каф. ТС. Дипл. инженер (УГАТУ, 2008). Кандидат техн. наук в телекоммуникационных системах, сетях и устройствах (УГАТУ, 2017). Иссл. в лаборатории «Сенсорные системы на основе устройств интегральной фотоники».

METADATA

Title: Simulation of a silicon nitride gas sensor.

Authors: Y. V. Aleksakina¹, A. G. Zakoyan², G. S. Voronkov³, V. V. Ivanov⁴, R. V. Kutluyarov⁵

Affiliation:

¹⁻⁵ Ufa University of Science and Technology (UUST), Russia.

Email: ¹aleksakina.yv@ugatu.su, ²zakoyan.ag@ugatu.su, ³voronkov.gs@ugatu.su, ⁴ivanov.vv@ugatu.su, ⁵kutluyarov.rv@ugatu.su.

Language: Russian.

Source: Molodezhnyi Vestnik UGATU (scientific journal of Ufa University of Science and Technology), no. 3 (29), pp. 81-85, 2023. ISSN 2225-9309 (Print).

Abstract: In this article, an all-pass microring resonator on a silicon nitride platform is simulated when it is exposed to various gases hazardous to human health. The gas changes by changing the index of refraction: from vacuum ($n=1.0$) to CCl_4 ($n=1.001768$). For various gases, resonant wavelengths were obtained, thanks to which such characteristics as the quality factor Q , sensitivity, as well as the limit of detection (LoD) were obtained. Based on the simulation results, it can be seen that this sensor will not be able to detect the presence of CO and NO gases, but at the same time, they can be used to detect, for example, carbon tetrachloride and mercury vapor, which are gases that are toxic to humans.

Key words: microring resonator; silicon nitride; gas sensor; optical sensor.

About authors:

ALEKSAKINA, Yana Vitalievna, Postgrad. (PhD) Student, Dipl. engineer (USATU, 2022). Dept. of Telecommunication Systems (UUST).

ZAKOYAN, Aida Gaykovna, graduate student at the Ufa University of Science and Technology, bachelor's degree (USATU, 2021). Dept. of Telecommunication Systems (UUST).

VORONKOV, Grigory Sergeevich, ass. Prof. of the Dept. of Telecommunication Systems (UUST). Dipl. engineer (USATU, 2007). Cand. of Tech. Sc. in telecom. systems, networks and devices (USATU, 2017), research laboratory "Sensor systems based on integrated photonics devices".

IVANOV, Vlad Viktorovich, Postgrad. (PhD) Student, Dipl. engineer (USATU, 2017). Dept. of Telecommunication Systems (UUST).

KUTLUYAROV, Ruslan Vladimirovich, ass. Prof. of the Dept. of Telecommunication Systems (UUST). Dipl. engineer (USATU, 2008). Cand. of Tech. Sc. in telecom. systems, networks and devices (USATU, 2017), research laboratory "Sensor systems based on integrated photonics devices".