15

Численное моделирование зависимости постоянной распространения оптического излучения в интегрально-оптическом волноводе, нагруженном тонкой пленкой Pd, от концентрации водорода в атмосфере

© И.В. Кузнецов[1], А.С. Перин[1,2]

[1] Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники, Томск, Россия
[2] Институт оптики атмосферы им. В.Е. Зуева Сибирского отделения Российской академии наук, Томск, Россия

e-mail: igor.v.kuznetsov@tusur.ru

Поступила в редакцию 15.05.2025 г.
В окончательной редакции 02.10.2025 г.
Принята к публикации 24.10.2025 г.

Рассмотрена возможность детектирования водорода с помощью волноводных структур на основе SiN с нанесенной тонкой пленкой Pd на поверхность оболочки. Зависимости постоянной распространения и коэффициента передачи оптической мощности от геометрических параметров конфигурации и концентрации водорода исследованы методами численного моделирования.

Ключевые слова: нитрид кремния, водород, фотонный сенсор.

DOI: 10.61011/OS.2025.11.62164.8052-25

Водород — один из важных реагентов химической промышленности. Газ H_2 используется в качестве восстановителя в производстве аммиака и соляной кислоты. Поскольку при сгорании H_2 образуется только водяной пар, водород в последние годы рассматривается в качестве экологически чистого топлива для автомобильной и космической промышленности [1].

H_2 — газ, не имеющий цвета и запаха, что значительно усложняет обнаружение его утечек. Вместе с тем H_2 является взрывоопасным в диапазоне концентраций от 18% до 59% в смеси с воздухом, диапазон воспламеняемых концентраций составляет от 4% до 75%, H_2 также обладает низкой энергией воспламенения ($20\,\mu$J) и высокой теплотой сгорания (285.8 kJ/mol) [2,3].

Сегодня задача детектирования водорода решается с помощью электрических датчиков, среди которых можно выделить следующие классы: электрохимические, металоксидные, каталитические и датчики, основанные на детектировании изменения теплопроводности [3]. Общие недостатки перечисленных классов датчиков следуют из того, что они используют электрические сигналы, что делает эти датчики потенциально уязвимыми для электромагнитных помех и создает угрозу искрообразования [1].

Альтернативой электрическим датчикам водорода являются оптические, которые используют безопасные и помехозащищенные сигналы. В настоящее время известны оптические датчики водорода на основе оптического волокна (ОВ) [2–5]. Недостатком датчиков на ОВ являются необходимость сложной технологической обработки ОВ (в том числе травление и нанесение нанослоев металлов и диэлектриков) для формирования датчиков и ограничения проектирования, связанные со стандартизацией геометрических размеров ОВ. Применение фотонных интегральных схем (ФИС) в качестве чувствительных элементов представляется более простой задачей, поскольку современная фотоника имеет в своем распоряжении множество технологически отработанных платформ, пригодных для этой задачи.

Стандартная схема химического (или биологического) оптического сенсора представляет из себя интерферометр Маха–Цендера (ИМЦ), в котором одно из плеч лишено оболочки [6]. Для детектирования газов такая схема не пригодна, поскольку она не будет обладать селективностью к определенному виду газа. В качестве прототипа рассмотрим устройство на основе ОВ, на оболочку которого нанесена тонкая пленка Pd, за счет которой под воздействием водорода изменяется брэгговская длина волны решетки, сформированной внутри оптического волокна. Для регистрации изменения брэгговской длины волны в этой конфигурации используется анализатор оптического спектра. Переход от оптического волокна к тонкопленочным волноводным структурам позволит использовать конфигурации чувствительного элемента, для которых детектирование возможно будет проводить на фиксированной длине волны, что позволит упростить и удешевить сенсорную систему. Возможность такого детектирования основана на том, что если интегральный оптический волновод будет нагружен тонкой пленкой Pd, то от оптических характеристик пленки Pd будет зависеть величина постоянной распространения оптического излучения в

Обозначение	Параметр	Величина
h_{sub}	Высота подложки	$2.5\,\mu$m
w_{clad}	Ширина оболочки	$5\,\mu$m
h_{core}	Высота сердцевины волновода	160 nm
w_{core}	Ширина сердцевины волновода	$1.4\,\mu$m
g	Расстояние между сердцевиной и поверхностью оболочки	$1\,\mu$m
h_{metal}	Высота полоски Pd	50 nm
w_{metal}	Ширина полоски Pd	$1.4\,\mu$m
–	Длина волновода	$5\,\mu$m
λ	Длина волны оптического излучения	$1.55\,\mu$m

волноводе. Если это изменение изолированно происходит, например, в одном из плеч интерферометра Маха–Цендера или направленного ответвителя, то оно приведет к изменению мощности оптического излучения на выходе оптического элемента. По величине изменения оптической мощности возможно будет установить величину концентрации водорода, воздействующую на тонкую пленку Pd.

Таким образом, целью настоящей работы является численное моделирование зависимости постоянной распространения оптического излучения в интегрально-оптическом волноводе, нагруженном тонкой пленкой Pd, от концентрации водорода в атмосфере.

Рассмотрим интегрально-оптический волновод, в котором поверх оболочки наносится тонкая пленка Pd, физические свойства которой изменяются под воздействием H_2.

В настоящей работе будут рассматриваться волноводы на основе нитрида кремния SiN на изоляторе SiO_2, поскольку относительно малый контраст оптических показателей преломления между SiN и SiO_2 обеспечивает слабую локализацию оптического излучения в сердцевине волновода, что позволяет оптическому излучению сильнее взаимодействовать с внешней средой. Отдельно отметим, что в тексте используется аббревиатура SiN, поскольку нам точно неизвестна стехиометрия нитрида кремния, осаждаемого на нашем оборудовании методом ПХО; правильной стехиометрической формулой является Si_3N_4 или близкая к ней.

Параметры модели представлены в таблице. Далее в работе если один из параметров варьируется, то все остальные соответствуют величинам, приведенным в таблице. Моделирование проводилось в среде COMSOL Multiphysics методом конечных элементов.

Величины h_{sub} и w_{clad} являются модельными параметрами, ограничивающими размер рассматриваемой при моделировании области. Величина h_{sub} соответствует толщине слоя SiO_2, который планируется формировать на поверхности кремниевой подложки перед осаждением SiN. Ширина моделируемой области w_{clad} обусловлена ограничениями вычислительной способности компьютера; физически за правой и левой границей модели будет также находиться SiO_2. На внешних границах модели установлено граничное условие, предотвращающее отражение оптического излучения обратно в рассматриваемую область.

Показатель преломления воздуха определялся по данным, представленным в работе [7], водорода — по данным, представленным в работе [8], SiO_2 — по данным, приведенным в работе [9], SiN — по данным, приведенным в работе [10]. Относительная диэлектрическая проницаемость ε_{Pd} в зависимости от концентрации водорода определяется выражением [4,5]

$$\varepsilon_{\text{Pd}}(C_{\text{H}_2}) = h(C_{\text{H}_2})\varepsilon_{\text{Pd}}(0), \tag{1}$$

где $h(C_{\text{H}_2}) \leq 1$ — эмпирически получаемая нелинейная функция, определяющая уменьшение диэлектрической проницаемости тонкой пленки Pd при увеличении C_{H_2}. Поскольку вид этой зависимости неизвестен, на данном этапе было решено принять

$$h(C_{\text{H}_2}) = \frac{1}{1 + C_{\text{H}_2}/(m \cdot 100\%)}, \quad m > 0. \tag{2}$$

В будущем эта зависимость может быть пересмотрена, если экспериментально удастся выявить иную. Величина диэлектрической проницаемости, реальная и мнимая части показателя преломления тонкой пленки Pd были взяты из работы [11].

Для оценки эффективности воздействия водорода на постоянную распространения по методу наименьших квадратов были построены аппроксимации зависимостей β от C_{H_2} при вариации геометрических параметров. Уравнение аппроксимации имело вид

$$\beta = aC_{\text{H}_2} + b, \tag{3}$$

где a — коэффициент наклона прямой, имеющий размерность $\frac{\text{rad}}{\text{m}\cdot\%}$, b — константа, имеющая размерность rad/m.

Отметим также, что в работе рассматривается распространение горизонтально-поляризованной оптической моды TE_0, поскольку только эта мода может распространяться в волноводе с указанными параметрами при отсутствии Pd.

На рис. 1, *a* представлено поперечное сечение рассматриваемого волновода. Зависимость a от m имеет вид, представленный на рис. 1, *b*.

Все приведенные далее зависимости будут построены при $m = 4$. Выбор $m = 4$ обусловлен тем, что при такой величине параметра возможно проведение расчета модели с шагом развертки концентрации водорода 0.1%, что снижает время расчета по сравнению с меньшими величинами и вместе с тем обеспечивает достаточно большое изменение постоянной распространения при

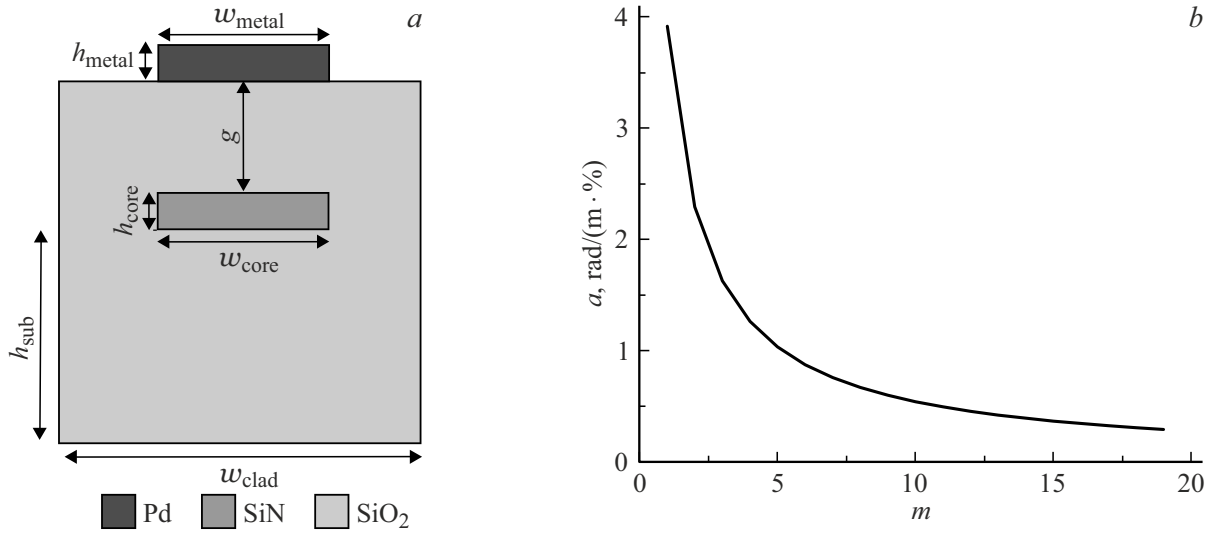

Рис. 1. Поперечное сечение волновода и зависимость параметра a от параметра m.

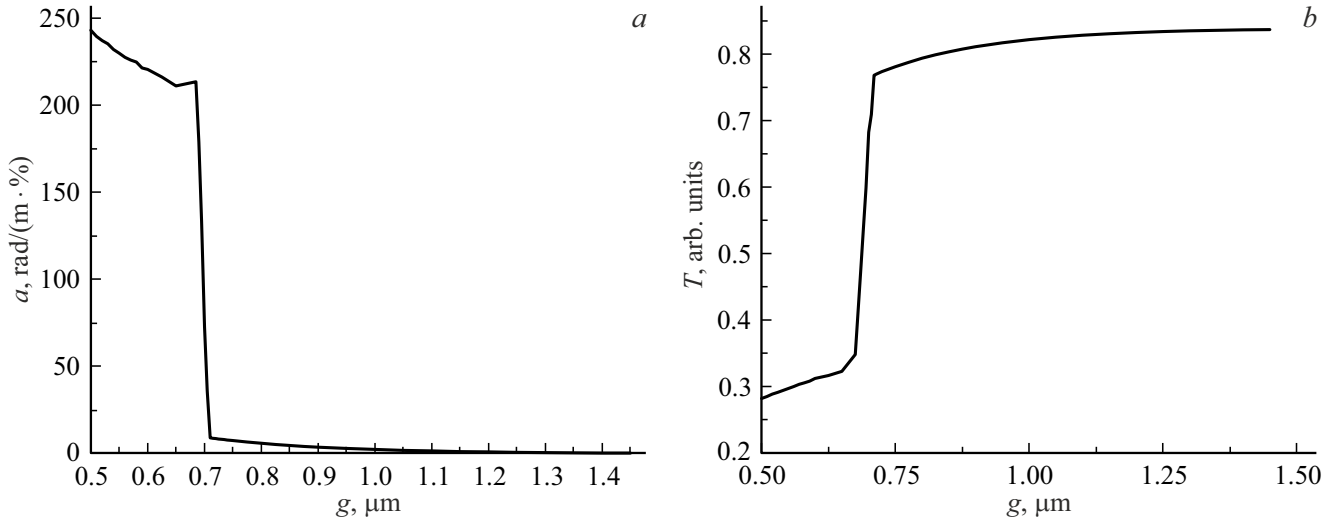

Рис. 2. Зависимости параметра a и коэффициента передачи от параметра g.

вариации геометрических параметров модели, что упрощает анализ результатов.

На рис. 2 представлены зависимости a от g и коэффициента передачи T при длине волновода $5\,\mu$m от g.

На рис. 3, a представлена зависимость параметра a от ширины полоски металла на поверхности оболочки волновода (w_{metal}), на рис. 3, b представлена зависимость коэффициента передачи волновода при длине $5\,\mu$m от w_{metal}.

Аналогично на рис. 4 представлена зависимость a от толщины пленки Pd (h_{metal}).

Как видно из рис. 2–4, наибольшее воздействие как на коэффициент передачи, так и на параметр a оказывает параметр g. Из рисунков следует, что величина параметра g менее $0.75\,\mu$m обеспечивает слишком маленький коэффициент передачи. Минимальная допустимая величина g составляет порядка $0.75-1\,\mu$m. Наличие границы $0.75\,\mu$m объясняется диаметром поля моды, распространяющейся в волноводе с указанной в таблице и на рис. 1 конфигурацией.

Таким образом, было проведено численное моделирование зависимости постоянной распространения оптического излучения в интегрально-оптическом волноводе, нагруженном тонкой пленкой Pd, от концентрации водорода в атмосфере. Можно заключить, что на основе интегральных волноводных структур возможно реализовать чувствительные элементы для детектирования водорода. Возникающее под воздействием водорода изменение диэлектрической проницаемости тонкой пленки Pd приводит к изменению постоянной распространения в волноводе, на оболочку которого нанесена тонкая пленка Pd. Изменение постоянной распространения мо-

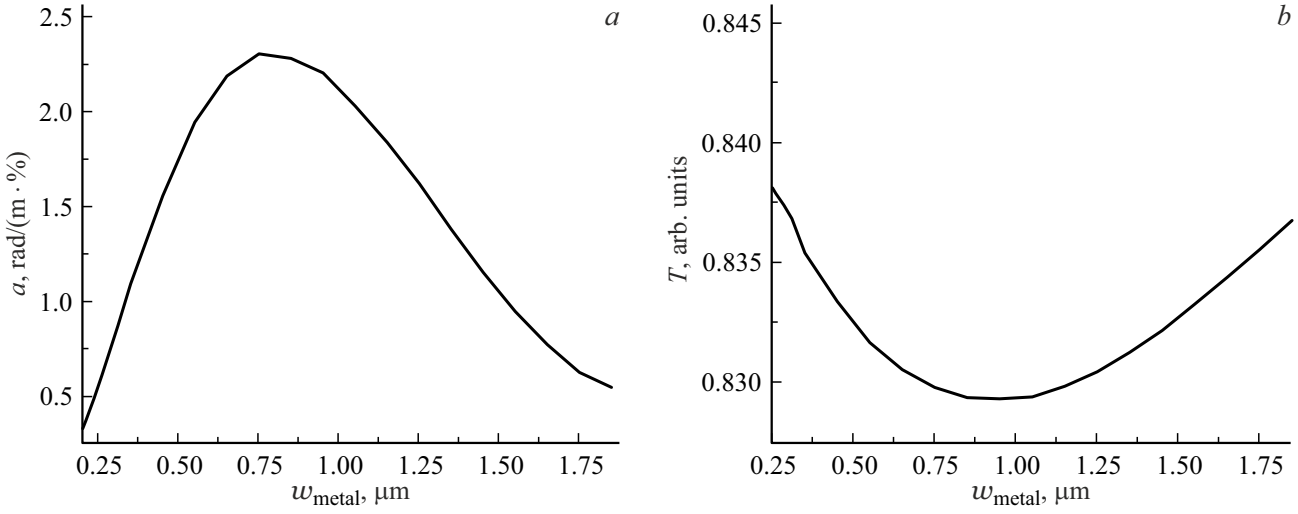

Рис. 3. Зависимости параметра a и коэффициента передачи от параметра w_{metal}.

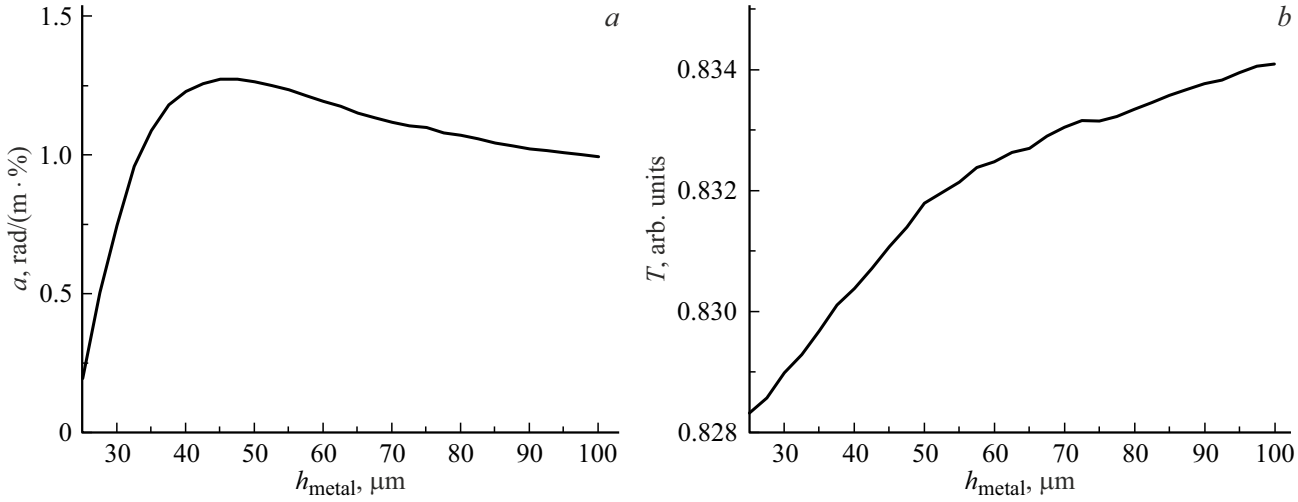

Рис. 4. Зависимости параметра a и коэффициента передачи от параметра h_{metal}.

жет быть обращено в изменение оптической интенсивности, если использовать этот принцип в конфигурациях интерферометра Маха–Цендера, интегрального оптического кольцевого резонатора или направленного ответвителя. Тогда изменение концентрации водорода можно будет анализировать по изменению оптического пропускания ФИС на фиксированной длине волны или по изменению зависимости оптического пропускания при изменении длины волны при фиксированном уровне мощности. Дальнейшая работа по разработке чувствительного элемента будет сводиться в первую очередь к поиску оптимальной величины параметра g, поскольку его варьирование оказывает наибольшее влияние как на чувствительность к водороду, так и на оптическое пропускание. Изменение остальных рассматриваемых параметров оказывает значительно меньшее влияние как на величину параметра a, так и на величину оптического пропускания волновода.

Финансирование работы

Работа выполнена в рамках государственного задания ИОА СО РАН в части проведения расчетов и государственного задания ТУСУР (тема № FEWM-2025-0004) в части исследования результатов расчета модели.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

[1] K. Chen, D. Yuan, Y. Zhao. Optics & Laser Technology, **137**, 106808 (2021). DOI: 10.1016/j.optlastec.2020.106808

[2] А.М. Минкин, Л.А. Жикина, Н.А. Медведева, М.С. Котлячков. Прикладная фотоника, **10** (2), 25 (2023).

[3] Y.S.H. Najjar, S. Mashareh. Biomedical J. Scientific & Technical Research, **21** (5), 16228 (2019). DOI: 10.26717/BJSTR.2019.21.003670
[4] K. Schroeder, W. Ecke, R. Willsch. Optics and Lasers in Engineering, **47** (10), 1018 (2009). DOI: 10.1016/j.optlaseng.2009.04.002
[5] X. Bévenot, A. Trouillet, C. Veillas, H. Gagnaire, M. Clément. Sensors and Actuators. B: Chemical, **67** (1−2), 57 (2000). DOI: 10.1016/S0925-4005(00)00407-X
[6] B.J. Luff, J.S. Wilkinson, J. Piehler, U. Hollenbach, J. Ingenhoff, N. Fabricius. J. Lightwave Technology, **16** (4), 583 (1998).
[7] P.E. Ciddor. Appl. Opt., **35** (9), 1566 (1996). DOI: 10.1364/AO.35.001566
[8] E.R. Peck, S. Huang. J. Optical Society of America, **67** (11), 1550 (1977). DOI: 10.1364/JOSA.67.001550
[9] I.H. Malitson. J. Optical Society of America, **55** (10), 1205 (1965). DOI: 10.1364/JOSA.55.001205
[10] K. Luke, Y. Okawachi, M.R. Lamont, A.L. Gaeta, M. Lipson. Opt. Lett., **40** (21), 4823 (2015). DOI: 10.1364/OL.40.004823
[11] K.J. Palm, J.B. Murray, N.C. Narayan, J.N. Munday. Acs Photonics, **5** (11), 4677 (2018). DOI: 10.1021/acsphotonics.8b01243