

Міністерство освіти і науки України  
Харківський національний університет радіоелектроніки

Факультет Електронної та біомедичної інженерії  
(повна назва)

Кафедра Фізичних основ електронної техніки  
(повна назва)

## КВАЛІФІКАЦІЙНА РОБОТА Пояснювальна записка

рівень вищої освіти другий (магістерський)  
СЕНСОР ГАЗІВ НА ОСНОВІ ФОТОННО-КРИСТАЛІЧНИХ  
РЕЗОНАТОРІВ  
(тема)

Виконав:  
студент 2 курсу, групи ФТОІм-22-1  
Лебедєв Є.В.  
(прізвище, ініціали)

Спеціальність 152 Метрологія та інформаційно-  
вимірювальна техніка  
(код і повна назва спеціальності)

Тип програми освітньо-професійна  
(освітньо-професійна або освітньо-наукова)

Освітня програма «Фотоніка та  
оптоінформатика»  
(повна назва освітньої програми)

Керівник проф. каф. ФОЕТ Одаренко Є.М.  
(посада, прізвище, ініціали)

Допускається до захисту

Зав. кафедри \_\_\_\_\_  
(підпис)

Гнатенко О.С.  
(прізвище, ініціали)

2024 р.

Харківський національний університет радіоелектроніки

Факультет Електронної та біомедичної інженерії  
(повна назва)  
Кафедра Фізичних основ електронної техніки  
(повна назва)  
Рівень вищої освіти другий (магістерський)  
Спеціальність 152 Метрологія та інформаційно-вимірювальна техніка  
(код і повна назва)  
Тип програми освітньо-професійна  
(освітньо-професійна або освітньо-наукова)  
Освітня програма «Фотоніка та оптоінформатика»  
(повна назва)

ЗАТВЕРДЖУЮ:

Зав. кафедри \_\_\_\_\_

(підпис)

« \_\_\_\_\_ » 20 \_\_\_\_ р.

## ЗАВДАННЯ

### НА КВАЛІФІКАЦІЙНУ РОБОТУ

студентові Лебедєву Євгенію Володимировичу  
(прізвище, ім'я, по батькові)

1. Тема роботи Сенсор газів на основі фотонно-кристалічних резонаторів

затверджена наказом університету від « 03 » листопада 2023 р. № 1285 Ст

2. Термін подання студентом роботи до екзаменаційної комісії 23 січня 2024 р.

3. Вихідні дані до роботи конфігурації фотонно-кристалічних резонаторів, що використовуються в сенсорних пристроях; дисперсійні властивості фотонних кристалів з різними типами симетрії; конфігурації сенсорних пристроїв для детектування газових сумішей.

4. Перелік питань, що потрібно опрацювати в роботі \_\_\_\_\_

1. Застосування фотонно-кристалічних структур в газових сенсорах.

2. Формування фотонно-кристалічних резонаторів з оптимізованими характеристиками.

3. Моделювання газового сенсору із застосуванням фотонно-кристалічних резонаторів різноманітних конфігурацій.

4. Підбір параметрів фотонно-кристалічного сенсора газів для отримання необхідних експлуатаційних характеристик.

5. Перелік графічного матеріалу із зазначенням креслеників, схем, плакатів, комп'ютерних ілюстрацій \_\_\_\_\_

Схема оптична структурна (Л1) – установка експериментальна. \_\_\_\_\_

Демонстраційний матеріал – 12 слайдів. \_\_\_\_\_

---

---

---

---

---

---

---

---

---

---

### КАЛЕНДАРНИЙ ПЛАН

| № | Назва етапів роботи   | Терміни виконання етапів роботи | Примітка |
|---|---|---------------------------------|----------|
| 1 | Інформаційно-тематичний пошук та огляд літературних джерел про фотонно-кристалічні датчики газу | 01.09.23–26.09.23               | Виконано |
| 2 | Дослідження характеристик фотонних кристалів та резонаторів на їх основі                        | 30.09.23–22.10.23               | Виконано |
| 3 | Виконання чисельних розрахунків характеристик фотонно-кристалічних сенсорів газу                | 02.11.23–20.11.23               | Виконано |
| 4 | Аналіз результатів розрахунків та підбір параметрів сенсорних пристроїв                         | 25.11.23–10.12.23               | Виконано |
| 5 | Оформлення пояснювальної записки  | 13.12.23–04.01.24               | Виконано |
| 6 | Оформлення демонстраційних матеріалів   | 05.01.24–17.01.24               | Виконано |
| 7 | Проходження нормоконтролю і отримання рецензії  | 18.01.24–19.01.24               | Виконано |
| 8 | Проходження перевірки на плагіат  | 20.01.24–21.01.24               | Виконано |
| 9 | Підготовка та захист кваліфікаційної роботи   | 22.01.24–24.01.24               |          |

Дата видачі завдання 01 вересня 2023 р.

Студент \_\_\_\_\_  
(підпис)

Керівник роботи \_\_\_\_\_ проф. каф. ФОЕТ Одаренко Є.М.  
(підпис) (посада, прізвище, ініціали)

## РЕФЕРАТ

Пояснювальна записка кваліфікаційної роботи: 46 с., 15 рис., 1 табл., 2 додатки, 14 джерел.

ФОТОННИЙ КРИСТАЛ, ФОТОННО-КРИСТАЛІЧНИЙ РЕЗОНАТОР, СЕНСОР ГАЗІВ, ФОТОННА ЗАБОРОНЕНА ЗОНА, ЧУТЛИВІСТЬ ГАЗОВОГО СЕНСОРУ, ДЕФЕКТ ПЕРІОДИЧНОСТІ.

Об'єкт дослідження – фотонно-кристалічний сенсор газів на основі резонансних структур.

Мета роботи – визначення експлуатаційних характеристик фотонно-кристалічного сенсора газів та методів їх поліпшення.

Метод дослідження – теоретичний із застосування чисельних методів розрахунку.

У роботі розглянуто конфігурації фотонно-кристалічних сенсорних пристроїв для визначення параметрів газових сумішей, що побудований на основі двовимірного фотонного кристалу з точковими дефектами періодичності двох різних конфігурацій. Створено розрахунковий проєкт для визначення основних експлуатаційних характеристик сенсору. На основі результатів розрахунків визначені основні експлуатаційні характеристики сенсора та запропоновано метод їх поліпшення.

## ABSTRACT

Explanatory note of the qualification work: 46 pp., 15 figures, 1 tables, 2 applications 14 sources.

PHOTONIC CRYSTAL, PHOTONIC CRYSTAL CAVITY, GAS SENSOR, PHOTONIC BANDGAP, SENSITIVITY OF GAS SENSOR, SENSITIVITY OF GAS SENSING, PERIODICITY DEFECT

The object of research is a photonic crystal gas sensor based on resonant structures.

The purpose of the work is to determine the performance characteristics of the photonic crystal gas sensor and methods of their improvement.

The research method is theoretical with the use of numerical calculation methods.

The paper considers the configuration of photonic crystal sensor devices for determining the parameters of gas mixtures, which is built on the basis of a two-dimensional photonic crystal with periodic point defects of two different configurations. A calculation project was created to determine the main operational characteristics of the sensor. Based on the results of the calculations, the main operating characteristics of the sensor were determined and a method of their improvement was proposed.

## ЗМІСТ

|  |    |
|--|----|
| Вступ.....   | 7  |
| 1 Фотонно-кристалічні датчики газу.....                                | 8  |
| 1.1 Фотонні кристали в газових сенсорах .....                          | 10 |
| 1.2 Реалізація сенсорів з використанням 3D фотонних кристалів.....     | 15 |
| 1.3 Реалізація сенсорів з використанням 2D фотонних кристалів.....     | 19 |
| 1.4 Прогнозні припущення щодо розвитку газових сенсорів .....          | 26 |
| 2 Моделювання фотонно-кристалічного сенсора газів.....                 | 27 |
| 2.1 Проектування та моделювання фотонно-кристалічної нанопорожнини ... | 29 |
| 2.2 Оптимізація фотонно-кристалічної нанопорожнини .....               | 31 |
| 2.3 Характеристики виявлення газу оптимізованою нанопорожниною .....   | 33 |
| Висновки.....  | 44 |
| Перелік джерел посилання .....   | 45 |
| Додаток А Графічний матеріал .....                                     | 47 |
| Додаток Б Демонстраційний матеріал .....                               | 50 |

## ВСТУП

Сенсори на основі фотонно-кристалічних резонаторів — це датчики, що використовують поведінку світла для виявлення та вимірювання різних факторів навколишнього середовища. Що відрізняє їх від інших, так це здатність маніпулювати світловими хвилями через крихітні структури, вигравірувані на чіпі, що дозволяє проводити високочутливі та точні вимірювання. Ці датчики можуть швидко й точно аналізувати різноманітні параметри без потреби у складному обладнанні, будь то температура, тиск, вологість або навіть наявність певних молекул або речовин,

Серед різноманітних датчиків можна виокремити сенсори газів. Вони є важливими пристроями, які допомагають виявляти та вимірювати наявність та концентрацію різних газів у навколишньому середовищі. Використання фотонно-кристалічних резонаторів як основи для сенсорів газів є одним з інноваційних розв'язків у цій галузі.

Загалом, використання фотонно-кристалічних резонаторів у сенсорах газів є досить новим інженерним розвитком. Протягом останніх десятиріч ця технологія знаходить все більше застосування у різних галузях, таких як промисловість, медицина та охорона навколишнього середовища.

Сенсори газів на основі фотонно-кристалічних резонаторів є одними з найбільш перспективних технологій у сучасній науці та промисловості. Вони забезпечують високу чутливість, швидкість реакції та точність виявлення газових речовин.

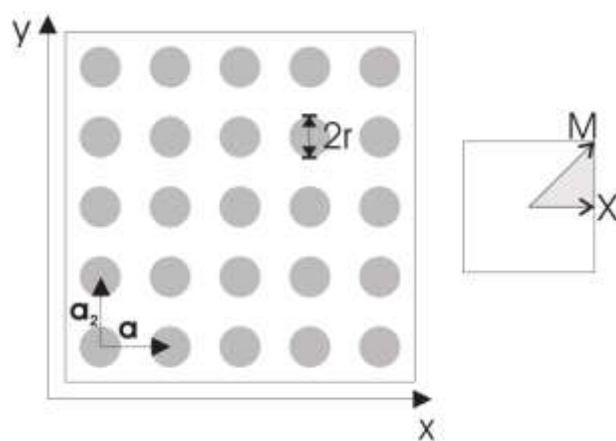
Сенсори газів на основі фотонно-кристалічних резонаторів мають кілька переваг порівняно з традиційними сенсорами. Перш за все, вони є дуже чутливими, що дозволяє точно вимірювати навіть низькі концентрації газів. Крім того, вони мають широкий діапазон робочих температур та можуть працювати в найрізноманітніших середовищах. Також вони мають високу стійкість та довговічність, що робить їх ідеальними для використання в умовах з високою надійністю та тривалою роботою.

## 1 ФОТОННО-КРИСТАЛІЧНІ ДАТЧИКИ ГАЗУ

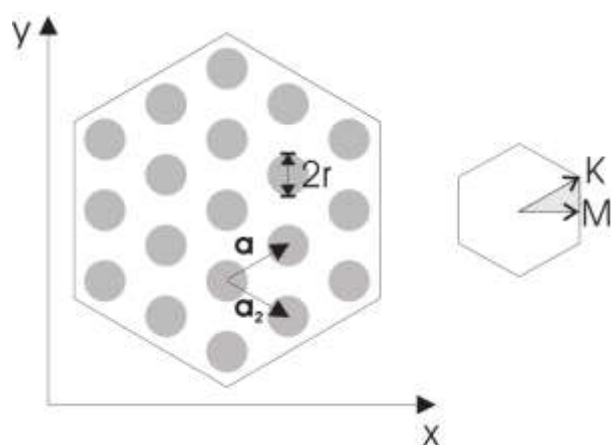
Фотонні кристали (ФК) є оптичним аналогом електронних напівпровідників, тобто ФК є напівпровідниками для фотонів. Концепція ФК була незалежно введена в 1987 році С. Джоном [1] та Е. Яблоновичем [2]. В електронних напівпровідниках, таких як Si або GaAs, зонна структура для електронів виникає в результаті періодичного розташування атомів, що становлять кристалічні ґрати. Електронні хвилі, що біжать через електронний напівпровідник, розсіюються на періодичних електростатичних потенціалах атомів, і їх інтерференція призводить до заміни закону дисперсії вільних електронів  $E(k) = (\hbar^2 k^2)/(2m)$  на електронну зонну структуру.

У ФК фотонна зонна структура (ФЗС) виникає в результаті розсіювання та інтерференції електромагнітних хвиль при періодичному розташуванні матеріалів з різними показниками заломлення  $n = \sqrt{\varepsilon}$ , де  $\varepsilon$  – діелектрична проникність матеріалів. ФЗС замінює закон дисперсії фотонів  $\omega = (c/n)|\vec{k}|$  в однорідному діелектричному середовищі з показником заломлення  $n$  і частотою  $\omega$  вздовж напрямку  $\vec{k}$ , де  $c$  – швидкість світла у вакуумі. ФЗС залежить від кількох параметрів.

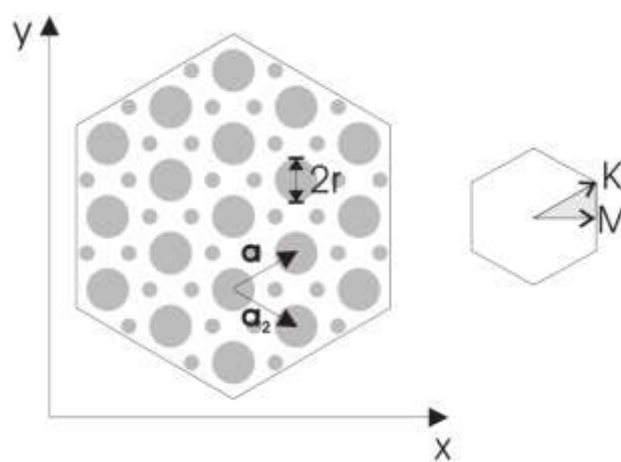
Одним із важливих параметрів є геометрія ґрат ФК. На рис. 1.1 показані три з багатьох можливих варіантів розташування матеріалу з діелектричною проникністю  $\varepsilon_2$ , наприклад, повітряних пір, у оточуючому матеріалі з діелектричною проникністю  $\varepsilon_1$ , такому як, наприклад, Si. Якщо припустити, що діаметр повітряних пір на рис. 1.1 не змінюється вздовж осі  $z$ , таку структуру називають двовимірним (2D) ФК. Якщо діаметр пір змінюється вздовж осі  $z$  таким чином, що крім періодичності в площині  $(x,y)$  є ще періодичність  $l_z$  вздовж напрямку  $z$ , таку структуру можна було б назвати тривимірною (3D) ФК. На правих вставках зображено відповідні зони Бріллюена з точками високої симетрії. Заштрихована область є незвідною зоною Бріллюена.



а)



б)



в)

а) квадратні ґрати; б) шестикутні ґрати;  
в) двоосновні шестикутні ґрати.

Рисунок 1.1 – Розташування матеріалу з діелектричною проникністю  $\epsilon_2$  всередині матеріалу з діелектричною проникністю  $\epsilon_1$

Іншим важливим параметром, що впливає на ФЗС, є так званий діелектричний контраст  $\Delta = \varepsilon_1 - \varepsilon_2$ , який є суттєвим у разі системи матеріалів повітря/Si, де  $\Delta_{\text{air,Si}} = \varepsilon_{\text{Si}} - \varepsilon_{\text{air}} = 11,6 - 1 = 10,6$ . Як правило, фотонна зонна структура зміщується у бік більш високих частот, а заборонена фотонна зона (ЗФЗ) збільшується при збільшенні діелектричного контрасту.

Крім того, ФЗС залежить від так званого відношення  $r/a$ , відношення радіусу пір  $r$  і постійної решітки  $a$  ФК. Це дуже важлива особливість, яка буде дуже корисною для застосування в датчиках газу, оскільки можна налаштувати ФЗС на різні резонансні частоти різних досліджуваних газів, просто змінюючи діаметр пір.

Більше того, масштабуюча інваріантність рівнянь Максвелла значно полегшує необхідні обчислювальні зусилля для теоретичних досліджень. Після розрахунку ФЗС, тобто, частоти і розподілу поля  $H(r)$ , для одного набору параметрів  $a$  і  $r/a$ , можна легко отримати частоти і нові розподіли поля  $H(r)$  після зміни масштабу ФК в  $s$  разів, використовуючи рівняння:

$$\epsilon'(\vec{r}) = \epsilon(\vec{r}/s), \quad (1.1)$$

$$\vec{H}'(\vec{r}) = \vec{H}(\vec{r}/s), \quad (1.2)$$

$$\omega' = \omega/s. \quad (1.3)$$

Ця масштабна інваріантність, крім того, додає більшу свободу розробки газових датчиків на основі ФК для безлічі різних газів.

### 1.1 Фотонні кристали в газових сенсорах

У багатьох областях, таких як технічна, екологічна, автомобільна, а також медична, газові датчики є незамінними. Для запобігання шкоди довкіллю необхідно контролювати концентрацію небезпечних та/або забруднюючих повітря газів, таких як  $O_3$ ,  $NO_x$ ,  $CO_x$ ,  $CH_4$ ,  $C_2H_5OH$  тощо, що виникають у

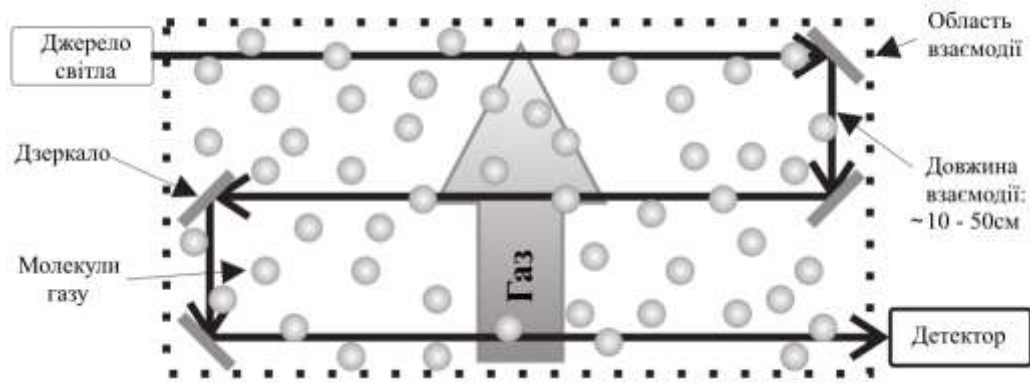
технічних процесах. Наприклад, у медичному секторі необхідно контролювати та контролювати дихальні гази.

На ринку є кілька типів датчиків газу. Один клас детекторів газу вимірює зміни провідності або ємності, спричинені присутністю певних атомів газу, які адсорбуються на поверхні або дифундують у матеріал детектора. Калориметричні газові датчики вимірюють зміну температури, коли певні гази проходять повз нагрітий детектор. Більшість з цих методів можна застосовувати лише до певних газів, які впливають на фізичні властивості матеріалів детектора.

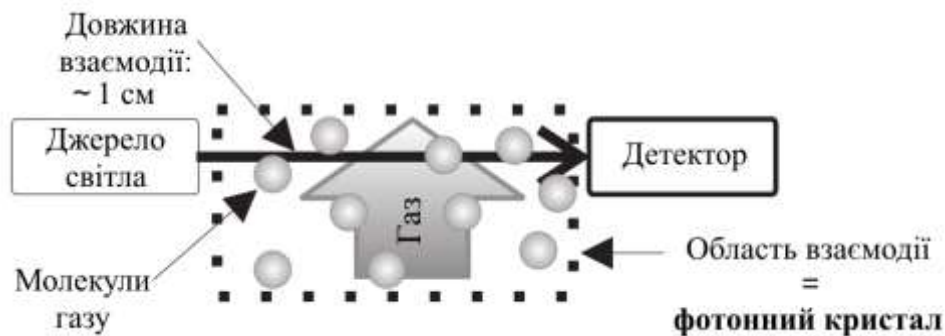
Інший клас детекторів, звані спектроскопічні чи оптичні газові датчики, вимірює зміна відображення чи пропускання у присутності газів. Тут відстежуються характеристичні лінії поглинання, що виникають в результаті обертально-коливальних збуджень молекул у середній інфрачервоній області спектра. Цей спектроскопічний підхід є досить загальним підходом, що застосовується до широкого кола газів, і, крім того, він дуже селективний через специфічні обертально-коливальні стани («відбитків пальців») для кожного газу. Основним недоліком таких оптичних датчиків є їхня відносно висока вартість через високі вимоги до оптичних компонентів.

Як альтернативний підхід, низка досліджень пропонує використання ФК для отримання компактних, надійних та недорогих спектроскопічних газових сенсорів.

Звичайний спектроскопічний датчик газу складається з трьох основних частин: джерела електромагнітного випромінювання, обсягу взаємодії та детектора випромінювання. На даний момент розглядаємо лише заміну інтерактивного об'єму в такому звичайному датчику ФК, як показано на рис. 1.2, хоча можна також подумати про заміну джерела електромагнітного випромінювання ФК термовипромінювачем, який показує посилене випромінювання в досліджуваній спектральній області завдяки перерозподілу фотонної густини станів (ФГС) всередині ФК [3–5].



(a)



(б)

Рисунок 1.2 – Порівняння звичайного датчика газу (а) та датчика газу на основі ФК (б)

Розмір датчика газу можна значно зменшити, використовуючи ФК як об'єм взаємодії. Через розбавлену природу газів їхня взаємодія зі світлом досить слабка, що, у свою чергу, вимагає відносно довгих шляхів взаємодії в діапазоні від 10 см до 50 см для типових концентрацій, де електромагнітне випромінювання взаємодіє з газом. Такі довгі шляхи взаємодії і великі обсяги взаємодії, наприклад, скляні трубки, дуже непрактичні, оскільки, по-перше, вони призводять до відносно великих сенсорних пристроїв, а по-друге, іноді навряд чи можливо заповнити газом такі великі обсяги, як, наприклад, у разі моніторингу дихання дитини.

Зменшення обсягу взаємодії можна досягти за рахунок збільшення ефективної взаємодії електромагнітного випромінювання та газу всередині обсягу взаємодії. Дзеркала можна використовувати для багаторазового відбиття

світла всередині обсягу взаємодії і тим самим посилення взаємодії між випромінюванням та газом, що дозволяє зменшити обсяг взаємодії. Така універсальна конструкція зі складним юстуванням дзеркал призводить до зниження міцності, ускладнення приладу тощо. Крім того, зазвичай необхідно підтримувати певну температуру в об'ємі взаємодії, щоб уникнути конденсації всередині об'єму взаємодії та гарантувати умови вимірювання, що відтворюються. Це енерговитратно, особливо у великих обсягах. При розгляді взаємодії газу та випромінювання у ФК необхідно враховувати кілька факторів.

Більш пильний погляд на ФЗС показує, що нахил ФЗС являє собою групову швидкість  $\vec{v}_{gr} = \partial\omega / \partial\vec{k}$  для хвиль з частотою всередині ФК, де  $\vec{k}$  – вектор у зворотній решітці ФК. Отже, в областях, де фотонні зони плоскі, групова швидкість низька. Таке зменшення групової швидкості приблизно до 0,02  $c$  і 0,05  $c$  було експериментально підтверджено для лінійних дефектів у ФК Нотомі [6] та Асано [7] відповідно, де  $c$  – швидкість світла у вакуумі. Це означає, що світло, що проходить через ФК з меншою швидкістю  $v_g < c$ , довше взаємодіє з газом, тобто час взаємодії  $T_{int}$  збільшується і, отже, довжина шляху взаємодії  $l_{int}$  може бути зменшена при збереженні постійної загальної взаємодії. В іншій простій інтуїтивній картині низька групова швидкість може бути інтерпретована як результат безлічі відбиттів від безлічі поверхонь, що розсіюють у ФК. В результаті поля розсіяних хвиль когерентно накладаються і кілька разів взаємодіють із атомами газу, що призводить до посилення взаємодії.

Крім того, необхідно враховувати перерозподіл енергії поля усередині ФК. У звичайному датчику газу режим, який взаємодіє з газом, є більш-менш плоскою хвилею. У ФК, навпаки, через інтерференції багаторазово розсіяних хвиль, що проходять через нього, може спостерігатися безліч профілів мод, що сильно відрізняються від розподілів поля плоских хвиль. Для певних частот, тобто у певних фотонних зонах, деякі з мод мають максимум напруженості поля у високій області (діелектричні зони), наприклад, у матриці Si, тоді як інші

моди мають максимуми напруженості поля в низьких областях (повітряні смуги), наприклад, у повітряних порах.

Взаємодія  $I$ , наприклад, поглинання  $A$  електромагнітних хвиль частоти  $\omega$ , що біжать через газ, де  $\omega$  – одна з резонансних частот цього газу, пропорційно напруженості перерозподіленого електричного поля  $E_{red}$  і часу взаємодії і може бути записано як:

$$Int \propto t_{int} \vec{E}_{red}^2 \propto \frac{1}{v_g} \vec{E}_{red}^2. \quad (1.4)$$

З рівняння (1.4) очевидно, що зменшення групової швидкості  $v_g$  та збільшення напруженості поля  $\vec{E}_{red}^2$ , як це можливо за допомогою ФК, дозволяє посилити взаємодію газу та випромінювання і, як наслідок, зменшити розмір обсягу взаємодії.

У класичній картині низька групова швидкість  $v_g$  відповідає високому показнику заломлення  $n_{eff}$ . З урахуванням рівнянь Френеля:

$$R = \left( \frac{n_2 - n_1}{n_2 + n_1} \right)^2, \quad (1.5)$$

$$T = \frac{4n_1 n_2}{(n_2 + n_1)^2}, \quad (1.6)$$

для відбитої та частини, що пройшла, електромагнітної хвилі, що потрапляє в діелектричне середовище з показником заломлення  $n_2$  із середовища з показником заломлення  $n_1$  при нормальному падінні, відповідно, проявляється недолік такого простого газового сенсора на основі ФК. Хоча високий ефективний показник заломлення  $n_{eff}$  плоскої смуги допомагає збільшити взаємодію між газом і світлом за рахунок зменшення  $v_g$ , він в той же час перешкоджає входу та виходу електромагнітного випромінювання з ФК

відповідно. Цю проблему можна вирішити шляхом розробки відповідного конуса або покриття, що просвітлює.

Оскільки придатність ФК у газосенсорних пристроях залежить лише від конкретної зонної структури ФК, можна враховувати як 2D, так і 3D ФК, які будуть описані далі.

## 1.2 Реалізація сенсорів з використанням 3D фотонних кристалів

Було виготовлено та досліджено 3D ФК, реалізований в системі макропористого матеріалу Si. Чисельне моделювання з використанням програмного пакету MIT Photonic Bands [8] запропонувало використовувати тривимірну структуру ФК (рис. 1.3). На рис. 1.3, а (праворуч) показано просторовий профіль діелектричної проникності. Фотонна зонна структура, приведена на рис. 1.3, а (ліворуч), показує, що верхній край забороненої фотонної зони вздовж напрямку  $\Gamma A$  збігається з лініями поглинання близько  $a/\lambda \cong 0,148$  газів, використаних для вимірювань ( $NH_3$ :  $972 \text{ cm}^{-1}$ ;  $SF_6$ :  $948 \text{ cm}^{-1}$ ) в точці А зони Бріллюена, 3D ФК зображеної на рис. 1.3, б. Завдяки некруглій формі пори, яка є неминучим результатом процесу травлення, смуги більше не дегенерують. Цим пояснюється розщеплення смуг, що спостерігається на рис. 1.3, а.

Відповідно до параметрів, використаних при моделюванні, літографічно попередньо структуровані пластини n-Si зазнавали фотоелектрохімічного травлення, як описано, наприклад, в роботі [9]. У площині  $xy$  була обрана гексагональна решітка з постійною ґратки  $a = 1,5 \text{ мкм}$ , а діаметр пір варіювався від  $(r/a)_{\min} = 0,27$  до  $(r/a)_{\max} = 0,42$  вздовж осі  $z$  з періодом модуляції  $l_z = 3,2 \text{ мкм}$ . Мікрофотографія з електронного мікроскопу фотоелектрохімічно травленого 3D ФК показана на рис. 1.3, в. Тут світло, як і газ, поширюється вздовж осі пори. Інтенсивність  $x$ - та  $y$ -компоненти електричних полів для 3-ї та 4-ї зон відповідно в точці А зони Бріллюена показані на рис. 1.3, г. Видно, що значна частина енергії концентрується в порах повітря і тому допускає взаємодію з газом, що протікає вздовж пір, як схематично показано на рис. 1.3, в.

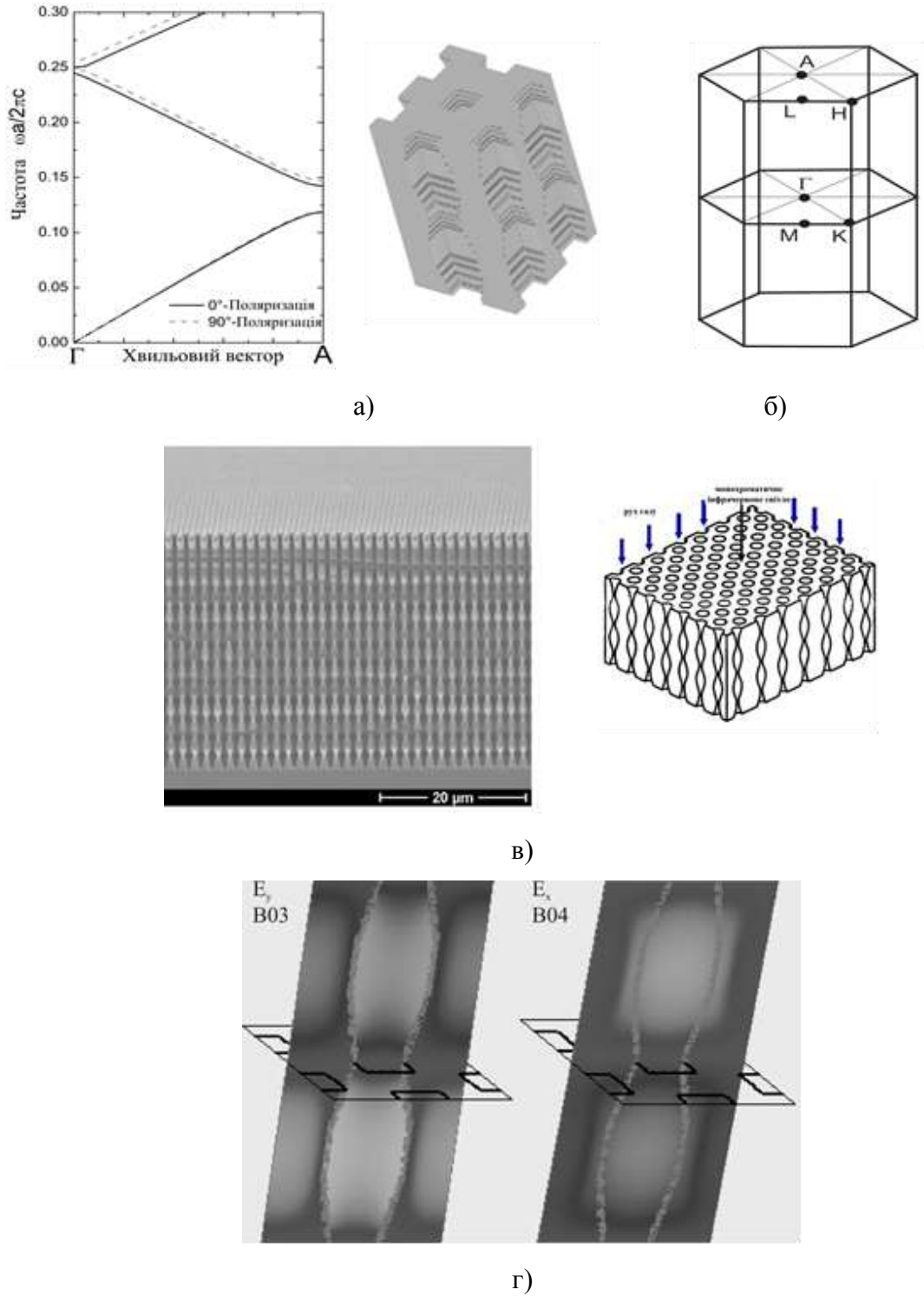
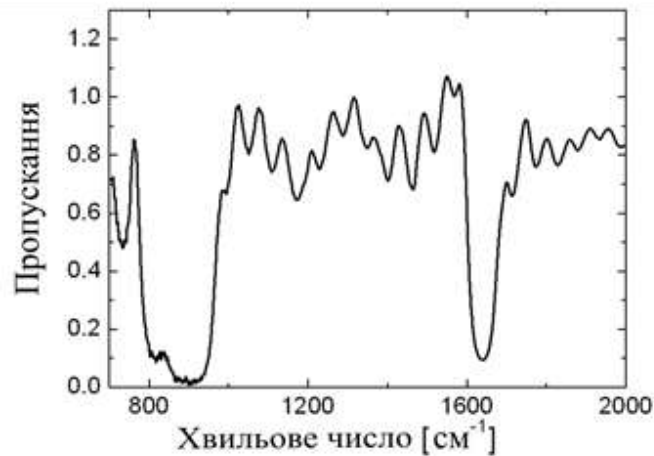


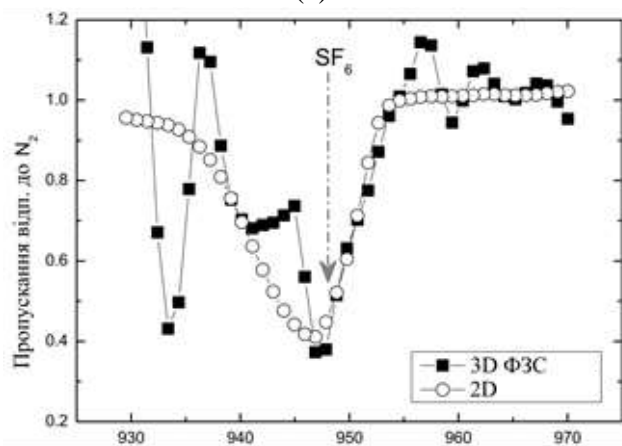
Рисунок 1.3 – Фотонний кристал, реалізований в системі макропористого матеріалу

Оптимізований 3D ФК з 10 періодами модуляції вздовж напрямку  $\Gamma A$  з повітряною смугою, що спектрально перекривається з краєм поглинання  $SF_6$ ,

може бути охарактеризований за допомогою ІЧ-спектроскопії. На рис. 1.4 показано пропускання через 3D ФК в умовах вакууму.



(a)



б)



в)

- а) пропускання через 3D ФК у вакуумі;  
 б) пропускання через заповнені  $\text{SF}_6$  ФК (нормовані на  $\text{N}_2$ ) для 3D ФК та 2D ФК з однаковою пористістю;  
 в) конструкція комірки, яка використовується для вимірювання.

Рисунок 1.4 – Пропускання через фотонний кристал в умовах вакууму

Вимірний високочастотний край фотонної забороненої зони добре відповідає розрахунковій ФЗС на рис. 1.3. Щоб перевірити очікуване підвищене поглинання, було виміряно пропускання через ФК з порами, заповненими  $\text{SF}_6$ , і нормоване пропускання з порами, заповненими  $\text{N}_2$ . Як зразок використовувався 2D ФК, тобто зразок Si без модуляції пір у напрямку ГА, з тією самою пористістю, що і 3D ФК, щоб гарантувати однакову кількість атомів газу в порах. Результати показані на рис. 1.4, б. Жодних істотних відмінностей у переданих даних немає. Досить шумна крива для 3D ФК є результатом низької ефективності зв'язку світла, що входить і виходить із ФК, через високий ефективний показник заломлення. Зважаючи на рівняння (1.4), відсутність підвищеного поглинання можна пояснити такими співвідношеннями:

- поглинання  $A$  пропорційно  $1/v_g \propto n_{\text{eff}}$ ;
- пропускання  $T$  для великих ефективних показників  $n_{\text{eff}}$  приблизно пропорційне  $1/n_{\text{eff}}$ .

Таким чином, для вимірюваного сигналу ці два ефекти компенсують один одного, тому підвищеного поглинання не спостерігається. Потенційні ефекти, пов'язані з перерозподілом енергії електричного поля, тут не враховуються. Тому для вимірювання підвищеного поглинання необхідне поліпшення проходження світла через ФК.

Принцип формування такого 3D ФК показано на рис. 1.5. Щоб уникнути сильного відбиття при з'єднанні з плоскою частиною смуги, довжину елементарного осередку вздовж осі пори збільшують, як показано в лівій частині рисунку. Це призводить до усунення відповідної смуги у бік нижчих частот, як показано в правій частині рис. 1.5. Тепер можна об'єднатися в ту ж смугу, але в більш крутій частині цієї смуги з нижчим коефіцієнтом відбиття і, отже, меншими втратами відбиття. Безперервне зменшення параметра решітки  $l_z$  до значення, необхідного для перекриття краю смуги з лінією поглинання газу адіабатично стискає світло в плоску область смуги, що використовується для реєстрації газу.

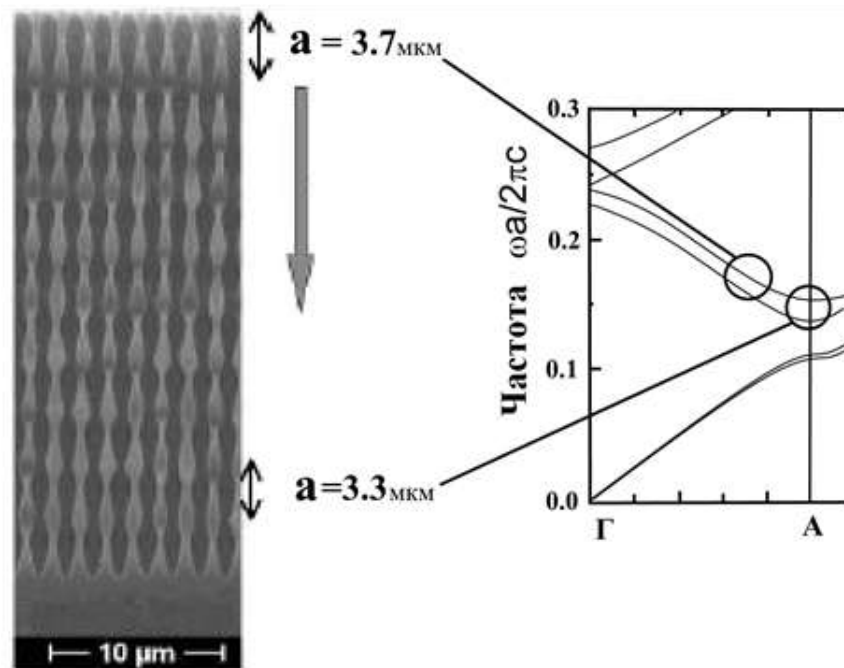


Рисунок 1.5 – Фотонно-кристалічна структура для вимірювання поглинання

На рисунку ліворуч: мікрофотографія кінцевого 3D ФК, де змінювався параметр решітки вздовж ГА. Праворуч: принцип конуса ФК: світло потрапляє в круту частину зони, що відповідає постійній решітці  $l_z$ , більшій, ніж бажана, а потім переноситься в плоску частину зони шляхом повільної зміни постійної решітки

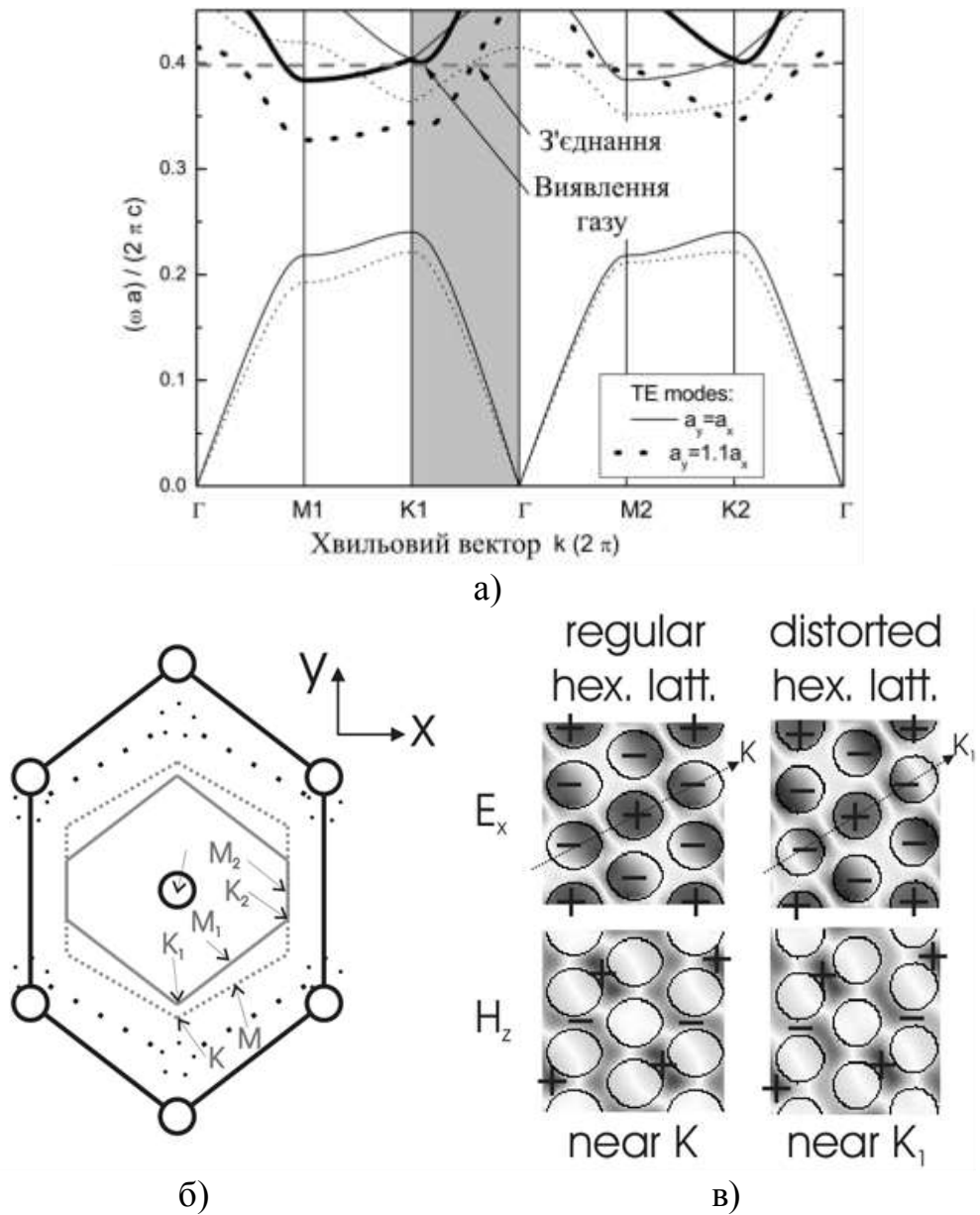
Крім того, для компенсації допусків виготовлення, що призводять до відхилення положення краю смуги від частоти поглинання газу можна обернути зразок навколо осі, вертикальної до порів. Таким чином, можна змістити край смуги приблизно на  $35 \text{ см}^{-1}$  при куті нахилу  $15^\circ$ , що відповідає 4 % положення смуги і знаходиться в межах типових виробничих допусків для макропористого кремнію.

### 1.3 Реалізація сенсорів з використанням 2D фотонних кристалів

Для ФК необхідно виключно періодичне розташування матеріалів із різною діелектричною проникністю. Тому можна вибрати різні ґрати з

базисними атомами і без них (кілька прикладів показано на рис. 1.1, (а-в), щоб отримати зонну структуру, придатну для використання в сенсорних газових пристроях. Дослідження кількох геометрій з додатковими базовими атомами і без них зробило ФК, що складається з повітряних пір, розташованих у простій гексагональній решітці  $S_i$ , як багатообіцяючого кандидата для виявлення газу на основі ФК. Чорними суцільними лініями на рис. 1.6, а показана зонна структура 2D ФК з макропористого кремнію з відношенням  $r/a = 0,385$ . Горизонтальною пунктирною сірою лінією показано частоту поглинання газу. Сіра область виділяє потрібний  $k$ -напрямок. На хвильовому векторі поблизу точки  $\Gamma K_1$  частота поглинання газу збігається з плоскою частиною другої ТЕ-смуги.  $Z$ -компонента магнітного поля  $H_z$  для цієї  $k$ -точки показана на нижній лівій панелі (рис. 1.6, в). Його симетрія дозволяє підключити до цієї моди плоску хвилю ззовні ФК. Крім того, у цій  $k$ -точці енергія електричного поля (верхня ліва панель на рис. 1.6, в) зосереджена всередині пір, тобто ця зона є повітряною зоною і, отже, допускає взаємодію з газом, що протікає через пори. Знаки «+» та «-» на рис. 1.6, в позначають позитивні та негативні значення поля. Темні кольори свідчать про високі значення інтенсивності поля. Як було показано у випадку 3D ФК для використання в газочутливих пристроях, плоскі смуги відповідають високим ефективним показникам заломлення  $n_{\text{eff}}$  і, отже, ускладнюють передачу світла в ці моди. Як рішення, у тривимірному випадку запроваджується концепція конусності, заснована на певному спотворенні ґрат ФК. Аналогічну концепцію можна використовувати і у двовимірному випадку. Точка інтересу для застосування датчика газу лежить вздовж напрямку  $\Gamma K$  у регулярній шестикутній решітці. Спотворення цієї решітки в цьому напрямку призводить до тетрагональної симетрії елементарної комірки, і тому точки високої симетрії  $M$  і  $K$  в регулярних ґратах повинні бути замінені точками високої симетрії  $K_1$ ,  $M_1$ ,  $K_2$  і  $M_2$  в регулярній решітці. Спотворені гексагональні ґрати з тетрагональною симетрією показані на рис. 1.6, б. Пунктирні лінії представляють регулярні ґрати, а суцільні лінії — спотворені гексагональні

грати. Чорні лінії позначають грати в реальному просторі, а сірі лінії позначають зони Бріллюена для обох випадків відповідно.



- а) зонна структура регулярного 2D гексагонального ФК (суцільні лінії) та спотвореного гексагонального 2D ФК (пунктирні лінії);  
 б) зони Бріллюена для регулярної та спотвореної гексагональної решітки;  
 в) поля  $E_x$  і  $H_z$  в  $K$ -точці.

Рисунок 1.6 – Модифікація зонної структури 2D фотонних кристалів

Це спотворення призводить, як і у випадку з 3D ФК, до зміщення ФЗС вниз і, отже, дозволяє з'єднатися з крутою частиною 2-ї ТЕ-моди з нижчим показником заломлення і меншим відбиттям (1.5). Поступове зменшення спотворення решітки до значення регулярної решітки повинно адіабатично зв'язувати світло з модою в бажаній  $k$ -точці.

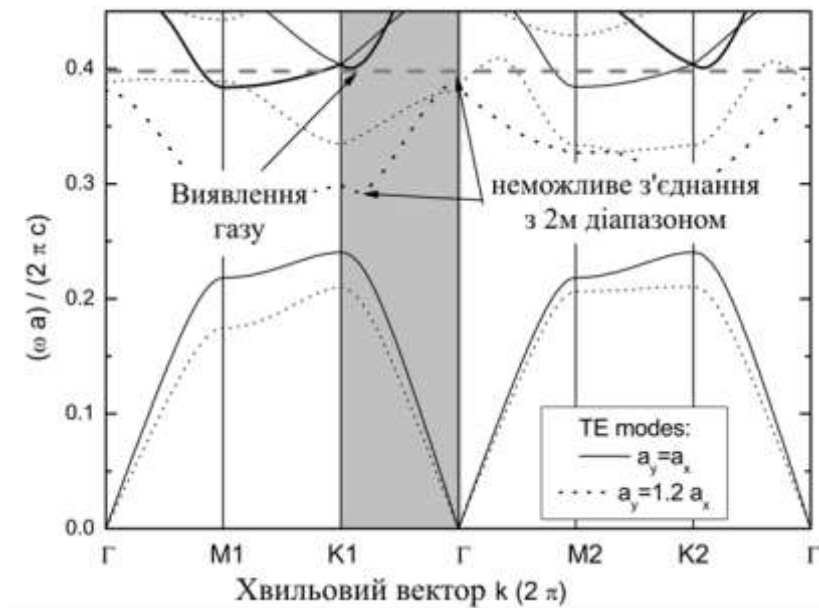
Порівняння полів регулярних гексагональних ґрат на лівих панелях рис. 1.6, б з полями на правій панелі, що представляє випадок спотворених ґрат, показує, що спотворення не має істотного впливу на розподіл поля мод і, отже, має бути адіабатичний зв'язок.

Що стосується такого роду конусності, слід додатково взяти до уваги, що існує межа того, наскільки може бути спотворена решітка ФК. Для описаної вище ситуації спотворення понад 20 % щодо постійної решітки регулярної решітки ФБС, зонна структура занадто сильно зміщується вниз і вже неможливо здійснити сполучення з потрібною модою, як показано на рис. 1.7, а. Сіра область виділяє робочий  $K$ -напрямок. Крім того, завжди слід намагатися з'єднатися з найкрутішою частиною смуги, що цікавить, тим самим забезпечуючи мінімальне відбиття.

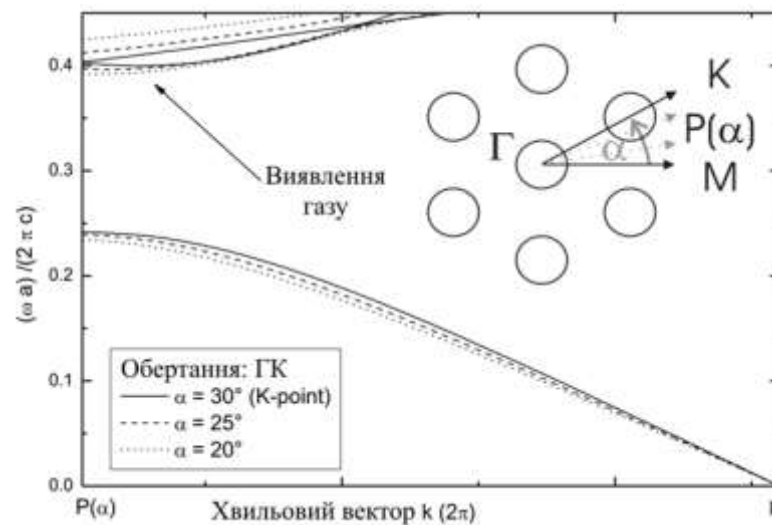
У цьому випадку спотворення близько 10 % відповідає ефективному показнику заломлення  $n_{\text{eff}} = 3,3$ , як можна бачити на рис. 1.6, а. У цьому контексті слід також пам'ятати, що у ідеалі хотілося б перевести світло лише у режим «тільки у включеному стані», тобто, працювати поблизу краю смуги вигідно. Звуження також призводить до ризику виникнення небажаних мод, як це відбувається у випадку з 3-ю смугою ТЕ вздовж ГК1. Але з причин симетрії ця смуга не може з'єднатися з плоскою хвилею, що приходить.

Як і у випадку 3D ФК, обертання (на цей раз навколо осі вздовж пір), як показано на рис. 1.7, б, дозволяє зміщувати зонну структуру для компенсації помилок виготовлення. З точки зору застосування може виявитися необхідним зробити стінки пор хімічно інертними, наприклад, для виявлення агресивних газів. Моделювання показало, що покриття стінок пор SiN товщиною в кілька

десятих нм не істотно впливає ні на ФЗС, ні на розподіл поля, необхідний для газового сенсора на основі ФК.



а)



б)

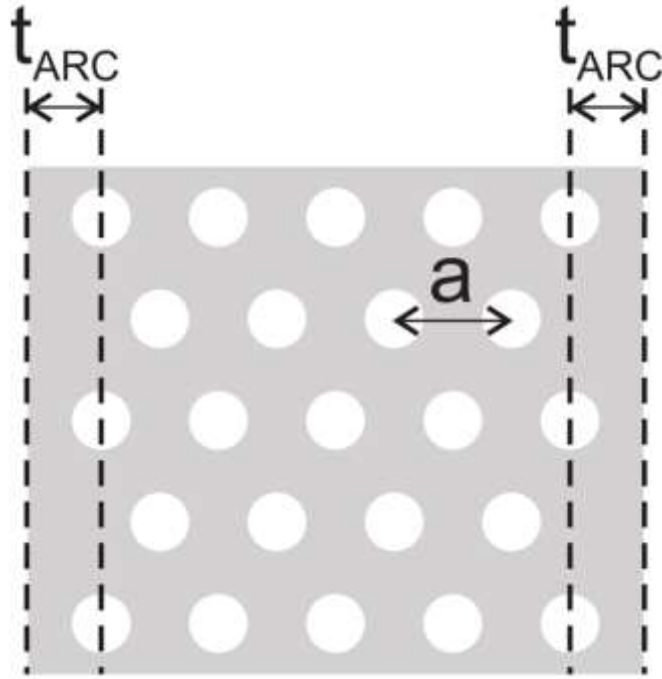
Рисунок 1.7 – Ілюстрація зміни зонної структури спотвореної решітки ФК (спотворення > 20 %) (а) та отриманої обертанням навколо осі вздовж пір (б)

Як згадувалося раніше, контактний обсяг газового сенсора, можливо, доведеться нагріти. Типові температури становлять близько 50–100 С. Зміна температури впливає як на діелектричну проникність  $\epsilon_{Si}(T)$ , так і параметр

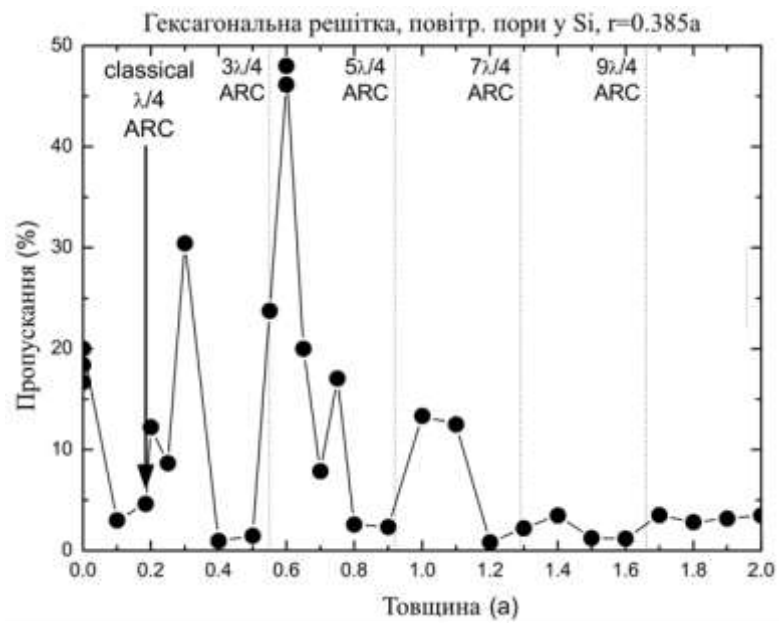
решітки  $a_{\text{Si}}(T)$  кристала Si відповідно. Якщо взяти термооптичний коефіцієнт кремнію  $\delta n_{\text{Si}}(T) \cong 2 \times 10^{-4} \text{ K}^{-1}$  і припустити зміну температури на 100 K, то виявиться, що зонна структура ФК зміщується приблизно на  $0,005a/\lambda$ . І лише за зміни температури близько кількох тисяч Кельвінів зонна структура зміщуватиметься приблизно на  $0,001a/\lambda$ , виходячи з коефіцієнта теплового розширення об'ємного Si. Це показує, що датчик газу на основі ФК досить нечутливий до змін температури, що робить його досить надійною конструкцією.

Чисельне моделювання з використанням методів кінцевих різниць у часовій області (FDTD), а також кінцевих елементів (FEM) показали, що використання описаного вище звуження для мінімізації відбиття на інтерфейсі повітря/ФК не покращує передачу у двовимірному випадку. Це можна зрозуміти, порівнявши профіль моди падаючої плоскої хвилі та моди, призначеної для використання у додатках для вимірювання газу. У той час як плоска хвиля має плоскі фазові фронти без бічних вузлів. Поле  $E$  у ФК має два бічні вузли та викривлений фазовий фронт. Таким чином, для ефективного зв'язку необхідно використовувати щось більше, ніж просте звуження, беручи до уваги тільки ефективний показник заломлення. Можна використовувати спеціальне антивідбивне покриття (ARC) [11], як показано на рис. 1.8. Принцип антивідбивного покриття для покращення узгодження з ФК представлений на рис. 1.8, а. Цей підхід не слід плутати з класичними шарами  $\lambda/4$ , використовуваними для зменшення відбиття від діелектричних меж розділу для певних частот, які в даному випадку відповідають товщині  $775 \text{ нм} \approx 0,185a$  і показані на рис. 1.8, б. Такий класичний шар Si товщиною  $\lambda/4$  перед першим рядом пор ФК, навпаки, знижує пропускання порівняно з чистою межею розділу пори/повітря, що відповідає нульовій товщині покриття. У випадку, розглянутому вище, пропускання для неконусного ФК збільшується приблизно з 18 % до приблизно 47 % при використанні відповідного ARC товщиною  $0,6a$ .

Це покриття не слід плутати з класичним антибліковим покриттям товщиною  $\lambda/4$ .



а)



б)

а) схема розташування антивідбивного покриття;

б) залежність пропускання структури від товщини покриття для  $r/a = 0,385$

і  $\lambda = 10,55$  мкм.

Рисунок 1.8 – Антивідбивне покриття для покращення узгодження з ФК

Те, що це покриття принципово відрізняється від класичного шару  $\lambda/4$ , впливає з того факту, що таке класичне покриття, що просвітлює, буде працювати і для непарних цілих кратних  $\lambda/4$ . Відповідні товщини дуг показані пунктирними вертикальними лініями на рис. 1.8, б. В жодному з цих положень передача не є надзвичайно високою. Розрахунки передачі для інших діапазонів з цікавими  $k$ -точками для виявлення газу показують, що товщину покриття необхідно моделювати для кожного випадку індивідуально. Ще однією перевагою використання антивідбивних покриттів порівняно з неконусним ФК є зменшення розсіювання світла при вході в структуру через плоску поліровану поверхню замість гофрованої порами поверхні.

#### 1.4 Прогнозні припущення щодо розвитку газових сенсорів

Розглянуто нову концепцію компактних газових сенсорів на основі фотонних кристалів. Взаємодія газу та електромагнітного випромінювання відбувається всередині ФК таким чином, що плоска частина повітряної смуги зонної структури спектрально перекривається із частотою поглинання газу. Через низьку групову швидкість світла в плоских смугах, що відповідає когерентній суперпозиції полів, взаємодія просторово посилюється, що дозволяє радикально мінімізувати обсяг взаємодії в порівнянні зі звичайними газовими сенсорами. Завдяки масштабній інваріантності рівнянь Максвелла пристрій на основі фотонних кристалів може бути спроектований для роботи з різними газами шляхом вибору матеріальної системи (відповідно діелектричного розмаїття), симетрії ФК та постійної решітки. Компенсація допусків виготовлення може бути досягнута обертанням зразка. Можна використовувати як 2D, і 3D фотонні кристали.

## 2 МОДЕЛЮВАННЯ ФОТОННО-КРИСТАЛІЧНОГО СЕНСОРА ГАЗІВ

Останні два десятиліття технологія кремнієвої фотоніки зробила кремній ідеальною платформою для фотонної інтеграції. Хоча більшість фотонних пристроїв на основі кремнію були реалізовані в ближньому інфрачервоному (ІЧ) телекомунікаційному діапазоні, середній інфрачервоний діапазон (середній ІЧ), тобто діапазон довжин хвиль від 2 мкм до 20 мкм, надає значні можливості зростання для реалізації пристроїв середнього інфрачервоного діапазону.

Фактично, через молекулярні відбитки багатьох хімічних і біологічних видів в їх газоподібних або рідких формах, що охоплюються середнім ІЧ-діапазоном довжин хвиль, такий діапазон є ідеальним для реалізації фотонних датчиків на основі поглинання. Крім того, такий діапазон довжин хвиль дозволяє здійснювати зондування без міток та пошкоджень і може використовувати як зміни в дійсній, так і уявній частині показника заломлення, щоб забезпечити виявлення третинної суміші. Водночас останні кілька років зростає інтерес до нанопорожнин фотонних кристалів через їх унікальну властивість утримання сильного електромагнітного поля, малий обсяг моди, тривалий час життя фотонів і низькі втрати загасання. Відповідно, для додатків зондування посилений ефект взаємодії призводить до виникнення оптичної моди ФК резонатора з довжиною резонансної хвилі, яка дуже чутлива до локальних змін в навколишньому середовищі. Тому протягом останніх кількох десятиліть різні фотонні датчики, що складаються з ФК нанопорожнин, широко використовуються в сенсорних додатках, включаючи гази, розчини, біомолекули та хімічні сполуки, електричні поля, а також нанотиск і температура.

Крім того, ефективна чутлива площа ФК порожнин становить близько мікрометра або менше, що дозволяє інтегрувати високощільні масиви фотонно-кристалічних датчиків для реалізації програм мультиплексного зондування. З іншого боку, вимірювання концентрації газу завжди відіграло важливу роль у

багатьох промислових, біомедичних та екологічних додатках. Для вимірювання та реалізації високоточних вимірювань газу низької концентрації зі швидким часом аналізу та скороченням витрати реагентів зростає інтерес до розробки високочутливих та мініатюрних оптичних датчиків газу. Серед них ФК нанорезонатори та хвилеводи були розроблені та проаналізовані для вимірювання концентрації газу з різними показниками заломлення або відносним тиском газу. Зокрема, ФК резонатори формуються шляхом модуляції радіусів першого ряду повітряних отворів, прилеглих до хвилеводу, що призводить до чутливості 80 нм/RIU та добротності 380 000. Такі ФК порожнини можуть бути використані для успішної ідентифікації SF<sub>6</sub>, азоту тощо.

Крім того, зміна показника заломлення на  $10^{-4}$  призводила до помітного зсуву резонансу при зміні тиску в атмосфері SF<sub>6</sub> з кроком  $0,5 \times 10^4$  Па. Повітряно-щілинний ФК резонатор був виконаний на основі хвилеводу з повітряною щілиною, вбудованою в область лінійного дефекту. У конструкції решітка ФК була збережена без змін, проте ширина повітряної щілини була локально зменшена на 20 нм для обмеження об'єму порожнини. Для вимірювань гелію, азоту та вуглекислого газу продемонстровано експериментальну чутливість до 510 нм/RIU з межею виявлення понад  $10^{-5}$  RIU. Більш того, було показано, що повільне світло у поєднанні з високою напруженістю електричного поля в широкій щілині з низьким коефіцієнтом заломлення в кремнієвому хвилеводному пристрої з щілинами може бути використане для збільшення довжини шляху оптичного поглинання.

Щоб вибірково виявляти різні види газів за допомогою системи, робоча довжина хвилі повинна бути налаштована так, щоб відповідати одній лінії поглинання газу, що вимірюється [12]. Проста конструкція та висока точність виготовлення запропонованих ФК резонаторів розширили можливості їх застосування при вимірюванні різних газів, таких як азот (N<sub>2</sub>), гелій (He), вуглекислий газ (CO<sub>2</sub>) та повітря.

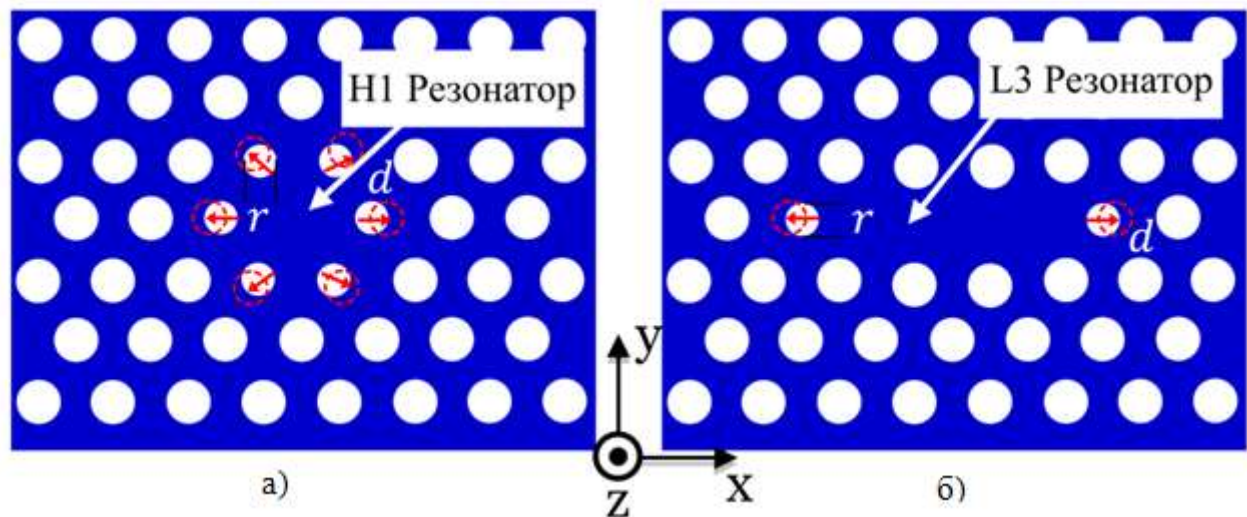
Нещодавно був запропонований високоефективний датчик газу, що працює в середньому інфрачервоному діапазоні довжин хвиль. Спектр пропускання та чутливість запропонованого датчика показали, що зміна показника заломлення газу на  $10^{-4}$  призвела до зсуву верхнього краю смуги довжини хвилі на 540 пм, що відповідає чутливості 1720 нм/RIU. У іншому дослідженні розробили газовий спектрометр, що складається з мікротрубки. Завдяки ефектам повільного світла, запропонована структура міліметрового форм-фактора мінімізує необхідну довжину шляху поглинання. У конструкції пристрою посилене поглинання світла збільшило чутливість газу, а повільне світло збільшило поглинання газу в 5,8 рази при довжині хвилі 5400 нм.

## 2.1 Проектування та моделювання фотонно-кристалічної нанопорожнини

Добре відомо, що періодичність діелектричної функції фотонного кристала порушується при внесенні дефектів його періодичну структуру решітки. Це робить ці структури здатними спрямовувати та обмежувати світло у масштабі кількох оптичних довжин хвиль. Зокрема, при введенні певних точкових дефектів у впорядковано розташовані ґрати ФК може утворитися нанопорожнина, оточена відбиваючими розподіленими межами. Фактично, новий простір, створений у центрі ґрат ФК, підтримує оптичну моду, частота якої знаходиться всередині фотонної забороненої зони (ФЗЗ). Таким чином, протягом тривалого числа циклів коливань поля світло може бути «захоплене» там, що забезпечує сильне часове та просторове обмеження світла та потенційно тривалий час життя фотонів (а саме фактор добротності) у так званому ФК резонаторі.

Як показано на рис. 2.1, точково-дефектні плоскі фотонно-кристалічні резонатори можна розділити на два типи: резонатор Н1, утворений видаленням одного вузла в центрі ґрат ФК) і резонатор L3, що утворюється шляхом видалення трьох сусідніх точок решітки). Щоб максимально зменшити витікаючі компоненти, відповідальні за втрати випромінювання, і тим самим

посилити оптичне обмеження всередині діелектричного резонатора, що формується, шість повітряних отворів, найближчих до області дефекту Н1, і отвори на краях нанопорожнини L3 були зсунуті на відстань  $d$ . Такий зсув дозволяє отримати більш плавний перехід між дефектом і ФК і, таким чином, може призвести до вищих значень добротності та менших модових обсягів.



а) порожнина Н1; б) порожнина L3.

Рисунок 2.1 – Схематичні структури двох нанопорожнин фотонного кристала з точковими дефектами

Досліджувані структури зазвичай виготовляються методом повітряного містка кремнієвого ФК з використанням кремнієвої мембрани завтовшки 500 нм. ФК нанопорожнини з трикутними решітками повітряних отворів можуть бути виготовлені з використанням електронно-променевої літографії та хімічного травлення іонним променем), і тому звичайно розглядаються реалістичні значення геометричних розмірів цих структур.

Щоб розрахувати добротність і модові обсяги фундаментальних мод ТЕ-нанорезонаторів, треба змоделювати ФК нанопорожнини у вигляді кремнієвої мембрани товщиною 500 нм ( $n = 3,42$ ) і використовувати тривимірний алгоритм кінцевих різниць у часовій області (3D-FDTD) з використанням модифікованої версії вільно доступного програмного пакета MEEP із субпіксельним

згладжуванням для підвищення точності [13]. Щоб забезпечити добре обмежений режим, використовувалася структура періодів решітки  $17 \times 17$ , а розрахункова область була обмежена ідеально узгодженими шарами (PML) зверху та з обох боків нанопорожнини, оточеної повітрям. Ці умови PML використовувалися в розрахунках для забезпечення відсутності зворотного відбиття в межах області, що аналізується, але використовувалися симетричні граничні умови в напрямках  $x$  і  $y$ , щоб скоротити час обчислень.

Нанопорожнини освітлювалися Гаусовою хвилею при нормальному падінні з поперечною електричною (TE) поляризованою модою. Поле джерела розташовувалося у середині нанорезонатора у положенні симетрії для полегшення розрахунку добротності та обсягу моди. Щоб отримати резонансну частоту і добротність резонатора, що моделюються, використовувалася функція «harminv», доступна в MEEP, яка використовує метод діагоналізації для вилучення закономірностей загасання в даних часових рядів. Метою розробки було створення ФК із точковими дефектами. Фактично це нанорезонатори з довжиною резонансної хвилі, близької до 3700 нм. Тому застосовувалося магнітне дипольне джерело, що працює в діапазоні від 3000 нм до 4000 нм.

## 2.2 Оптимізація фотонно-кристалічної нанопорожнини

З метою оптимізації співвідношення добротності до модового обсягу  $Q/V$  пропонованого ФК з точковими дефектами нанопорожнин, за рахунок зменшення небажаного відбиття через невідповідність та мінімізації втрат поширення необхідно зробити геометричну оптимізацію цих нанопорожнин. Геометрія нанопорожнин з точковими дефектами, досліджених у цій роботі, була модифікована за рахунок зменшення радіусу повітряних отворів, найближчих до області дефекту, а потім було введено бічний зсув повітряних отворів, прилеглих до нанопорожнини (рис. 2.1).

На рис. 2.2 показаний графік відношення  $Q/V$  та резонансної довжини хвилі ( $\lambda_c$ ) залежно від  $d$  для всіх нанопорожнин із точковими дефектами. Як

видно з рисунка, відношення  $Q/V$  збільшується зі збільшенням  $d$  спочатку через посилення оптичного обмеження профілем електричного поля, що досягає максимуму, а потім зменшується, коли  $d$  перевищує оптимальне значення. З іншого боку, коли повітряні отвори зміщуються дуже сильно, електричне поле проникає далеко за межі зміщених отворів. В результаті оптичне обмеження повільно заповнює простір навколо дірок, а розподіл електричного поля поза дірками різко згасає.

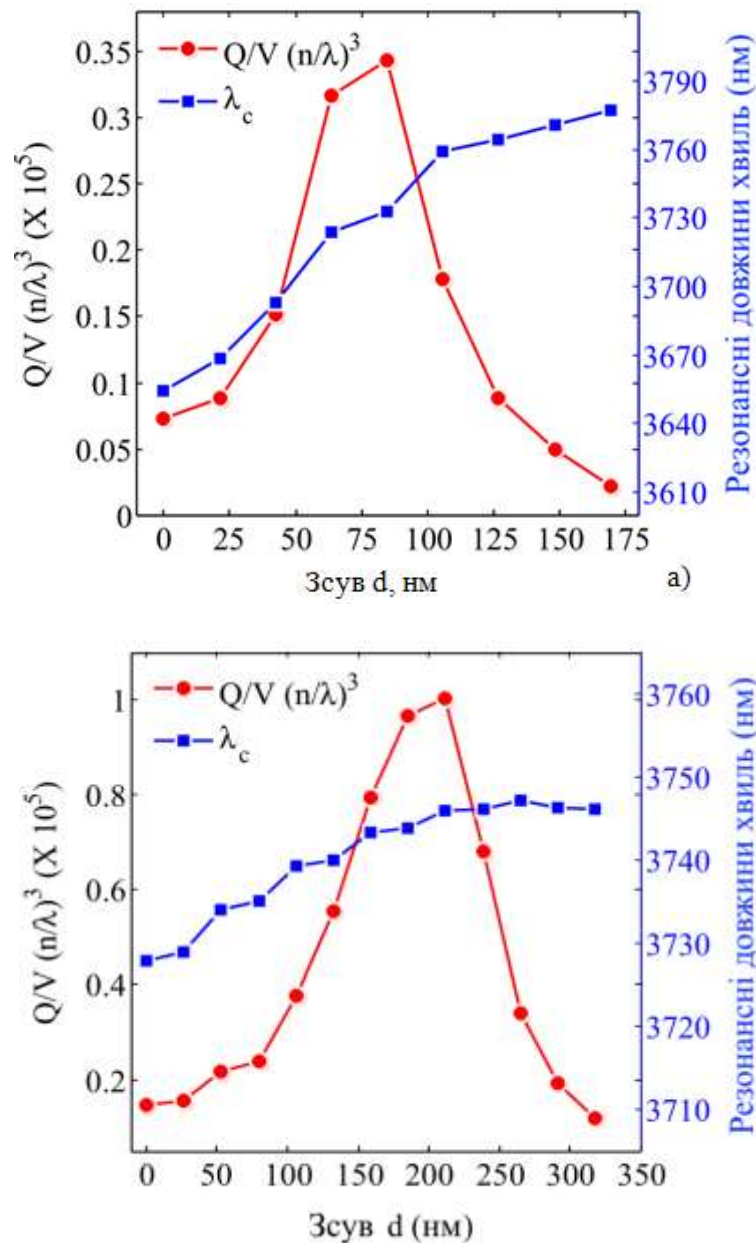


Рисунок 2.2 – Еволюція відношення  $Q/V$  та резонансної довжини хвилі спроектованого ФК з точковим дефектом як функція зсуву  $d$  для зменшених радіусів отворів  $r = 212$  нм: а) ФК резонатор Н1; б) ФК резонатор L3

З рис. 2.2 можна зробити висновок, що при зміні зміщення  $d$  ФК порожнини Н1 на величину всього  $\Delta d = 10$  нм, цього достатньо, щоб отримати великий приріст відношення  $Q/V$ . Для таких типів нанопорожнин кращий результат був отриманий при зміщенні на 85 нм, що призвело до значення  $Q/V = 3,4 \times 10^4$  резонансної довжини хвилі  $\lambda_c = 3730$  нм.

Більше того, представлений рисунок також підтверджує, що ФК нанопорожнини L3 можуть мати високі значення  $Q/V$  (тут близько  $10^5$  для зміщення 212 нм на довжині резонансної хвилі  $\lambda_c = 3740$  нм). Крім того, ми спостерігаємо, що збільшення зсуву  $d$  призводить до червоного зміщення резонансної довжини хвилі  $\lambda_c$ , що передбачає масштабування різних конструкцій для роботи на різних довжинах хвиль середнього інфрачервоного діапазону. Звідси витікає, що моди пропонованого точкового дефекту ФК нанопорожнини з сильними електричними полями в області зміщених отворів сильно зміщені в червону область, тоді як нанопорожнини з мінімальними полями в цій області практично не впливають на зсув кінця отвору. Таким чином пояснюється переупорядкування мод між зсувами  $d = 0$  і  $d = 0,15a$  з погляду перекриття поля кінцевого отвору.

В результаті цей процес проектування, заснований на моделюванні 3D-FDTD, важливий, оскільки починається з оцінки оптимальних значень зсуву  $d/a$ , які дозволяють наблизитись до бажаного значення резонансної довжини хвилі з досить високим значенням  $Q/V$ . Тому зазначені вище геометричні параметри обрані для розробки датчика газу на основі точкового дефекту ФК нанопорожнини.

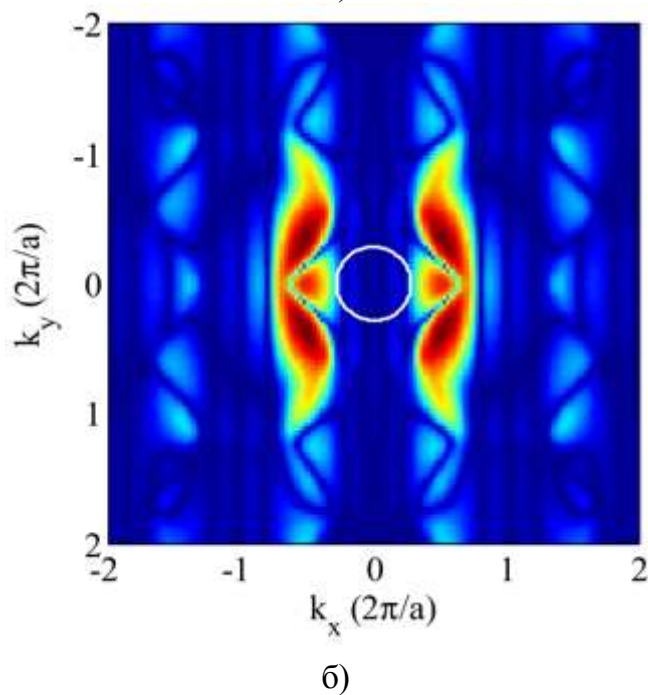
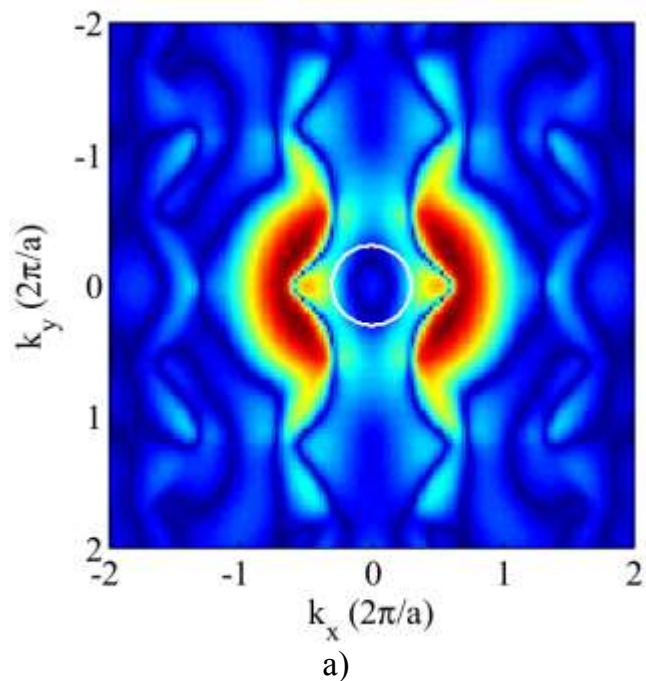
Як згадувалося раніше, бічний зсув повітряних отворів є важливим параметром ФК нанопорожнин з точковими дефектами, які можна використовувати для налаштування умов утримання мод. У випадку ФК нанопорожнин Н1 цей зсув  $d$  можна оптимізувати, оскільки він створює простір для обмеження світла. З іншого боку, в ФК нанопорожнині L3 зсув  $d$  визначає обгинальну функцію утримуючого поля в порожнині без значного зсуву резонансних довжин хвиль. Іншими словами, коли виконується перетворення

Фур'є електричного поля, просторова зміна перерозподіляє компоненти поля у просторі імпульсів ( $k$ -просторі) так, що відповідна кількість світла відбивається всередині світлового конуса ( $k < 2\pi / \lambda$ ), що в іншому випадку могло б призвести до втрат позаплощинного випромінювання. Це збільшує час життя фотонів усередині порожнини.

Таким чином, для подальшого дослідження ідеального методу утримання світла в розробленому точковому дефекті ФК моди нанорезонаторів з оптимальним зміщенням  $d$  одиночних повітряних отворів, модальні розподіли  $E_y$ -компоненти основної моди проектованого ФК нанорезонатора можна аналізувати за допомогою просторового перетворення Фур'є, як показано на рис. 2.3. Як видно з цього рисунка, компонент електричного поля  $E_y$  має непарну симетрію в напрямку  $x$ , що призводить до незначної частини її компоненти  $K$ -вектора всередині світлового конуса випромінювання. Таким чином, просторові компоненти полів при  $K_x = 0$  сильно пригнічуються. Крім того, як показано білими кружками, витікаючі компоненти всередині світлового конуса зменшуються при оптимальних значеннях зсуву  $d$  і при найвищих значеннях добротності  $Q$ . Це вказує на те, що підвищена добротність під час процесу оптимізації є результатом не тільки більше гладкого профілю поля, а й більш делокалізованого поля.

### 2.3 Характеристики виявлення газу оптимізованою нанопорожниною

Що стосується сенсорних додатків, невелика зміна локального показника заломлення газів усередині ФК нанорезонатора призводить до невеликого зсуву резонансної довжини хвилі моди нанорезонатора, який пропорційний концентрації досліджуваного газу. Це може дозволити використовувати оптимізовані ФК нанорезонатори на основі точкових дефектів для високочутливого газового зондування.



а) ФК нанопорожнина Н1; б) ФК нанопорожнина L3.

Рисунок 2.3 – Фур'є-простір розподілу поля  $E_y$  для ФК нанопорожнини з оптимальним зсувом  $d$  одиночних повітряних отворів

Справді, спектральне положення  $\lambda_c$  резонансної довжини хвилі моди ФК нанопорожнини служать еталоном, а міра резонансного зсуву довжини хвилі

$\Delta\lambda$  є тоді мірою зміни показника заломлення  $\Delta n$  через зміни навколишнього середовища. Зсув резонансної частоти можна оцінити на основі теорії електромагнітних збурень для малих збурень діелектричної функції  $\Delta\varepsilon$ , використовуючи таке співвідношення:

$$\Delta\omega = \frac{-\omega \iiint \Delta\varepsilon(\mathbf{r}) |\mathbf{E}(\mathbf{r})|^2 d^3(\mathbf{r})}{2 \iiint \varepsilon(\mathbf{r}) |\mathbf{E}(\mathbf{r})|^2 d^3(\mathbf{r})}, \quad (2.1)$$

де  $\mathbf{E}(\mathbf{r})$  – електричне поле незбуреної резонансної моди нанорезонатора.

Ця теорія показує, що зміна резонансної частоти моди нанорезонатора лінійно залежить як від зміни показника заломлення, так і від частки енергії електричного поля, де показник заломлення збурюється. Тому будь-яке збільшення показника заломлення середовища ФК нанорезонатора призводить до збільшення довжини резонансної хвилі мод.

Оцінка чутливості оптимізованого ФК нанорезонатора на основі точкового дефекту може бути виконана шляхом вимірювання зсуву резонансної довжини хвилі залежно від зміни показника заломлення, індукованого середовищем фотонно-кристалічних нанопорожнин. Для кількісного розуміння реакції оптимізованих нанорезонаторів на невеликі зміни показника заломлення навколишнього середовища компоненти електричного поля ( $E_x$ ,  $E_y$  і  $E_z$ ) були розраховані з використанням методу FDTD, а теорія збурень використовувалася для розрахунку малих зсувів довжин хвиль для різних показників заломлення навколишнього газу.

На рис. 2.4 показано зміну резонансного зсуву довжини хвилі мод нанорезонаторів всіх оптимізованих ФК нанопорожнин з точковими дефектами залежно від показника заломлення аналізованих газів. Зсув довжини хвилі розраховувався у присутності вакууму та різних газових середовищ (He, N<sub>2</sub>, CO<sub>2</sub>, C<sub>2</sub>H<sub>2</sub> і C<sub>3</sub>H<sub>8</sub>) під тиском 1 бар. Як видно з рисунку, резонансний зсув

довжини хвилі дійсно лінійно збільшується при невеликих змінах показника заломлення газів ( $n_{\text{Газ}}$ ).

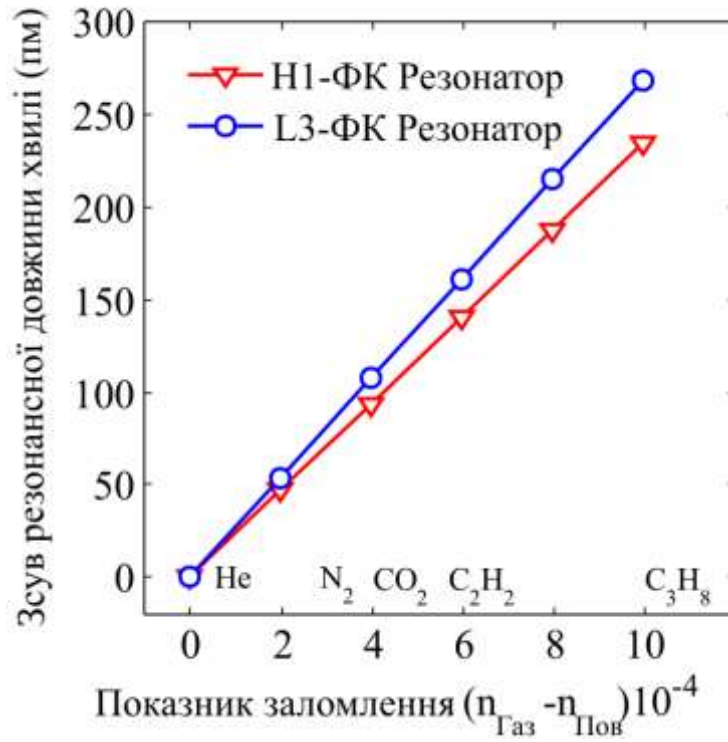


Рисунок 2.4 – Зміна зсуву резонансної довжини хвилі різних мод точкових дефектів ФК резонаторів, залежно від показників заломлення газу

Модифікація показника заломлення навколишнього газу передбачає зміну розмаїття показників між напівпровідником та повітряними отворами. Це впливає на ефективний індекс фотонного кристала та його заборонену зону. Ці два ефекти призводять до зсуву резонансної довжини хвилі мод нанорезонатора в тому самому напрямку. Тобто резонансна довжина хвилі нанопорожнин зміщується в червоний бік при зміні показника заломлення газу від 1,000 до 1,001 і синю в протилежному випадку, а саме у разі зменшення показника заломлення газу.

Зі збільшенням показника заломлення газу резонансна довжина хвилі ФК нанопорожнин на основі точкового дефекту збільшується лінійно. Справді, для показника заломлення газу  $n_{\text{Газ}} = 1,001$  (C<sub>3</sub>H<sub>8</sub>) зміна показника заломлення газу

навколишнього середовища викликає зсув довжини хвилі мод ФК нанорезонаторів Н1 так само мало порівняно з тим, що виходить у разі нанорезонаторів L3. ФК нанопорожнини Н1 і L3 викликають зсув довжин хвиль резонансу порожнини на 234 та 269 пм відповідно. Як правило, гази все ж таки виявляються обома типами порожнин, оскільки їх добротність досить велика ( $\gg 10^5$ ).

Використовуючи зсуви резонансних довжин хвиль, оцінені за допомогою теорії збурень, ефективність оптимізованого ФК нанорезонатора з точковими дефектами оцінювалась кількісно шляхом розрахунку чутливості  $S = \Delta\lambda / \Delta n$  (вираженої в нм/RIU). Це визначення було вибрано для характеристики оптимізованих нанопорожнин. З більш кількісного погляду, рис. 2.5, отриманий у разі присутності різних газів, показує, що краща чутливість може бути отримана із застосуванням оптимізованої нанопорожнини L3.

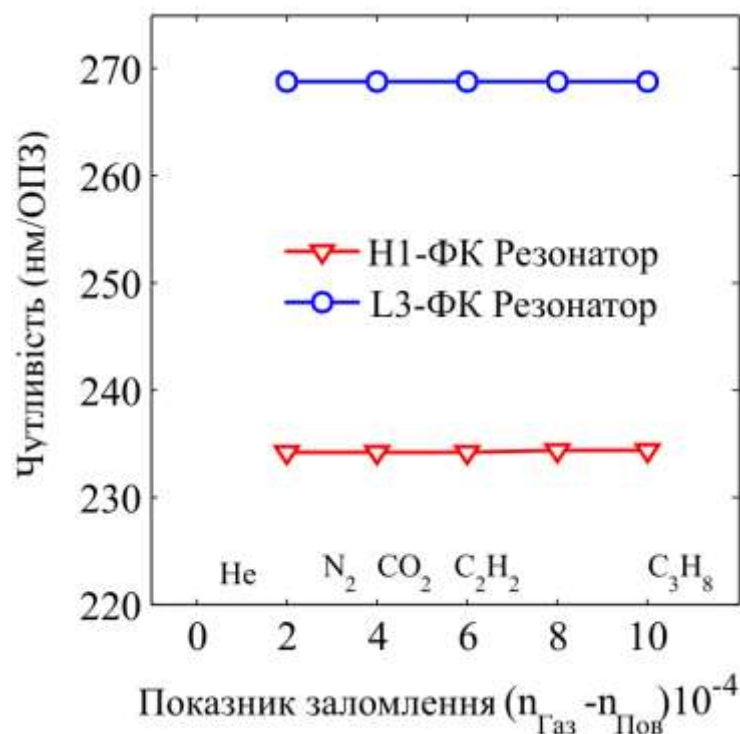


Рисунок 2.5 – Зміна чутливості ФК резонаторів із точковими дефектами залежно від показників заломлення газу

Наприклад, у разі вимірювання газу ( $C_3H_8$ ) чутливість оптимізованих нанопорожнин сумована в табл. 2.1. ФК нанопорожнини L3 дають більш високі характеристики порівняно з іншими оптимізованими нанопорожнинами з точковими дефектами. Однак значення чутливості оптимізованих нанопорожнин залишаються низькими в порівнянні з тими, що отримані з повітряною щілиною, введеною в центр дефекту.

Таблиця 2.1 – Оптимальні значення відношення  $Q/V$ , чутливості  $S$ , межі виявлення  $DL$  та резонансної довжини хвилі  $\lambda_c$  для оптимізованого ФК нанорезонатора на основі точкового дефекту

|                 | $Q/V$              | $S, (nm/RIU)$ | $DL(RIU)$             | $\lambda_c, nm$ |
|-----------------|--------------------|---------------|-----------------------|-----------------|
| H1 ФК резонатор | $1,26 \times 10^4$ | 234           | $8,84 \times 10^{-4}$ | 3730            |
| L3 ФК резонатор | $10^5$             | 268           | $1,50 \times 10^{-4}$ | 3740            |

Цей результат обумовлений конфігурацією досліджених щілинних нанопорожнин, де світло утримується в щілині. Однак для цих типів нанопорожнин обсяг моди менший, ніж для випадку L3, через утримання моди в повітрі, і тому обидві ситуації не можна порівнювати безпосередньо. Електричне поле обмеженої моди дійсно залишається значною мірою локалізованим у щілині. Однак добротність слотованого ФК нанорезонатора L3 зазвичай залишається низькою ( $Q \sim 3 \times 10^3$ ) навіть за умови оптимізації зміщення отворів. Це також свідчить про наявність великої кількості компонентів поля у світловому конусі. Низькі значення добротності щілинних ФК нанорезонаторів можна пояснити різкими краями щілини біля отворів. Тому невисока чутливість оптимізованих ФК нанопорожнин на основі точкового дефекту обумовлюється тим, що світло добре утримується в дефекті. Таким чином, електричне поле локалізується в кремнії.

Інший спосіб оцінки ефективності оптимізованих порожнин як газосенсорних пристроїв може бути виконаний шляхом розрахунку межі виявлення ( $DL$ ), що визначається за формулою:  $DL = \lambda_c / SQ$  (виражено в RIU).

Цей параметр залежить як від чутливості, довжини резонансної хвилі моди нанорезонатора, так і від її добротності. Якщо добротність та чутливість проєктованого ФК нанорезонатора збільшуються, межа виявлення сенсора збільшується. Крім чутливості, вона несе інформацію про тонкість піку резонансу та змінюється лінійно з добротністю. Так, висока добротність покращує роздільну здатність резонансної довжини хвилі і тим самим покращує характеристики оптичних датчиків. У таблиці 2.1 наведено оптимальні значення відношення  $Q/V$ , чутливості  $S$ , межі виявлення  $DL$  і резонансної довжини хвилі  $\lambda_c$  для всіх оптимізованих ФК нанопорожнин з точковими дефектами. Значення цих параметрів були отримані в присутності газу ( $C_3H_8$ ). Можна помітити, що межа виявлення ( $DL$ ) оптимізованого ФК нанорезонатора на основі точкового дефекту близько  $10^{-4}$ . Це викликає нижчу чутливість, яка компенсується високою добротністю.

Розподіл густини електричної енергії  $\varepsilon|E|^2$  оптимізованих ФК нанопорожнин представлена на рис. 2.6 де показаний розрахований профіль розподілу щільності електричної енергії для всіх ФК нанопорожнин, занурених в газоподібний ацетилен. Результати показують, що є очевидна різниця у розподілі  $\varepsilon|E|^2$  між розглянутими оптимізованими ФК нанопорожнинками. Для цих структур розподіл густини електричної енергії вказує на те, що значна частина енергії обмеженої моди локалізована в центрі дефекту (області кремнію), що є унікальною властивістю точкового дефекту ФК нанопорожнини. Однак невелика частина густини енергії локалізована всередині повітряних отворів, що оточують дефект. Варто відзначити, що невеликий зсув резонансної довжини хвилі моди нанорезонатора відбувається навіть за невеликих змін, викликаних глибиною проникнення поля, що означає набагато меншу чутливість. Незважаючи на це, така концентрація поля в області з більш високим показником заломлення може бути корисною, оскільки забезпечує хороше утримання світла в дефекті кремнію для таких пристроїв, як датчики температури.

Крім того, відношення добротності до модового обсягу ( $Q/V$ ) ФК нанопорожнини, що оптимізується, були проаналізовані при зануренні в різні

газові середовища. Завдяки невеликим змінам показника заломлення газу було розраховано відповідні значення  $Q/V$  основної моди, яке показано на рис. 2.6. Як зазначено вище, коли показник заломлення газу залишається незмінним ( $n = n_0 = 1,00$ ),  $Q/V$  оптимізованих нанорезонаторів досягає значень  $10^4$  і  $10^5$  для Н1 і L3 ФК нанорезонаторів відповідно. Однак, як видно із рис. 2.7, навіть незважаючи на зміну показника заломлення газу від 1,000 до 1,001, відношення  $Q/V$  залишається постійним на високому рівні вище  $10^4$  і  $10^5$  для ФК нанорезонаторів Н1 і L3 відповідно, що вказує на те, що обмеження світла в пропонуваніх нанопорожнинах дуже високе.

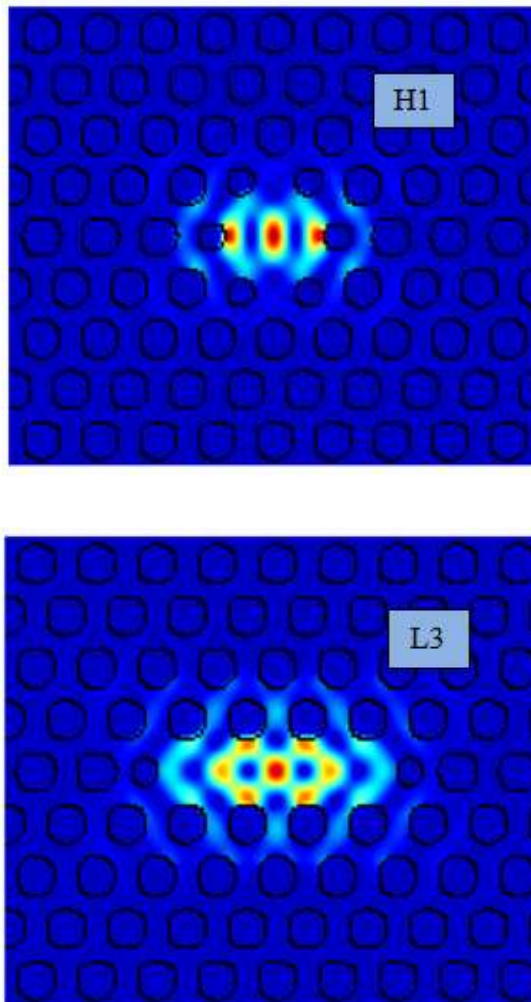


Рисунок 2.6 – Розподіл густини електричної енергії  $\varepsilon|E|^2$  для фотонно-кристалічних нанорезонаторів з точковими дефектами, занурених у газ  $C_3H_8$ , показаний в площині x-y при оптимальному зміщенні

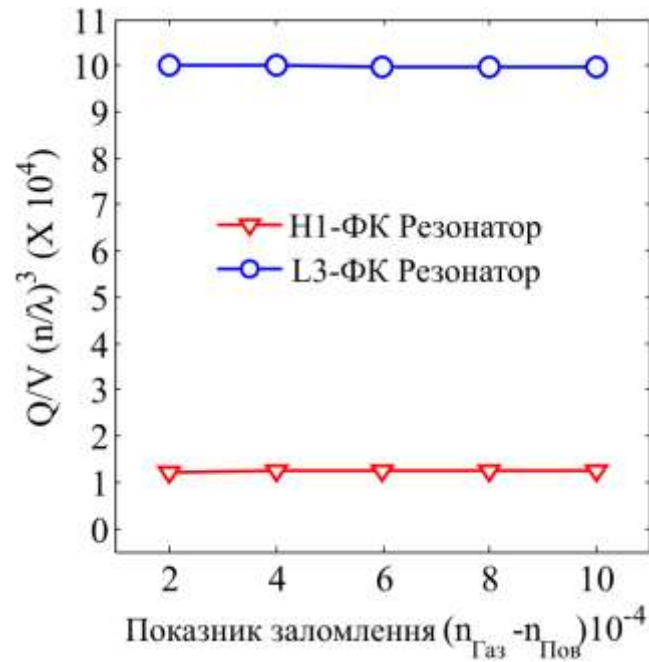


Рисунок 2.7 – Зміна відношення  $Q/V$  для ФК нанорезонаторів з оптимізованими точковими дефектами з фоновим показником заломлення

Оптимізований сенсор газу на основі ФК нанорезонатора розглянутий для випадків з високим  $Q/V$ , а для ідентифікації газів використовувалися невеликі зміни показника заломлення в діапазоні  $10^{-4}$ . В результаті цього дослідження було виявлено, що для ФК нанорезонаторів L3 чутливість становила близько 270 нм/RIU з дуже високим співвідношенням  $Q/V$ , рівним  $10^4$ . Однак ФК резонатор N1 мав чутливість близько 234 нм/RIU,  $Q/V$  могло досягати  $10^4$ . Зауважимо, що два точкових дефекти ФК нанопорожнин були обрані як оптимальна конструкція, оскільки для газових сенсорів співвідношення  $Q/V$  має вирішальне значення для досягнення високої чутливості сенсорних пристроїв. Попередні дослідження показали, що оптимізовані ФК нанорезонатори  $L_n$  з прорізами мають надзвичайно високу чутливість, а також дуже сильну локалізацію світла в щілині, у той час як чутливість покращеного газового сенсора вища, ніж більшість опублікованих результатів для інших ФК нанорезонаторних датчиків. Крім того, для газоподібного ацетилену було досягнуто роздільну здатність вимірювання 1 ppm з хорошою температурною

стабільністю. Важливо відзначити, що чутливість досліджувалась шляхом зміни положення найближчих до дефекту повітряних отворів у напрямку, поперечному розповсюдженню світла. Для датчиків з нанорезонаторами чисельні розрахунки показали, що зміна положення цих отворів призводить до високого співвідношення  $Q/V$ . Таким чином, у поєднанні з відповідною робочою довжиною хвилі близько 3700 нм досліджені конфігурації ФК нанорезонаторів з точковими дефектами з високим співвідношенням  $Q/V$  можуть функціонувати як високочутливі надкомпактні датчики, що використовуються для визначення слідів газу.

Отже, розглянута ефективна фотонно-кристалічна нанорезонаторна платформа з точковими дефектами для застосування в області сенсорики газу на основі показника заломлення для довжин хвиль близько 3,7 мкм. Результати показують, що співвідношення  $Q/V$  точкового дефекту ФК нанопорожнини можуть бути значно покращені шляхом ретельного настроювання кількох навколишніх структурних параметрів поблизу дефекту, тобто шляхом налаштування точного положення набору з двох зменшених повітряних отворів, прилеглих до дефекту, їх зсуву уздовж осі резонатора. Нанорезонатор з одним і трьома відсутніми отворами має просту конструкцію і дозволяє отримувати високі значення  $Q/V$ , що перевищують  $10^4$  і  $10^5$  для Н1 і L3 ФК нанопорожнин відповідно.

Досліджено резонансний зсув довжини хвилі, чутливість і характеристики межі виявлення оптимізованих ФК нанопорожнин. Результати проведеного моделювання показують, що оптимізований газовий сенсор має високу чутливість до невеликої зміни показника заломлення порядку  $10^{-4}$  а також продемонстрована висока чутливість 270 нм/RIU з межею виявлення  $10^{-4}$  RIU. Враховуючи переваги резонаторів з високим співвідношенням  $Q/V$ , високу чутливість, високу межу виявлення та невелику зону чутливості, ми вважаємо, що оптимізовані ФК нанорезонатори можуть бути підходящою та корисною платформою для вбудованих в кристал масивів сенсорів газу.

## ВИСНОВКИ

Проведено аналітичний огляд науково-технічної літератури з питань розроблення та дослідження фотонно-кристалічних сенсорних пристроїв для визначення параметрів газів та газових сумішей. Розглянуто можливі конфігурації сенсорів газу, їх конструкції, основні експлуатаційні характеристики.

Розглянуто конфігурацію сенсора газів на основі двовимірного фотонного кристалу з точковими дефектами періодичності, що формують високодобротні резонатори. Такі конфігурації забезпечують реалізацію резонансів так званих дефектних мод, що необхідно для розроблення сенсорів з високою чутливістю, яка необхідна для детектування газів.

Створено розрахунковий проект на основі методу скінченних різниць в часовій області, який застосовано для розрахунку експлуатаційних характеристик сенсорних пристроїв на основі фотонно-кристалічних резонаторів.

Отримані результати дозволяють розробляти оптимізовані конфігурації фотонно-кристалічних резонаторів для застосування у високочутливих сенсорах газу.

**ПЕРЕЛІК ДЖЕРЕЛ ПОСИЛАННЯ**

1. John S. Strong localization of photons in certain disordered dielectric superlattices. // *Physical Review Letters*. 1987. Vol. 58, No 23. P. 2486–2489.
2. Yablonovitch E. Inhibited spontaneous emission in solid-state physics and electronics. // *Physical Review Letters*. 1987. Vol. 58, No 20. P. 2059–2062.
3. Lin S.Y., Fleming J. G., Chow E., Bur J. et al. Enhancement and suppression of thermal emission by a three-dimensional photonic crystal // *Phys. Rev.* 2000. Vol. 62. P. R2243–2246.
4. Fleming J.G., Lin S.Y., Biswas R., Ho K.M. All-metallic three-dimensional photonic crystals with a large infrared bandgap // *Nature*. 2002. Vol. 417, Art. 6884. P. 52–55.
5. Pralle M., Moelders N., McNeal M., Puscasu I. et al. Photonic crystal enhanced narrow-band infrared emitters // *Appl. Phys. Lett.* 2004. Vol. 81, No 25. P. 4685–4687.
6. Notomi M., Yamada K., Shinya A. et al. Extremely large group-velocity dispersion of line-defect waveguides in photonic crystal slabs // *Phys. Rev. Lett.* 2001. Vol. 87, No 25. P. 253902.
7. Asano T., Kiyota K., Kumamoto D. et al. Time-domain measurement of picosecond light-pulse propagation in a two-dimensional photonic crystal-slab waveguide // *Appl. Phys. Lett.* 2004, Vol. 84, No 23. P. 4690–4691.
8. Johnson S., Joannopoulos J. Block-iterative frequency-domain methods for maxwell's equations in a planewave basis // *Opt. Express*. 2001. Vol. 8, No 3. P. 173–190.
9. Schilling J., Müller F., Matthias S., Wehrspohn R.B. et al. Three-dimensional photonic crystals based on macroporous silicon with modulated pore diameter // *Applied Physics Letters*. 2001. Vol. 78, No 9. P. 1180–1183.
10. Witzens J., Hochberg M., Baehr-Jones T., Scherer A. Mode matching interface for efficient coupling of light into planar photonic crystals // *Phys. Rev.* 2004. Vol. 69. P. 046609.

11. Rhein A.V., Geppert T., Pergande D., Wehrspohn R.B. Efficient mode coupling for 2d photonic crystals using a modified anti-reflection coating. 2004.
12. Shmat'ko A.A., Odarenko E.N., Vertiy A.A. Sensor-Polarimeter Based on Anisotropic Photonic Crystal for Solids and Liquids // 2020 IEEE Ukrainian Microwave Week Kharkiv, Ukraine, September 21 – 25. P. 897–901.
13. Shmat'ko A.A., Kazanko A.V., Mizernik\_V.N., Odarenko E.N. Surface Plasmon Polariton Resonances of Diffraction Metamaterial Grating: 9th International Conference on Ultrawideband and Ultrashort Impulse Signals. 2018. September 4–7. Odessa. Ukraine. P. 190–193.
14. Методичні рекомендації та вимоги щодо оформлення пояснювальної записки атестаційної роботи магістрантів денної форми навчання спеціальності 152 «Метрологія та інформаційно-вимірвальна техніка» спеціалізацій «Лазерна і оптоелектронна техніка» та «Фотоніка та оптоінформатика» / Упоряд.: Гнатенко О.С, Крючков А.І., Чернишова Н.М. Харків: ХНУРЕ, 2017. 48 с.