

一种可见光波段气体传感器的设计与研究

罗世忠, 王琦, 孙光瑀, 张大伟

(上海理工大学 光电信息与计算机工程学院, 上海 200093)

摘要: 为了设计一种性能优越的气体传感结构, 提出一种亚波长介质光栅/电介质/金属衬底混合波导结构, 基于导模共振效应, 在反射光谱中形成 4 个窄带共振缺陷峰。选用多孔硅作为波导层, 基于多孔硅的折射率可调特性, 通过观察共振波长的漂移实现样本气体浓度的动态监测, 分析结构的传感特性。结果表明, 3 个窄带共振峰的灵敏度分别为 300, 350, 400 nm/RIU, 品质因数分别可以达到 120, 152.2, 307.7/RIU, 检测精度高, 皆可用于气体传感。

关键词: 气体传感器; 亚波长光栅; 导模共振; 多孔硅; 品质因数

中图分类号: O 433 **文献标志码:** A

Design and analysis of a visible light band gas sensor

LUO Shizhong, WANG Qi, SUN Guangyu, ZHANG Dawei

(School of Optical-Electrical and Computer Engineering, University of
Shanghai for Science and Technology, Shanghai 200093, China)

Abstract: In order to design a gas sensing structure with superior performance, a hybrid waveguide structure consisting of a subwavelength dielectric grating, a dielectric layer and a metal substrate was proposed. Based on the guided mode resonance, four narrow-band resonance defect peaks were formed in the reflection spectrum. Porous silicon was used as the waveguide layer. Based on the refractive index tunable properties of porous silicon, the structure can realize the dynamic monitoring of sample gas concentration by observing the drift of the resonance wavelength, and the analysis of sensing characteristics of the structure. The results illustrate that the sensitivity of three narrow-band resonance peaks are 300, 350, 400 nm/RIU respectively. And the figure of merit can reach 120, 152.2, 307.7/RIU respectively. The structure has a high detection accuracy and can be used for gas sensing.

Keywords: gas sensor; subwavelength grating; guide mode resonance; porous silicon; figure of merit

导模共振 (guide mode resonance, GMR) 是指外部传播的衍射场与受调制波导的泄漏模之间产生耦合, 当入射光参数或光栅结构参数发生极小变

化时, 光栅衍射波的传播能量发生剧烈变化的现象^[1-2]。GMR 光谱具有高衍射效率和窄带宽性质, 可应用于窄带滤光片、光学调制器和传感器等光

收稿日期: 2019-09-06

基金项目: 国家自然科学基金资助项目 (61775140, 61775141)

第一作者: 罗世忠 (1996-), 男, 硕士研究生。研究方向: 共振传感器。E-mail: 1099286599@qq.com

通信作者: 王琦 (1984-), 女, 副教授。研究方向: 微纳光学器件。E-mail: shelly3030@163.com

学器件的设计。当介质光栅附着在具有吸收特性的衬底(例如金属材料)上时, 在 GMR 发生时具有强烈的吸收特性^[3], 反射谱中会出现窄带的共振缺陷峰。

由于 GMR 传感器具有高灵敏度、免标记、微型化以及实时检测等优势, 将基于共振效应的器件应用于传感领域的研究越来越多^[4-5]。Hemmati 等^[6]通过微加工工艺, 在光纤顶端制作集成的 GMR 结构, 能够实现约 77% 的光传输效率, 同时可以实现传感功能, 其灵敏度约为 200 nm/RIU(refractive index unit, RIU)。Lin 等^[7]提出在全介质 GMR 传感器结构中增加一层金属缓冲层, 可以显著提高传感器的灵敏度。Wang 等^[8]设计了一种透射式的气体传感器, 灵敏度高达 748 nm/RIU。燕山大学的陈颖等^[9]提出一种用于近红外波段的混合波导传感结构, 结构中可产生多种共振模式, 模式之间相互耦合, 反射谱中出现两个窄带缺陷峰, 结构灵敏度分别为 466 nm/RIU 和 628 nm/RIU, 品质因数(figure of merit, FOM)分别可达 42.3/RIU 和 78.5/RIU。

但是, 当前大多研究基于共振效应的传感结构, 其品质因数并不优越, 从而会影响测量结果的精确性。为了设计一种具有较高 FOM 的传感结构^[10], 本文提出一种应用于可见光波段的混合波导结构, 在结构中产生导模共振模式, 反射光谱中出现 4 个共振缺陷峰, 其中 3 个共振峰拥有较好的 FOM, 可以用于气体传感, 利用多孔硅的折射率可调特性, 能够实现待测气体浓度的动态测量。

1 结构建立与设计原理

1.1 结构建立

图 1 为亚波长介质光栅/介质波导/金属衬底结构模型(yz 面截面图), 该结构从上至下依次为介质光栅层、电介质层和金属层(当结构参数一致, 将衬底材料换为电介质时, 该结构的灵敏度基本不变, 但其品质因数明显降低)。根据 Lin 等^[7]的研究, 该现象可归因于金属层对倏逝波的调制作用, GMR 传感器是一种高谐振器件, 必须很好地满足波导的高约束条件, 金属由于反射率高, 可以将光反射到任意方向, 在任何传播角度都可以很容易实现对高品质因子共振的约束。采用的结构参数为: 光栅层材料为二氧化钛(TiO₂); 光栅

周期为 $A=430\text{ nm}$; 光栅脊宽度为 $w=180\text{ nm}$; 厚度为 $d_g=40\text{ nm}$; 外部环境气体为空气, 折射率为 $n_c=1$; 选用多孔硅作为电介质材料, 厚度为 $d_w=725\text{ nm}$ 。由 Bruggeman 等效介质理论^[11]可知, 当多孔硅的孔隙率为 71.8% 时, 其等效折射率为 $n_w=1.5$; 金属衬底选用金属银, 其介电常数由 Lorentz-Drude 模型描述。

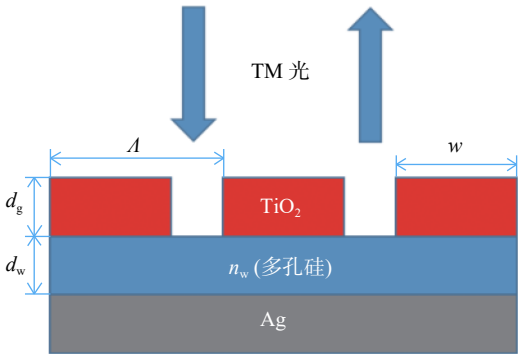


图 1 混合波导结构模型
Fig.1 Structural model of the hybrid waveguide

该研究利用时域有限差分法(FDTD)对所提结构的光学特性进行研究, 结构参数如表 1 所示。采用 FDTD Solutions 软件对该结构进行模拟分析, 以一个光栅周期为一个单元, TM 模式光垂直入射到光栅表面, 收集反射光(平行于入射光), 分析其光学特性。

表 1 结构参数表
Tab.1 Structure parameters

材料	折射率	厚度/nm	光栅脊宽度/nm	周期/nm
空气	1	—	—	—
TiO ₂ (光栅)	—	40	180	430
多孔硅(孔隙率71.8%)	1.5	725	—	—
Ag	—	—	—	—

1.2 设计原理

光栅可以看作是周期调制的波导, 当光栅的高级次子波与波导所支持的导模在参数上接近时, 光栅的能量重新分布。由于光栅的周期调制性使得光栅波导有泄漏, 因而泄漏能量也重新分布形成导模共振效应。根据光波导理论, 光栅层等效的光波导与第 j 级消逝波的有效传播常数 β 可以表示为:

$$\beta_j = k_0(n_1 \sin\theta - j\lambda/A) \tag{1}$$

式中: n 为介质折射率; θ 为折射角; λ 为入射光波长; $k_0=2\pi/\lambda$ 。

该式表明第 j 级消逝波与导模相位匹配时，能够产生导模共振^[12]。根据导模共振的约束条件，在非正入射条件下，共振峰将会分裂成两个，单通道结构演变为双通道结构^[13]。本研究提出的结构为四通道导模共振结构，能够同时调谐 4 个波长的光，与传统的单通道结构相比，该结构可以简化光学系统，减轻系统的负荷^[14]。

王振华等^[15]提出增加缓冲层可以得到多通道的滤波结构，在保持光栅参量以及其他参量不变的情况下，只改变缓冲层的厚度，随着缓冲层的厚度改变，波导所支持的模式将会增加，将会出现更多的共振峰。此外，共振结构的反射率也会随着缓冲层厚度的改变而改变。

根据时域有限差分法，采用 FDTD Solutions 在单层导模共振结构的基础上，增加一层介质层充作缓冲层，优化结构参数，获得了光学特性较好的四通道结构。

2 传感特性分析

采用 FDTD Solutions 软件进行计算得到该结构的反射光谱，如图 2 所示，在可见光波段得到 4 个共振缺陷峰， λ_1 为 436.072 nm， λ_2 为 486.675 nm， λ_3 为 554.309 nm， λ_4 为 609.921 nm。

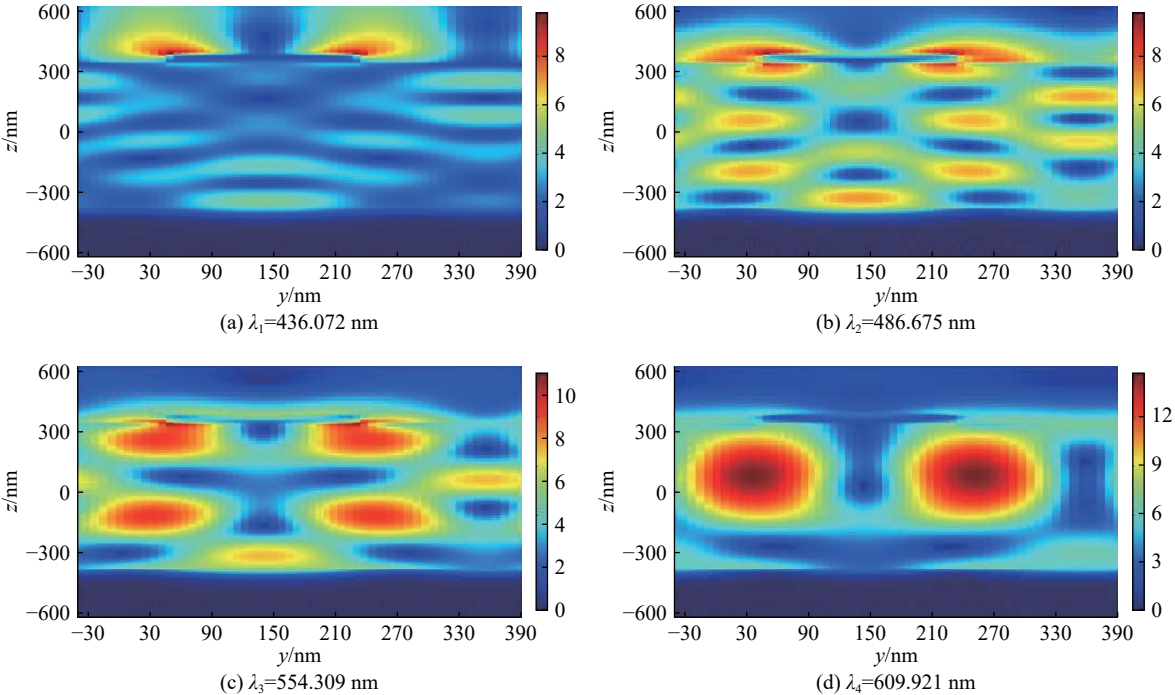


图 3 不同共振波长处的电场分布图

Fig.3 Electric field distributions at different resonant wavelengths

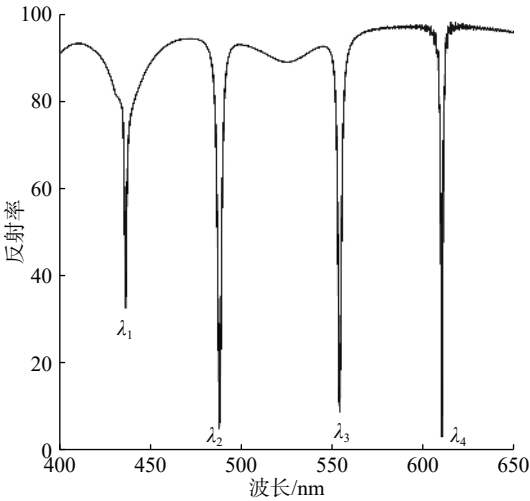


图 2 传感结构反射光谱

Fig.2 Reflection spectrum of the sensing structure

同时，对共振缺陷波长处的电场进行了模拟计算，观察结构中的共振情况，图 3 为 4 个共振波长的电场分布图：图(a)中能量集中分布在光栅脊两侧；图(b)中能量分布在结构各层，但光栅与介质层接触面处的能量更集中，电场强度最大；从图(c)可以看出，电场主要分布在介质层内部，且最大电场强度高于图(b)中数值；从图(d)可知，当共振波长为 609.9 nm 时，能量高度集中在介质层内部，电场强度达到最大，且分布在光栅两侧，说明该处的共振效应最强。

该结构采用多孔硅充作波导层介质, 在进行气体浓度测量时, 当多孔硅的孔隙内吸附一定浓度的待测气体时, 多孔硅的有效折射率会随着气体浓度的改变随之发生变化^[16], 使得结构光学响应特性发生变化, 因而该结构能够实现待测气体浓度的动态测量, 例如折射率较高的甲醛气体等。将传感结构放置于一定浓度的待测气体中, 通过分子的自由运动, 待测气体扩散到多孔硅的孔隙中, 当传感结构内外气压稳定时, 多孔硅的有效折射率发生相应变化, 其变化规律遵循 Bruggeman 介电函数近似模型^[17]:

$$(1-\rho) \frac{n_{\text{Si}}^2 - n_{\rho\text{Si}}^2}{n_{\text{Si}}^2 + 2n_{\rho\text{Si}}^2} + \rho \frac{n_c^2 - n_{\rho\text{Si}}^2}{n_c^2 + 2n_{\rho\text{Si}}^2} = 0 \quad (2)$$

式中: n_{Si} 为硅的折射率; $n_{\rho\text{Si}}$ 为多孔硅的等效折射率; ρ 为多孔硅的孔隙率; n_c 为空气折射率。为了进一步研究该结构传感特性, 以 0.01 为步长, 将多孔硅的有效折射率增加到 1.55, 得到图 4 所示的光学响应曲线。从图 4 可以看出, 随着多孔硅有效折射率的增加, 共振峰向长波长方向漂移。当其折射率从 1.5 增加到 1.55 时, 共振峰 1 漂移到 446.092 nm, 半高全宽 (full width at half maximum, FWHM) 为 3.5 nm, 其波长灵敏度 ($S=\Delta\lambda/\Delta n$, $\Delta\lambda$ 为共振波长变化量, Δn 为折射率变化量) 为 200 nm/RIU, 品质因数 (FOM=S/FWHM) 达到 57.1/RIU; 峰 2 漂移到 501.703 nm, 半高全宽为 2.5 nm, 灵敏度为 300 nm/RIU, 品质因数为 120/RIU; 峰 3 漂移到 571.841 nm, 半高全宽为 2.3 nm, 灵敏度

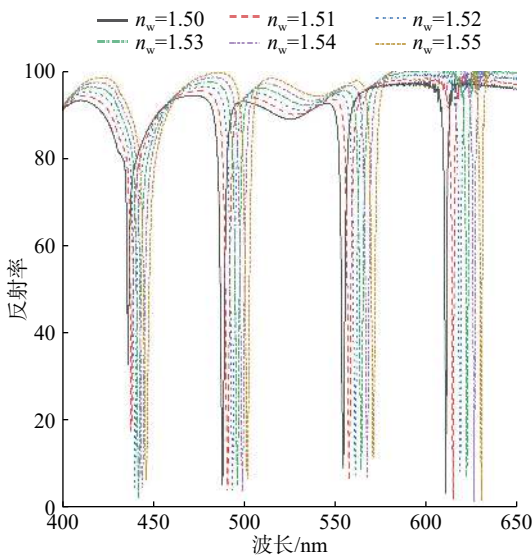


图 4 多孔硅不同折射率时共振波长漂移

Fig. 4 Resonant wavelength shift of porous silicon with different refractive indexes

为 350 nm/RIU, 品质因数为 152.2/RIU; 峰 4 漂移到 629.96 nm, 半高全宽为 1.3 nm, 灵敏度达到 400 nm/RIU, 品质因数达到 307.7/RIU。

此外, 本文还研究了共振波长差随着多孔硅折射率增加的变化情况。这里, 共振波长差定义为 $\lambda_{i+1}-\lambda_i$ ($i=1,2,3$, 定义为波长差的阶次), 即高阶共振波长减去次阶共振波长的差值, 结果如图 5 所示。不难发现, 随着多孔硅的折射率增加, 3 个阶次的波长差均在逐渐增大, 而且, 阶次越高, 波长差值随着折射率增加的变化范围越小。

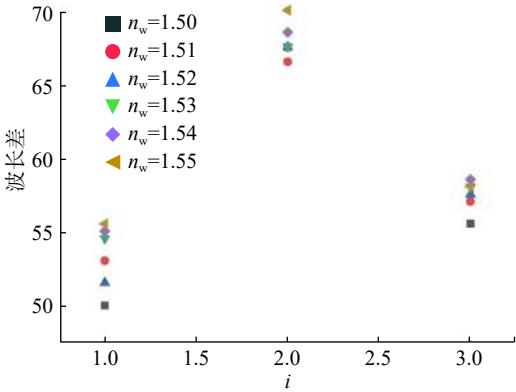


图 5 多孔硅不同折射率时共振波长差

Fig.5 Resonant wavelength difference of porous silicon with different refractive indexes

本文提出的结构能够得到 4 个共振缺陷峰, 其中, 共振峰 2, 3, 4 具有优异的传感特性, 表现出高品质因数和高灵敏度。与燕山大学的陈颖等人提出的传感结构相比, 前者灵敏度分别可达 466 nm/RIU 和 628 nm/RIU, 品质因数较低。较于前者, 该结构的灵敏度虽然较低, 但品质因数极为优越, 在进行气体浓度测量时, 误差更小, 测量结果更加精确。而且该结构适用于可见光范围, 无电磁辐射, 成本低, 频谱丰富。此外, 可见光传感器的光谱响应接近人眼函数曲线, 能够透过可见光, 过滤紫外线以及中远红外光, 增强了光学滤波效果。

3 结 论

设计了一种一维亚波长介质光栅/多孔硅/金属衬底的传感结构, 该结构可以产生导模共振, 利用 FDTD 进行参数扫描优化, 在反射光谱中形成 4 个窄带共振缺陷峰。其中 3 个共振峰表现出优异的传感性能, 品质因数分别达到 120, 152.2 和 307.7/RIU, 检测精度高, 皆可用于气体传

感。该研究能够为气体检测以及空气污染监测提供一定的参考价值。

参考文献:

- [1] 王琦, 张大伟, 陈家璧, 等. 导模共振滤光片的研究进展 [J]. *激光技术*, 2010, 34(1): 71–74, 144.
- [2] 李坤, 熊玉卿, 王济洲, 等. 基于导模共振效应的多通道窄带滤光片的设计 [J]. *真空与低温*, 2014, 20(3): 175–178.
- [3] 马伟涛, 周骏, 黄水平, 等. 金属膜衬底上亚波长介质光栅结构的特性及传感应用 [J]. *中国激光*, 2011, 38(9): 0905008.
- [4] 贾克辉, 马军山. 共振波长对导模共振生物传感器灵敏度的影响 [J]. *光谱学与光谱分析*, 2012, 32(2): 302–305.
- [5] SHI L N, POTTIER P, PETER Y A, et al. Guided-mode resonance photonic crystal slab sensors based on bead monolayer geometry[J]. *Optics Express*, 2008, 16(22): 17962–17971.
- [6] HEMMATI H, KO Y H, MAGNUSSON R. Fiber-facet-integrated guided-mode resonance filters and sensors: experimental realization[J]. *Optics Letters*, 2018, 43(3): 358–361.
- [7] LIN S F, WANG C M, DING T J, et al. Sensitive metal layer assisted guided mode resonance biosensor with a spectrum inversed response and strong asymmetric resonance field distribution[J]. *Optics Express*, 2012, 20(13): 14584–14595.
- [8] WANG L, SANG T, LI J L, et al. High-sensitive transmission type of gas sensor based on guided-mode resonance in coupled gratings[J]. *Journal of Modern Optics*, 2018, 65(13): 1601–1608.
- [9] 陈颖, 田亚宁, 何磊, 等. 亚波长金属光栅/电介质/金属混合波导传感结构的研究 [J]. *中国激光*, 2018, 45(1): 0110001.
- [10] CHEN Z Y, ZHAO X, LIN C Y, et al. Figure of merit enhancement of surface plasmon resonance sensors using absentee layer[J]. *Applied Optics*, 2016, 55(25): 6832–6835.
- [11] 马蕾蕾. 多孔硅“黑硅”的研究 [D]. 上海: 复旦大学, 2007.
- [12] 李业, 张大伟, 王琦, 等. 亚波长导模共振滤波器的研究概况 [J]. *光学仪器*, 2016, 38(2): 185–188.
- [13] 桑田, 王占山, 吴永刚, 等. 亚波长介质光栅导模共振研究 [J]. *光子学报*, 2006, 35(5): 641–645.
- [14] 王占山, 王利, 桑田, 等. 窄带多通道滤光片的设计与制备 [J]. *红外与激光工程*, 2007, 36(3): 289–292, 315.
- [15] 王振华, 吴永刚, 桑田, 等. 带缓冲层的导模共振滤光片反射光谱特性 [J]. *光科学学报*, 2008, 28(7): 1425–1428.
- [16] 陈颖, 赵志勇, 何磊, 等. 表面覆膜波导光栅共振光谱特性及传感机理分析 [J]. *光谱学与光谱分析*, 2018, 38(7): 2320–2324.
- [17] ZHANG D L, CHERKAEV E, LAMOUREUX M P. Stieltjes representation of the 3D Bruggeman effective medium and Padé approximation[J]. *Applied Mathematics and Computation*, 2011, 217(17): 7092–7107.

(编辑: 丁红艺)