

引用格式: DENG Lipeng, Tang Yi, MENG Fanlong, et al. Mid-infrared gas sensor array based on suspended one-dimensional photonic crystal waveguides[J]. Acta Photonica Sinica, 2026, 55(8):0828002

邓力鹏,汤毅,孟凡龙,等. 基于悬浮一维光子晶体波导的中红外气体传感阵列[J]. 光子学报, 2026, 55(8):0828002

基于悬浮一维光子晶体波导的中红外气体传感阵列

邓力鹏¹, 汤毅¹, 孟凡龙¹, 汪鹏君², 陈伟伟^{1*}

(1 宁波大学 信息科学与工程学院, 宁波 315211)

(2 温州大学 电气与电子工程学院, 温州 325035)

摘 要:本文提出、设计并分析了一种基于悬浮一维光子晶体波导的中红外气体传感阵列,传感阵列由波长-模式解复用器和悬浮一维光子晶体波导组成。其中,悬浮一维光子晶体波导被设计为支持两种传输模式,通过优化其结构参数使相应的慢光区域与甲烷和二氧化碳的吸收光谱重叠,增强了光与气体的相互作用,从而提升传感波导的检测性能。一维光子晶体波导在 $3.31\ \mu\text{m}$ 和 $4.23\ \mu\text{m}$ 处的慢光增强因子为 4.06 和 2.02。波长-模式解复用器基于直接二进制搜索算法逆向设计,实现了 TE_0 模式下 $4.23\ \mu\text{m}$ 和 TE_1 模式下 $3.31\ \mu\text{m}$ 波长的分离,插入损耗分别为 0.36 dB 和 0.695 dB,串扰分别为 -26.8 dB 和 -29.85 dB。仿真结果表明,传感阵列分别在 $3.31\ \mu\text{m}$ 和 $4.23\ \mu\text{m}$ 处以甲烷和二氧化碳作为待测气体时,检测极限分别为 19.65 ppb 和 4.356 ppb,灵敏度为 $0.423\ \text{Wmol}^{-1}\text{L}$ 和 $1.925\ \text{Wmol}^{-1}\text{L}$ 。

关键词:集成光学;光波导传感阵列;中红外;慢光增强因子

中图分类号: TN252

文献标识码: A

doi: 10.3788/gzxb20265508.0828002

0 引言

光学传感器在环境监测、食品变质监测、资源勘探以及医学诊断等领域具有重要应用^[1]。近年来,基于不同检测原理的高灵敏度气体检测技术快速发展,其中空间光路设计可通过延长有效作用路径或优化光-声耦合区域来增强检测信号,例如,2026年,Cui Ruyue等^[2]提出的空间工程化光-声匹配 QEPAS 方案实现了约 42 倍的信号增强。由于分子振动跃迁的影响,大多数分子在中红外(Mid-Infrared, MIR)波段具有独特的吸收谱线^[3],基于红外吸收光谱的分子检测无需化学反应或辅助材料,展现出较大的气体传感潜力。然而,早期光谱吸收传感器多依赖于分立器件^{[4],[5]},这类传感系统通常体积庞大、结构复杂和集成度低,同时对振动和环境变化敏感^[6]。近年来,随着集成光学的发展,光波导传感器凭借其高集成度、非接触式检测及良好的稳定性等优势,成为传感器领域中的重要研究方向^[7]。

目前,基于不同波导平台的光谱吸收型气体传感器已得到广泛研究,早期的研究主要集中于矩形波导、脊形波导和狭缝波导等。2016年,KUMARI B等^[8]提出了一种氮化硅上硅狭缝波导,在 $3\ \mu\text{m}$ 处实现了对氨气的检测,检测极限为 5 ppm,倏逝场占比约为 43%。2017年,BUTT M A等^[9]提出了一种矩形硅波导用于气体检测,其倏逝场占比超过 55%。同年,TOMBEZ L等^[10]制备了长度为 10 cm 的硅(Silicon, Si)波导,并在 1651 nm 波长处实现了对甲烷(Methane, CH_4)的检测,实验结果表明其倏逝场占比为 25.4%,检测极限为 100 ppm。该工作验证了芯片级集成光子气体传感器的可行性。随着研究的深入,研究者通过采用新的波

基金项目:国家自然科学基金(Nos.62275134, 62234008)、宁波市自然科学基金(Nos.2022J099)、宁波市青年科技创新领军人才项目(No.2023QL003)

第一作者:邓力鹏, 2311100003@nbu.edu.cn

通讯作者:陈伟伟, chenweiwei@nbu.edu.cn

收稿日期: 2026-04-23; **录用日期:** 2026-06-02

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

导层和下包层材料来提升传感性能。2020年,XU Guizhen等^[11]提出了一种慢光布洛赫槽波导(Slow-Light Bloch Slot Waveguides,BSW),并以CH₄作为待测气体。仿真结果表明,在1.651 μm和3.31 μm两个波长处的检测极限分别为0.034 ppm和0.29 ppm。2021年,CHANDRA V等^[12]在氟化钙平台上设计了三种基于锗材料的狭缝波导,在3.31 μm处将CH₄作为检测目标,倏逝场占比最高达到28%。同年,ZEGADI R等^[13]提出了三种中红外片上集成波导平台:硫系玻璃薄膜脊形波导、多孔锗脊形波导和硫系玻璃狭缝波导,用于二氧化碳(Carbon dioxide, CO₂)和CH₄传感,结果表明硫系玻璃狭缝波导具有最佳的传感性能,在4.3 μm和7.7 μm处检测CO₂和CH₄时,检测极限分别达到0.1 ppm和1.66 ppm,传感器的倏逝场占比为58%。2023年,LIM J等^[14]在氧化钇平台上制备了通道波导、狭缝波导以及带薄slab的狭缝波导,实验结果表明三种波导的倏逝场占比分别为23%、44.3%和49.6%。次年,该团队^[15]基于同一平台利用锗材料构建狭缝波导,在4.23 μm处实现了对CO₂的检测,检测极限为0.625 ppm,其倏逝场占比为45.2%。2023年,PI Mingquan等^[16]提出了一种超宽带中红外悬浮脊波导气体传感器。以硫系玻璃作为波导芯层材料,该团队设计了三种不同尺寸参数的悬浮脊波导,其工作波段分别覆盖3.2–5.6 μm、5.4–8.2 μm和8.1–11.5 μm,倏逝场占比分别达到107%–116%、107%–116%和116%–128%。分别在3.291 μm、4.319 μm和7.625 μm处对CH₄和CO₂进行了吸收检测实验,实验结果表明,三种波导结构的倏逝场占比分别为112%、110%和110%。在3.291 μm处对甲烷的检测下限达到5.9 ppm。2024年,BUTT M A等^[17]提出了一种基于锗-硅-绝缘体平台的悬浮狭缝膜波导,用于检测CO₂,其倏逝场占比达到86%。2025年,LIN Pensheng等^[18]提出了一种低损耗中红外悬浮硅波导气体传感器,在4.237 μm处实现了对CO₂的检测。实验结果表明,传感器的传播损耗为2.20 dB/cm,实验测得的倏逝场占比约为15.3%,基于Allan方差分析得到检测极限为73 ppm。2026年,LIN Pensheng等^[19]提出了一种工作于长波红外波段的悬浮锗波导传感器,并将其用于在9.2 μm处对乙醇气体检测。仿真得到的倏逝场占比为22%,实验测得的倏逝场占比约为20%。基于Allan方差分析得到的乙醇检测极限为925 ppm。总体来看,矩形波导、脊形波导和狭缝波导主要通过优化模式分布来提高倏逝场占比,从而增强光与气体的相互作用,但其增强能力仍受到一定限制。相比之下,光子晶体波导通过周期性结构引入的色散与可设计的慢光效应,使得光与待测物质之间的相互作用强度得到增强,在高性能气体传感领域展现出更大的潜力。围绕慢光增强机制,2019年,GERVAIS A等^[20]针对可调谐二极管激光吸收光谱技术存在的光-气体重叠不足和相互作用长度受限的问题,提出采用亚波长光栅波导来增强吸收信号,该传感器在1.651 μm波长处用于CH₄检测,检测极限可达1.42 ppm,慢光增强因子为1.1。2023年,PENG Zihang等^[21]制备并比较了一维光子晶体波导(one-dimensional photonic crystal waveguide, 1D PCW)和二维光子晶体波导(two-dimensional photonic crystal waveguide, 2D PCW)的传感性能,结果表明2D PCW具有更强的慢光增强能力,但其传播损耗也更大;相比之下,1D PCW的群折射率较低但损耗更小,适合大规模集成。在1.53 μm处对乙炔进行了检测,1D PCW和2D PCW的检测极限分别为706 ppm和277 ppm,慢光增强因子分别为2.88和6.84,传输损耗分别为10 dB/cm和44 dB/cm。为了进一步提升慢光增强因子并降低传播损耗,悬浮波导结构逐渐成为高性能气体传感器设计的重要方向。悬浮结构增大了光场与待测气体的接触区域,并降低了传播损耗。2019年,PI Mingquan等^[22]提出了一种硫系玻璃悬浮狭缝波导,用于在3.29 μm波长处检测CH₄,其检测极限为1.7 ppm,倏逝场占比高达85.77%。2020年,OTTONELLO BRIANO F等^[23]制备了一种由锥形二氧化硅支撑柱周期支撑的悬浮波导,并在4.24 μm波长处对CO₂检测,其倏逝场占比为46.3%。同年,YOO K M等^[24]制备了两种悬浮波导结构:悬浮亚波长光栅波导和悬浮2D PCW波导,并在6.15 μm波长处实现了对氨气的检测,检测极限低至84 ppb。2021年,VLK M等^[25]提出了一种工作于TM偏振模式下的悬浮浅肋型波导,用于在2.566 μm处检测乙炔,其倏逝场占比达到107%,检测极限为7 ppm。2024年,KIM I等^[26]在氧化钇衬底上制备了悬浮锗光子晶体波导,并在4.23 μm波长处实现了CO₂检测,在800 μm的波导长度下,传感器的检测极限为7.56 ppm,慢光增强因子为4.98。由此可见,当前基于光子晶体波导的气体传感器研究虽然取得了一定进展,但已有传感器多针对单一气体检测进行设计,难以满足片上多气体检测的需求。此外,现有多气体波导传感方案通常基于单一模式设计,主要通过拓宽传感波导的模式带宽来覆盖多种气体的特征吸收峰,从而实现多气体检测。然而,由于单一模式的慢光工作范围有限,这类方案通常仅能在目标吸收峰与慢光区域较为接近时获得较好的检测性能;当不同气体的吸收峰位置较远

时,难以同时兼顾各自目标吸收波长处的慢光增强效果和检测性能。因此,设计能够在中红外波段利用不同传输模式分别覆盖不同吸收波长区域的光子晶体波导结构,对于实现片上多气体检测具有重要意义。

鉴于此,本文提出了一种基于悬浮一维光子晶体波导的中红外气体传感阵列。该传感阵列由波长-模式解复用器和悬浮一维光子晶体传感波导组成。其中,悬浮一维光子晶体波导被设计为支持两种传输模式,通过调控其双模式能带结构,使两种模式的慢光工作区域分别对准 CO_2 和 CH_4 的特征吸收波长。从而在同一个传感波导结构参数下实现两个目标处的慢光增强。同时,利用直接二进制搜索(Direct Binary Search, DBS)算法对波长-模式解复用器进行优化,将不同输入波长分配至对应传感通道,并实现 $3.31 \mu\text{m}$ 波长处 TE_0 模式到 TE_1 模式的转换,从而形成模式复用与波长解耦相结合的协同设计。优化后,对应波长处的插入损耗分别为 0.36 dB 和 0.695 dB ,串扰分别为 -26.8 dB 和 -29.85 dB 。所设计的传感阵列分别在 $3.31 \mu\text{m}$ 和 $4.23 \mu\text{m}$ 处对 CH_4 和 CO_2 实现检测,仿真结果表明,检测极限分别为 19.65 ppb 和 4.356 ppb ,灵敏度为 $0.423 \text{ Wmol}^{-1}\text{L}$ 和 $1.925 \text{ Wmol}^{-1}\text{L}$ 。

1 原理与设计

基于光谱吸收原理的传感器遵循比尔-朗伯定律^[27],该定律解释了输入光衰减与物质浓度之间的关系,它可以表示为:

$$P_{\text{out}} = P_{\text{in}} \exp(-\eta \epsilon_g C_g L_0 - \alpha L_0) \quad (1)$$

其中 P_{out} 和 P_{in} 分别为输出和输入光功率, ϵ_g 为气体吸收系数, C_g 为气体浓度, L_0 为传感长度, η 为慢光增强因子,代表了光-物质相互作用程度。 α 为波导的传输损耗,包括吸收损耗和散射损耗^[28]。

根据微扰理论^[29],可以得到:

$$\eta = ECF \cdot \frac{c/n_{\text{air}}}{v_g} = ECF \cdot n_g \quad (2)$$

其中 ECF (External Confinement Factor) 是外部限制因子,代表了光与待测气体重叠区域的功率占比,其表达式为:

$$ECF = \frac{\iiint_{\text{clad}} \epsilon |E|^2 dx dy dz}{\iiint_{\text{total}} \epsilon |E|^2 dx dy dz} \quad (3)$$

其中, ϵ 为材料的介电常数, n_g 为群折射率,其表达式为^[30]:

$$n_g = c \cdot \frac{dK}{d\omega} \quad (4)$$

其中, c 表示真空中的光速, ω 为入射光的中心频率, K 为传播方向上的布洛赫波矢,灵敏度 S_e 表示为输出功率随气体浓度 C_g 的变化率,其对应的数学公式可解释如下^[8]:

$$S_e = \left| \frac{dP}{dC_g} \right| = \eta \epsilon_g L_0 P_0 \exp(-\eta \epsilon_g C_g L_0 - \alpha L_0) \quad (5)$$

检测极限 (Limit of Detection, LOD) 代表传感器能够检测到待测气体的最低浓度,记作 C_{min} ,其计算公式为^[22]:

$$C_{\text{min}} = \frac{-\ln \left[1 - \frac{S_r \cdot N_p \cdot \sqrt{B_0}}{P_0 \exp(-\alpha L_0)} \right]}{\epsilon_g \eta L_0} \quad (6)$$

其中, S_r , N_p 和 B_0 分别表示信噪比、等效噪声功率和带宽。

基于悬浮一维光子晶体波导的中红外气体传感阵列如图1所示。图1(a)展示了传感阵列的三维结构,其中波导芯层采用硅材料且硅层厚度为 500 nm 。下包层材料二氧化硅,通过去除部分二氧化硅下包层使传感阵列悬浮,一方面扩展了光与气体的相互作用区域;另一方面,波导下侧的倏逝场不再与二氧化硅重叠,从而降低了由二氧化硅吸收引起的传播损耗^[31]。图1(b)为该传感阵列在 x - y 平面的结构示意图。传感阵列由一维光子晶体波导和波长-模式解复用器组成,其中一维光子晶体波导被设计为支持两种模式,用于在

4.23 μm 和 3.31 μm 特征波长处分别实现对 CO_2 和 CH_4 检测,两种模式可由条形波导中的 TE_0 和 TE_1 模式激发。此外,波长-模式解复用器采用直接二进制搜索(Direct Binary Search,DBS)算法进行优化。当波长为 4.23 μm 和 3.31 μm 的 TE_0 模式输入该器件后,两者分别从不同的端口输出,在这个过程中,3.31 μm 波长的 TE_0 模式将转换为 TE_1 模式。需要说明的是,本文中 TE_0 和 TE_1 模式分别表示波长-模式解复用器输入/输出波导中的基模和一阶横电模式,模式 1 和模式 2 表示悬浮一维光子晶体波导中的两个布洛赫模式。其中,模式 1 工作在 4.23 μm 处并用于 CO_2 检测,该模式由波长-模式解复用器的 O1 端口输出的 4.23 μm 的 TE_0 模式激发得到;模式 2 工作在 3.31 μm 处并用于 CH_4 检测,该模式由 O2 端口输出的 3.31 μm 的 TE_1 模式激发得到。

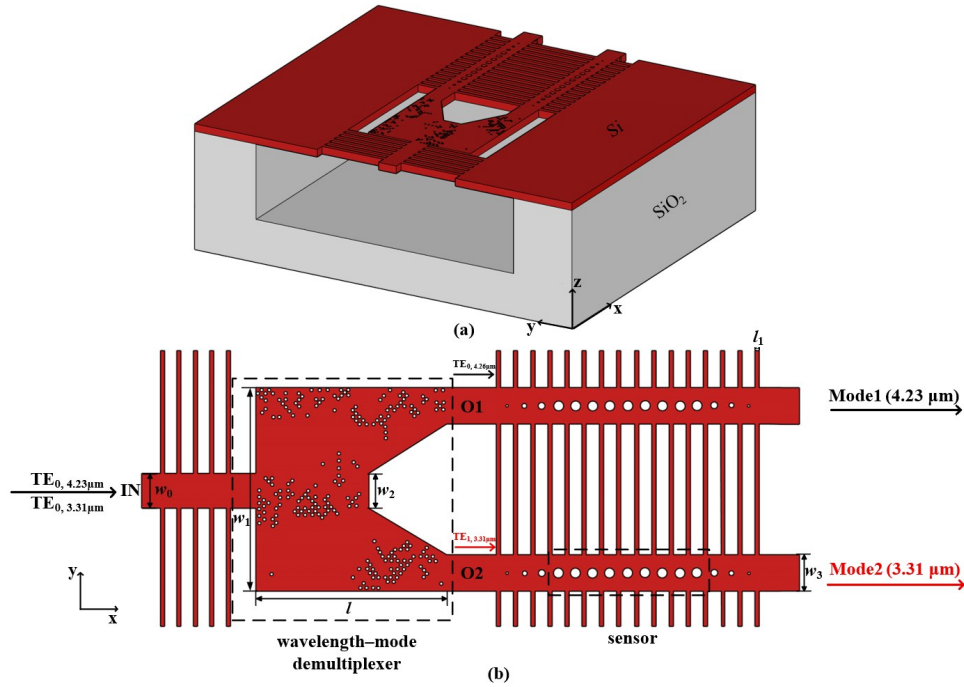


图1 基于悬浮一维光子晶体波导的中红外气体传感阵列的(a)三维结构示意图;(b)x-y平面的结构示意图
Fig. 1 (a) Three-dimensional schematic and (b) x-y plane schematic of the sensor array based on suspended 1D PCW

2 仿真和优化

2.1 悬浮一维光子晶体波导

图 2(a)和图 2(b)展示了悬浮一维光子晶体波导的三维结构示意图和 x-y 平面的结构示意图。为了保证结构稳定的同时减小对传输模式产生的干扰,一维光子晶体波导两侧的支撑波导宽度 l_1 被设置为 120 nm,一维光子晶体波导的周期为 a ,空气孔的半径为 r 。当 $a=900$ nm, $w_3=1.75a$, $r=0.2a$ 时,模式 1 和模式 2 的能带结构如图 2(c)所示,在该结构参数下,两种模式分别覆盖了 CO_2 和 CH_4 在 4.23 μm 和 3.31 μm 处的特征吸收峰。图 2(d)展示了 4.23 μm 波长处模式 1 和 3.31 μm 波长处模式 2 的电场分布情况,可以观察到两种模式的电场能量主要集中在中心空气孔区域,有利于增强气体与模式场的重叠,从而提升检测性能。

当 $a=900$ nm, $w_3=1.75a$ 时,模式 1 和模式 2 的布洛赫波矢 K 、群折射率 n_g 、有效折射率 n_{eff} 、外部限制因子 ECF 以及慢光增强因子 η 随空气孔半径 r 的变化情况如图 3 所示。图 3(a)~(d)展示了 r 从 0.18 μm 增加到 0.252 μm 的过程中,两种模式的 K 、 n_g 和 n_{eff} 逐渐降低,并且 ECF 随 r 的增加逐渐升高。图 3(e)展示了两种模式的慢光增强因子 η 随 r 的变化情况,可以看到增加空气孔半径对模式 1 的慢光增强因子影响较小,当 r 为 0.216 μm 时,模式 1 的慢光增强因子最大,而随着 r 的增加,模式 2 的慢光增强因子逐渐降低。因此,将 r 设置为 0.216 μm 。此时,模式 1 和模式 2 的布洛赫波矢 K 分别为 0.4115 和 0.4105。尽管更低的 r 使得模式 2 的慢光增强因子 η 更高,但同时也会导致更高的传输损耗^[32]。由公式(5)和公式(6)可知,较大的传输损耗会提高传感器的检测极限并降低灵敏度。

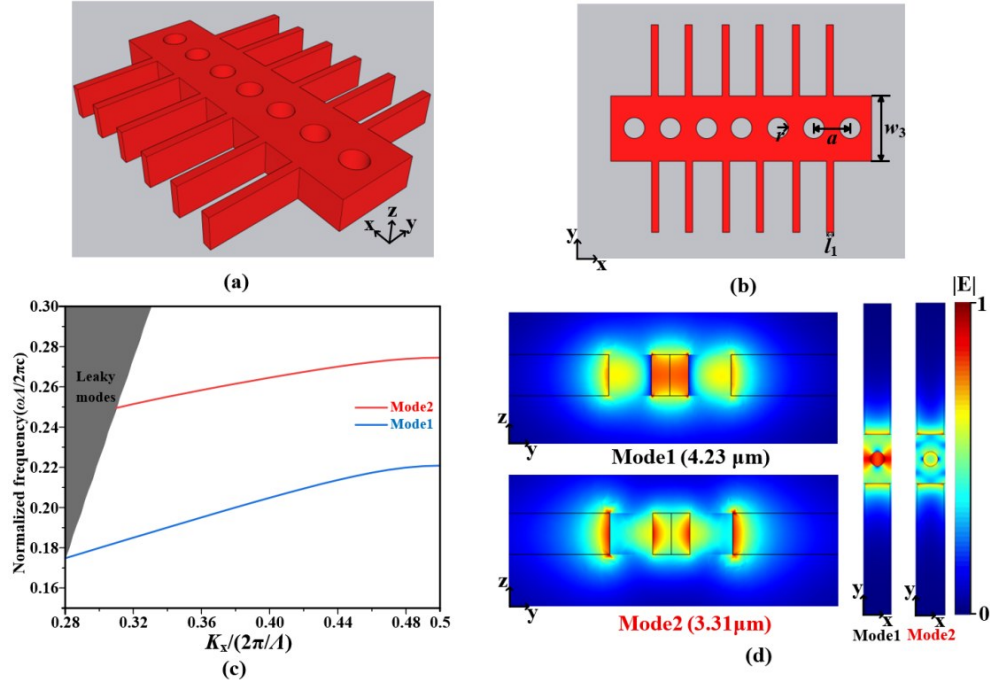


图2 悬浮一维光子晶体波导的(a)三维结构示意图;(b)x-y平面结构示意图;(c)当 $a=900\text{ nm}$, $w_3=1.75a$, $r=0.2a$ 时模式1和模式2的能带结构;(d)4.23 μm 波长处模式1和3.31 μm 波长处模式2的电场分布图

Fig. 2 (a) Three-dimensional schematic of the suspended 1D PCW (b) Top view of the suspended 1D PCW (c) Band structures of Mode 1 and Mode 2 with $a=900\text{ nm}$, $w_3=1.75a$ and $r=0.2a$; (d) Electric field distributions of Mode 1 at 4.23 μm and Mode 2 at 3.31 μm

当 $a=900\text{ nm}$, $r=0.216\text{ }\mu\text{m}$ 时,两种模式的布洛赫波矢 K 、群折射率 n_g 、有效折射率 n_{eff} 、外部限制因子 ECF 以及慢光增强因子 η 随一维光子晶体波导宽度 w_3 的变化情况如图4所示。值得注意的是,当 w_3 小于1.35 μm 时,模式2的有效折射率 n_{eff} 过小使得传输损耗增加;当 w_3 大于1.55 μm 时,模式2的布洛赫波矢 K 接近0.5,使得 n_g 快速上升,也会导致较大的传播损耗。如图4(a)~(d)所示,随着 w_3 从1.305 μm 增长到1.935 μm ,两种模式的 K 、 n_g 和 n_{eff} 逐渐升高, ECF 逐渐降低。图4(e)展示了两种模式的慢光增强因子 η 随 w_3 的变化情况,模式1的慢光增强因子随 w_3 的增加先降低后升高。当 w_3 增大时,模式2的慢光增强因子随之提升。为了使模式1和模式2的 η 保持较高值,并使模式2的慢光增强因子位于相对平缓的变化区间,一维光子晶体的宽度 w_3 被设置为1.4 μm 。表1总结了优化后一维光子晶体波导的结构参数。

图5展示了优化后一维光子晶体波导的能带结构,蓝色和红色的曲线分别为模式1和模式2的能带曲线,蓝色和红色的五角星分别为4.23 μm 和3.31 μm 波长对应的归一化频率点。在4.23 μm 波长处,布洛赫波矢 K 为0.388,慢光增强因子 η 为2.02。在3.31 μm 波长处, K 为0.389, η 为4.06。

2.2 波长-模式解复用器

图6展示了波长-模式解复用器在x-y平面的结构示意图。为了降低传感阵列前端复杂度,并且减小传感阵列的面积,利用DBS算法对结构进行优化。优化目标为:在输入波长为3.31 μm 和4.23 μm 的 TE_0 模式条件下,4.23 μm 波长的光以 TE_0 模式从O1端口输出,而3.31 μm 波长的光经过模式转换后,以 TE_1 模式从O2端口输出。首先,该算法将设计区域像素化,每个像素对应半径 r_1 为80 nm的圆形硅孔,并且每个像素只取“保留硅”或“去除硅”两种状态之一。其次,依次翻转各像素单元的状态,并通过FDTD软件计算翻转前后的品质因数(Figure of Merit, FOM),若当前翻转操作能够提升FOM,则保留该像素状态,否则恢复至原始状态。最后,通过多轮迭代搜索获得满足设计要求的二值结构分布。优化过程中将FOM设置为 $[(P_{\text{TE}_0-4.23-\text{O}1}-P_{\text{TE}_0-4.23-\text{O}2})+(P_{\text{TE}_1-3.31-\text{O}2}-P_{\text{TE}_1-3.31-\text{O}1})]/2$ 。其中 $P_{\text{TE}_0-4.23-\text{O}1}$ 和 $P_{\text{TE}_0-4.23-\text{O}2}$ 分别代表输入波长为4.23 μm 的 TE_0 模式时,O1和O2端口输出波长为4.23 μm 的 TE_0 模式的光功率, $P_{\text{TE}_1-3.31-\text{O}1}$ 和 $P_{\text{TE}_1-3.31-\text{O}2}$ 分别代表输入波长为3.31 μm 的 TE_0 模式时,O1和O2端口输出波长为3.31 μm 的 TE_1 模式的光功率。FOM的最大值为1,且FOM值越接近1代表该器件性能越优。经过不断迭代优化,最优FOM值为0.96。

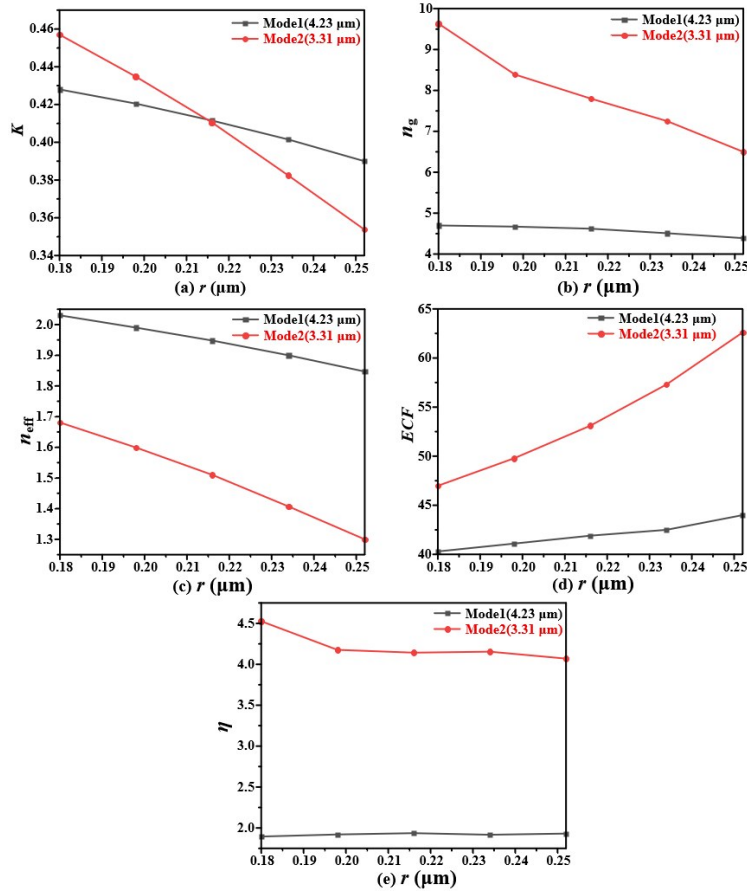


图3 模式1和模式2的(a) K , (b) n_g , (c) n_{eff} , (d) ECF 和(e) η 随空气孔半径 r 的变化情况($a=900\text{ nm}$, $w_3=1.75a$)
Fig. 3 Variation of (a) K , (b) n_g , (c) n_{eff} , (d) ECF or (e) η with r for mode 1 and mode 2 ($a=900\text{ nm}$, $w_3=1.75a$ used)

插入损耗(Insertion Loss, IL)和串扰(Crosstalk, CT)可用于评估该波长-模式解复用的性能。对于O1端口输出波长为 $4.23\text{ }\mu\text{m}$ 的 TE_0 模式,其IL和CT的计算公式为:

$$\text{IL}_{\text{TE0}-4.23-\text{O1}} = -10\lg\left(\frac{P_{\text{TE0}-4.23-\text{O1}}}{P_{\text{TE0}-4.23-\text{IN}}}\right) \quad (7)$$

$$\text{CT}_{\text{TE0}-4.23-\text{O1}} = 10\lg\left(\frac{P_{\text{TE0}-4.23-\text{O2}}}{P_{\text{TE0}-4.23-\text{O1}}}\right) \quad (8)$$

其中 $P_{\text{TE0}-4.23-\text{IN}}$ 代表输入波长为 $4.23\text{ }\mu\text{m}$ 的 TE_0 模式时,IN端口的光功率。通过计算得到, $\text{IL}_{\text{TE0}-4.23-\text{O1}}$ 为 0.36 dB , $\text{CT}_{\text{TE0}-4.23-\text{O1}}$ 为 -26.8 dB 。对于O2端口输出波长为 $3.31\text{ }\mu\text{m}$ 的 TE_1 模式,IL和CT的计算公式为:

$$\text{IL}_{\text{TE1}-3.31-\text{O2}} = -10\lg\left(\frac{P_{\text{TE1}-3.31-\text{O2}}}{P_{\text{TE0}-3.31-\text{IN}}}\right) \quad (9)$$

$$\text{CT}_{\text{TE1}-3.31-\text{O2}} = 10\lg\left(\frac{P_{\text{TE1}-3.31-\text{O1}}}{P_{\text{TE1}-3.31-\text{O2}}}\right) \quad (10)$$

其中 $P_{\text{TE0}-3.31-\text{IN}}$ 代表输入波长为 $3.31\text{ }\mu\text{m}$ 的 TE_0 模式时,IN端口的光功率。通过计算得到, $\text{IL}_{\text{TE1}-3.31-\text{O2}}$ 为 0.695 dB , $\text{CT}_{\text{TE1}-3.31-\text{O2}}$ 为 -29.85 dB 。表2为波长-模式解复用器优化后的结构参数。图7展示了当输入波长为 $3.31\text{ }\mu\text{m}$ 和 $4.23\text{ }\mu\text{m}$ 的 TE_0 模式时,波长-模式复用器件的电场分布情况。

3 分析和讨论

3.1 检测极限和灵敏度

CO_2 和 CH_4 在 $4.23\text{ }\mu\text{m}$ 和 $3.31\text{ }\mu\text{m}$ 附近的吸收系数分别为 284 cm^{-1} 和 36.43 cm^{-1} [33]。计算得到 $4.23\text{ }\mu\text{m}$ 和 $3.31\text{ }\mu\text{m}$ 波长处的传输损耗 α 分别为 2.76 dB/cm 和 3.58 dB/cm 。考虑到实际制造中,侧壁粗糙度会引入

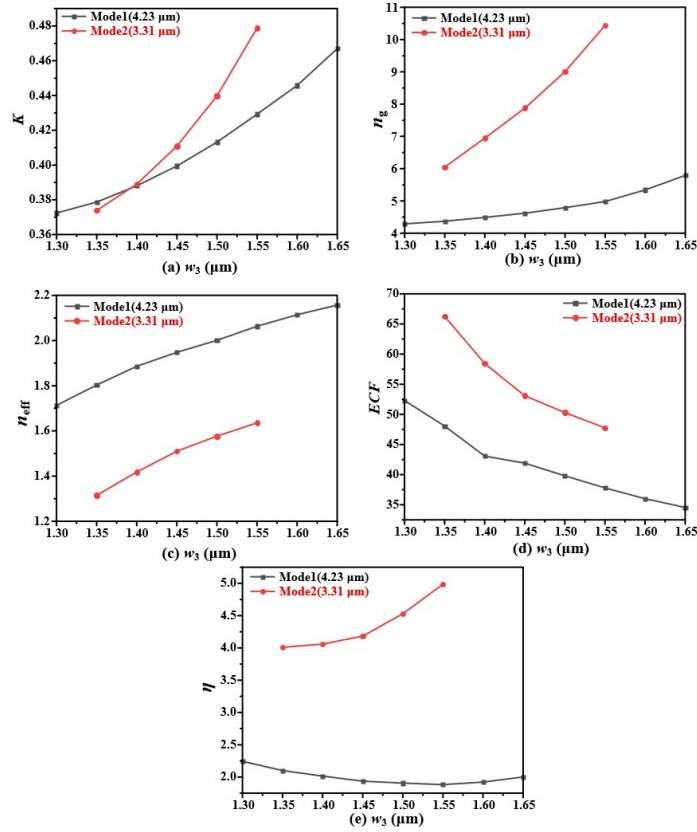


图4 模式1和模式2的(a) K , (b) n_g , (c) n_{eff} , (d) ECF 和(e) η 随 w_3 的变化情况($a=0.9\ \mu\text{m}$ 和 $r=0.216\ \mu\text{m}$)
Fig. 4 Variation of (a) K , (b) n_g , (c) n_{eff} , (d) ECF or (e) η with w_3 for mode 1 and mode 2 ($a=900\ \text{nm}$, $r=0.216\ \mu\text{m}$ used)

表1 一维光子晶体波导的最优结构参数

Table. 1 Optimal structural parameters of the 1D PCW

Parameter	Value
a	$0.9\ \mu\text{m}$
r	$0.216\ \mu\text{m}$
w_3	$1.4\ \mu\text{m}$

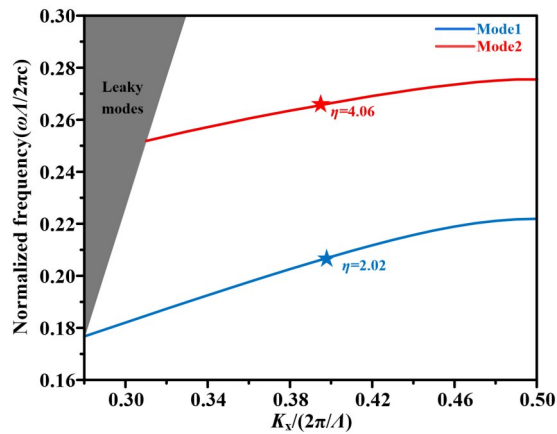


图5 一维光子晶体波导优化后模式1和模式2的能带结构
Fig. 5 Band structures of mode 1 and mode 2 of the optimized 1D PCW

额外的散射损耗,这取决于制造工艺,典型的悬浮硅波导在中红外波段的传播损耗通常低于 $2\ \text{dB}/\text{cm}$ ^{[35],[36]}。因此,悬浮一维光子晶体波导在 $4.23\ \mu\text{m}$ 和 $3.31\ \mu\text{m}$ 波长处的损耗分别估算为 $4.76\ \text{dB}/\text{cm}$ 和 $5.58\ \text{dB}/\text{cm}$ 。计算中采用输出功率为 $10\ \text{mW}$ 的带间级联激光器和带宽及等效噪声功率分别为 $160\ \text{kHz}$ 和 2.08×10^{-11}

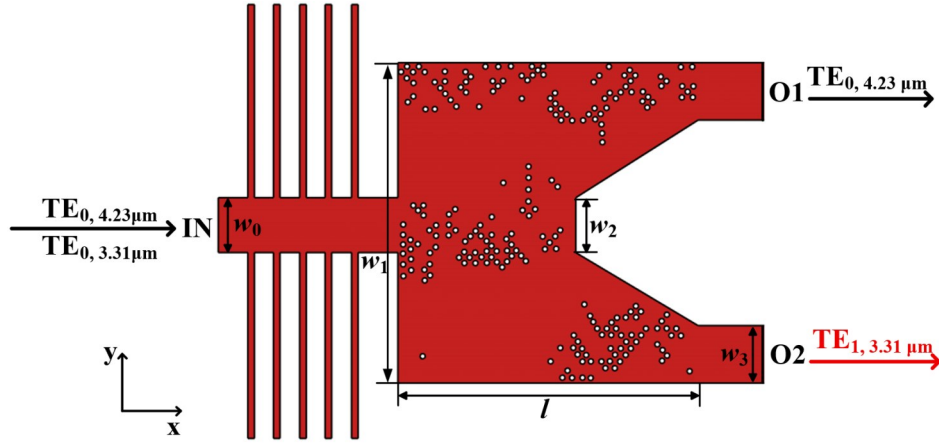


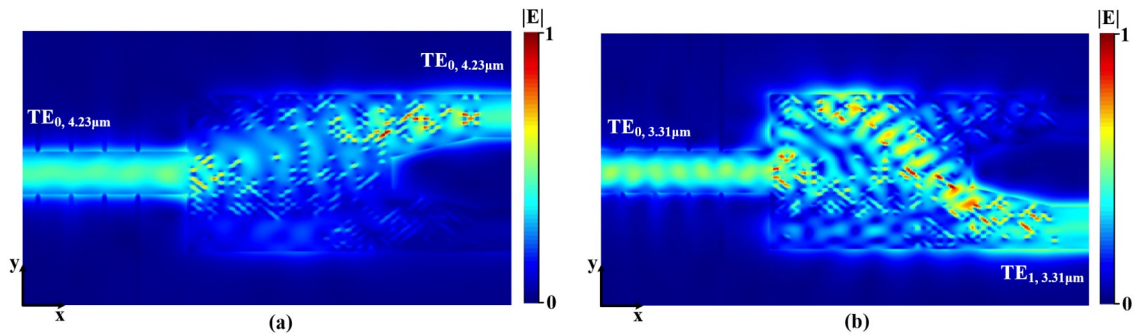
图6 波长-模式解复用器在x-y平面的结构示意图

Fig. 6 Schematic of the wavelength-mode demultiplexer in the x-y plane

表2 波长-模式解复用器优化后的结构参数

Table 2 Optimized structural parameters of the wavelength-mode demultiplexer

Parameter	Value
w_0	$1.5 \mu\text{m}$
w_1	$5.5 \mu\text{m}$
w_2	$1.1 \mu\text{m}$
w_3	$1.4 \mu\text{m}$
l	$7.75 \mu\text{m}$

图7 波长-模式解复用器在(a) 4.23 μm(TE₀)和(b) 3.31 μm(TE₀)波长下的电场分布Fig. 7 Electric field distributions of the wavelength-mode demultiplexer with input TE₀ mode at the wavelengths of (a) 4.23 μm and (b) 3.31 μm

WHz^{-1/2}的HgCdTe探测器, S_r 设置为 $10^{[37]}$ 。图8展示了以CO₂和CH₄作为待测气体时,一维光子晶体波导的长度 L_0 与最低检测限 $C_{\min}$ 和灵敏度 S_e 之间的关系。如图8(a)和图8(b)所示,随着 L_0 逐渐增加,CO₂和CH₄的检测极限先降低后升高,灵敏度先升高后降低。这是因为当 L_0 较小时,增加 L_0 有效延长了光与待测气体之间的相互作用长度,增强了气体分子对光的吸收,从而降低了传感阵列的检测极限并提高了灵敏度。然而,当 L_0 继续提高时,传播损耗在长波导中的累积效应逐渐显现,导致输出光功率下降、信噪比恶化^[38],使传感阵列的检测极限提高,灵敏度降低,当待测气体为CO₂时,最佳的 L_0 为0.925 cm,此时传感阵列对CO₂的检测极限为4.356 ppb,灵敏度为 $1.925 \text{ Wmol}^{-1}\text{L}$;待测气体为CH₄时,最佳的 L_0 为0.79 cm,此时传感阵列对CH₄的检测极限为19.65 ppb,灵敏度为 $0.423 \text{ Wmol}^{-1}\text{L}$ 。

3.2 容差分析

实际制造过程中,由光刻和刻蚀工艺引入的尺寸偏差会使传感阵列性能偏离理想仿真结果,因此,进一步讨论了工艺误差对传感阵列性能的影响。本文将传感阵列中关键几何参数的统一尺寸偏差定义为 Δb ,用于表征结构参数 w_0 、 w_1 、 w_2 、 w_3 、 l_1 、 r_1 和 r 相对于设计值的偏移量。当 $\Delta b > 0$ 时,表示 w_0 、 w_1 、 w_3 和 l_1 同步增加,

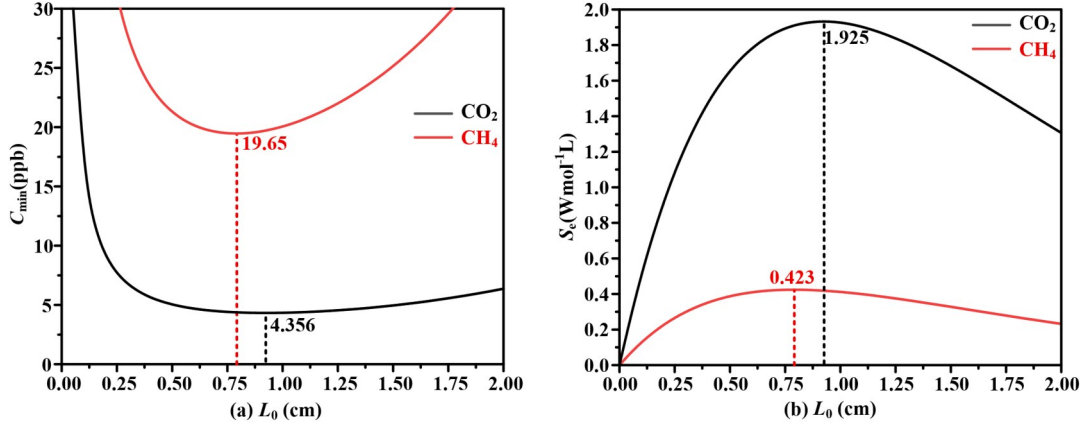

 图8 传感阵列以 CO_2 和 CH_4 作为待测气体时:(a)检测极限 $C_{\min}$ 和(b)检测灵敏度 S_e 随传感波导长度 L_0 的变化情况

 Fig. 8 (a) $C_{\min}$ and (b) S_e as functions of L_0 for the sensor array with CO_2 and CH_4 as target gases

而 w_2 、 r 和 r_1 同步减小;当 $\Delta b < 0$ 时,表示 w_0 、 w_1 、 w_3 和 l_1 同步减小,而 w_2 、 r 和 r_1 同步增加。该定义用于近似描述实际刻蚀过程中硅结构整体过刻或欠刻所引起的尺寸变化。

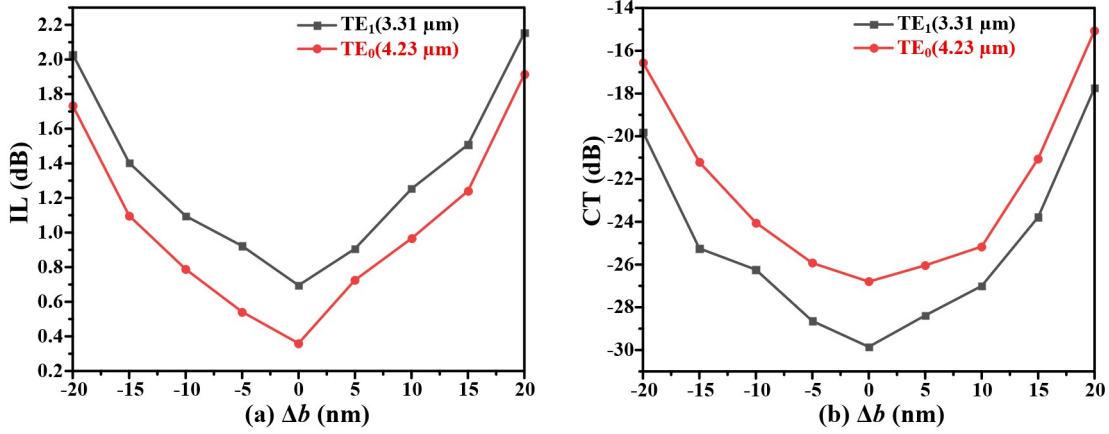

 图9 O1和O2端口输出的波长为 $4.23 \mu\text{m}$ 的 TE_0 模式和 $3.31 \mu\text{m}$ 的 TE_1 模式的(a)插入损耗 IL 和(b)串扰 CT 随 Δb 的变化情况

 Fig. 9 (a) Insertion loss (IL) and (b) crosstalk (CT) of the TE_0 mode at $4.23 \mu\text{m}$ and the TE_1 mode at $3.31 \mu\text{m}$ as a function of Δb

如图9(a)和(b)所示,当 Δb 从 -20 nm 增大到 20 nm 时,波长-模式解复用器的插入损耗和串扰均呈现先降低后升高的变化趋势,并在 $\Delta b = 0 \text{ nm}$ 时取得最优性能。对于O1端口输出的 $4.23 \mu\text{m}$ 的 TE_0 模式,插入损耗由 1.73 dB 降低至 0.36 dB ,随后增大至 1.915 dB ;串扰由 -16.55 dB 降低至 -26.8 dB ,随后增大至 -15.056 dB 。对于O2端口输出的 $3.31 \mu\text{m}$ 的 TE_1 模式,插入损耗由 2.029 dB 降低至 0.695 dB ,随后增大至 2.153 dB ;串扰由 -19.8 dB 降低至 -29.85 dB ,随后增大至 -17.745 dB 。表明正负方向的尺寸偏差均会导致插入损耗和串扰性能退化。

如图10(a)所示,当 Δb 从 -20 nm 增大到 20 nm 时,一维光子晶体波导在两个目标波长处的慢光增强因子均逐渐减小。其中, $4.23 \mu\text{m}$ 处模式1的慢光增强因子由 2.9 降低至 1.76 , $3.31 \mu\text{m}$ 处模式2的慢光增强因子由 5.36 降低至 3.34 。如图10(b)所示,当 Δb 从 -20 nm 增大到 0 nm 时, CH_4 的检测极限从 25.45 ppb 下降至 19.65 ppb , CO_2 的检测极限从 7.61 ppb 下降至 4.356 ppb 。当 Δb 从 0 nm 增大到 20 nm 时, CH_4 的检测极限从 19.65 ppb 上升至 22.49 ppb , CO_2 的检测极限从 4.356 ppb 上升至 4.6 ppb 。

针对支撑柱尺寸对器件性能的影响,本文分析了当支撑柱宽度 l_1 从 80 nm 增加到 160 nm 时,波长-模式解复用器性能以及悬浮一维光子晶体波导传感性能的变化规律。如图11所示,当 l_1 从 80 nm 增大到 160 nm ,O1端口输出 $4.23 \mu\text{m}$ 的 TE_0 模式时,插入损耗由 0.326 dB 增大到 0.48 dB ,串扰由 -27.76 dB 变化到

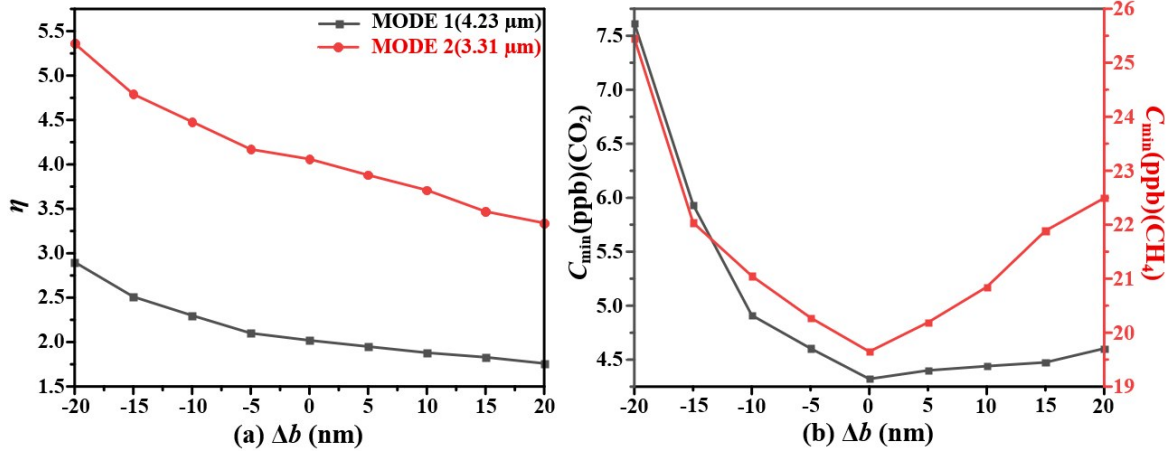


图10 (a) 波长为4.23 μm 的模式1和波长为3.31 μm 的模式2的慢光增强因子和(b)待测气体为 CO_2 和 CH_4 时检测极限 $C_{\min}$ 随 Δb 的变化情况

Fig. 10 (a) η for mode 1 at 4.23 μm and mode 2 at 3.31 μm , and (b) $C_{\min}$ for the CO_2 and CH_4 , as a function of Δb

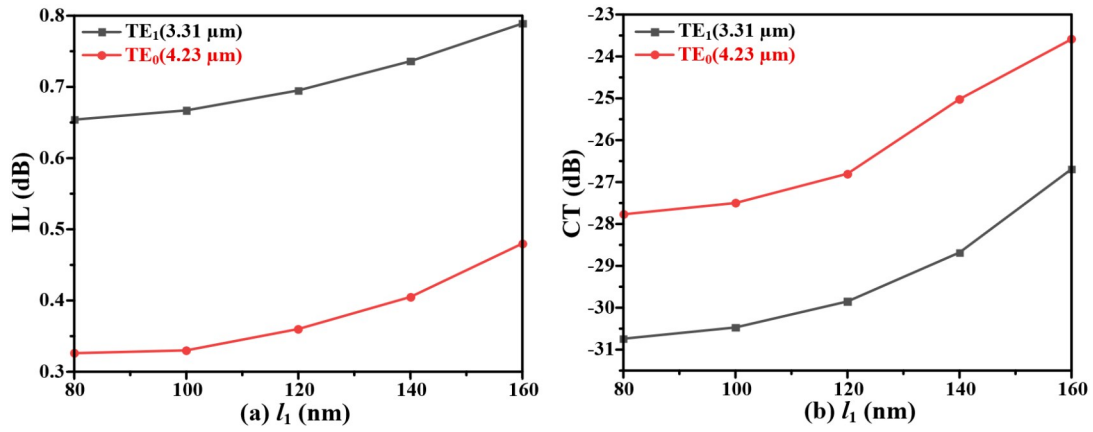


图11 O1和O2端口输出的波长为4.23 μm 的 TE_0 模式和3.31 μm 的 TE_1 模式的(a)插入损耗IL和(b)串扰CT随支撑柱宽度 L_1 的变化情况

Fig. 11 (a) Insertion loss (IL) and (b) crosstalk (CT) of the TE_0 mode at 4.23 μm and the TE_1 mode at 3.31 μm as a function of L_1

-23.6 dB; O2端口输出3.31 μm 的 TE_1 模式时,插入损耗由0.654 dB增大到0.79 dB,串扰由-30.74 dB变化到-26.69 dB。该结果表面,增大支撑柱宽度会对波长-模式解复用器的传输性能产生一定影响。

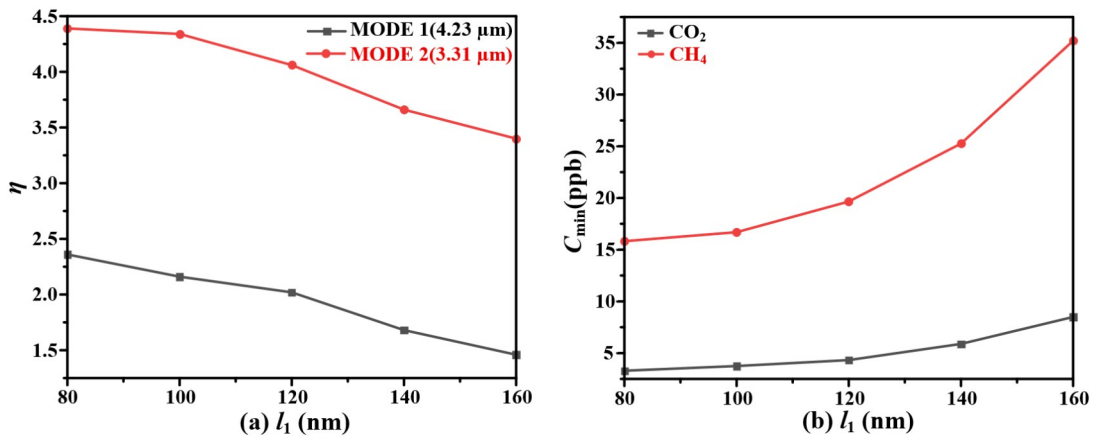


图12 (a) 波长为4.23 μm 的模式1和波长为3.31 μm 的模式2的慢光增强因子和(b)待测气体为 CO_2 和 CH_4 时检测极限 $C_{\min}$ 随支撑柱宽度 L_1 的变化情况

Fig. 12 (a) η for mode 1 at 4.23 μm and mode 2 at 3.31 μm , and (b) $C_{\min}$ for the CO_2 and CH_4 , as a function of L_1

支撑柱宽度 l_1 的变化也会影响一维光子晶体波导所支持的两种模式在目标波长处的慢光增强因子,进而影响传感器的检测极限。如图 12(a)所示,当 l_1 从 80 nm 增大至 160 nm 时,4.23 μm 处模式 1 的慢光增强因子由 2.36 降低至 1.45,3.31 μm 处模式 2 的慢光增强因子由 4.39 降低至 3.40。相应地,如图 12(b)所示,随着 l_1 从 80 nm 增大至 160 nm,一维光子晶体波导对 CO_2 的检测极限由 3.297 ppb 增加至 8.496 ppb,对 CH_4 的检测极限由 15.83 ppb 增加至 35.20 ppb。该结果表明,增大支撑柱宽度会削弱目标波长处的慢光增强效应,从而导致检测极限升高。

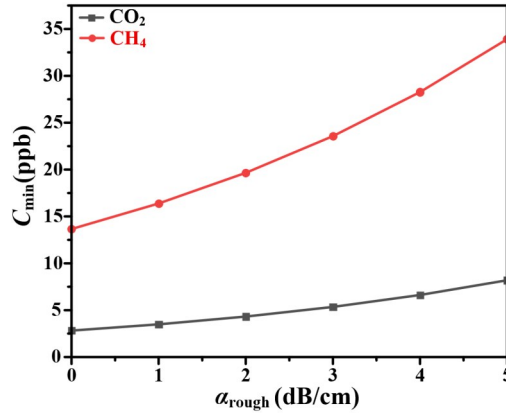


图 13 一维光子晶体波导对 CO_2 和 CH_4 的检测极限随 α_{rough} 的变化情况

Fig. 13 C_{min} of the one-dimensional photonic crystal waveguide for CO_2 and CH_4 as a function of α_{rough}

为进一步评估侧壁粗糙度对传感器检测性能的影响,本文将实际估算的传输损耗等效分解为理想结构下的本征损耗 α_{int} 和实际制造过程中由侧壁粗糙度引入的额外散射损耗 α_{rough} ,即 $\alpha = \alpha_{\text{int}} + \alpha_{\text{rough}}$ ^[32],其中, α_{int} 为理想结构下的传播损耗,包括材料吸收损耗、模式泄漏损耗以及光子晶体周期结构引入的辐射/散射损耗; α_{rough} 为实际制造过程中由侧壁粗糙度引入的附加损耗,其大小取决于制造工艺。为了细化侧壁粗糙度对检测极限的影响规律,计算了当 α_{rough} 从 0 增长到 5 dB/cm 时对检测极限的影响。如图 13 所示,随着 α_{rough} 从 0 增长到 5 dB/cm,一维光子晶体波导对 CO_2 的检测极限从 2.82 ppb 增加到 8.18 ppb,对 CH_4 的检测极限从 13.65 ppb 增加到 33.91 ppb。

3.3 比较与讨论

表 3 展示了所提出的传感阵列与其他中红外波导传感器在慢光增强因子 η 和检测极限 C_{min} 方面的比较情况。与其他的中红外波导传感器相比,本文提出的传感阵列能够在 3.31 μm 和 4.23 μm 处对 CH_4 和 CO_2 气体进行检测,同时,该传感阵列能够有效提升慢光增强因子 η 并降低检测极限 C_{min} 。这主要归因于目标工作波长被设计在慢光区域,在保证较高群折射率 n_g 的同时,避免了因过于靠近带边而引起的额外传播损耗;此外,由于去除了部分下包层材料,不仅扩大了光场与待测气体的接触区域,还降低了下包层材料吸收导致的损耗,从而进一步提升了光-气体相互作用强度,最终实现了较高的灵敏度和较低检测极限。

4 结论

本文提出、设计并分析了一种基于悬浮一维光子晶体波导的中红外气体传感阵列。该传感阵列由波长-模式解复用器和悬浮一维光子晶体传感波导组成。其中,悬浮一维光子晶体波导被设计为支持两种传输模式,通过优化其结构参数使相应的慢光区域与 CH_4 和 CO_2 的吸收光谱重叠,增强了光与气体的相互作用,从而提升传感器的检测性能。一维光子晶体波导在 3.31 μm 和 4.23 μm 处的慢光增强因子为 4.06 和 2.02。波长-模式解复用器基于 DBS 算法逆向设计,实现了 TE_0 模式下 4.23 μm 和 TE_1 模式下 3.31 μm 波长的分离,其插入损耗分别为 0.36 dB 和 0.695 dB,串扰分别为 -26.8 dB 和 -29.85 dB。传感阵列分别在 3.31 μm 和 4.23 μm 波长处以 CH_4 和 CO_2 作为待测气体时,检测极限分别为 19.65 ppb 和 4.356 ppb,灵敏度为 0.423 Wmol^{-1}L 和 1.925 Wmol^{-1}L 。

表3 所提出的传感阵列与其他中红外波导传感器之间的性能比较

Table 3 Performance comparison between the proposed sensor array and other MIR waveguide sensors

Refs.	Platform	Structure	$\lambda(\mu\text{m})$	Analyte	η	$C_{\min}$	Method
[9]	SOS	Ridge	4.23	CO_2	>0.25	2 ppm	Theoretical
[15]	Ge—OI	Slot	4.23	CO_2	0.452	627 ppb	Experimental
[23]	SOI	Strip	4.24	CO_2	0.44	1000 ppm	Experimental
[26]	Ge—OI	Ge—PCW	4.23	CO_2	4.98	7.56 ppm	Experimental
[38]	SOS	Slot	3.315	CH_4	0.486	0.25 ppb	Theoretical
[39]	SOI	Strip	4.23	CO_2	0.16	500 ppm	Experimental
[40]	SOI	Ridge	3.291	CH_4	0.23	78 ppm	Experimental
[41]	ChG—OI	Slot	3.291	CH_4	0.446	3.87 ppm	Theoretical
[42]	SiN on Si	2D PCW	4.345	CO_2	1.06	1 ppm	Experimental
[43]	SOI	Slot	3.27	CH_4	0.69	300 ppb	Experimental
[44]	SOI	SCSWG ^b	3.67	CH_4	0.6	53.6 ppb	Theoretical
This work	SOI	1D—PCW	3.31	CH_4	4.06	19.65 ppb	Theoretical
			4.23	CO_2	2.02	4.356 ppb	

^aBloch Slot Waveguides^bSymmetric Cross—Slot Waveguide

参考文献

- [1] WU Jingwen, YUE Gongcheng, CHEN Weicheng, et al. On-chip optical gas sensors based on group-IV materials[J]. ACS photonics, 2020, 7(11): 2923–2940.
- [2] CUI Ruyue, HAN Wenfei, WANG Chenglong, et al. Spatially engineered optical-acoustic matching in quartz-enhanced photoacoustic spectroscopy[J]. Photoacoustics, 2026, 48: 100811.
- [3] GUTIERREZ-ARROYO A, BAUDET E, BODIOU L, et al. Theoretical study of an evanescent optical integrated sensor for multipurpose detection of gases and liquids in the Mid-Infrared[J]. Sensors and Actuators B: Chemical, 2017, 242: 842–848.
- [4] ZHENG Chuantao, PI Mingquan, SONG Fang, et al. Recent progress in infrared absorption spectroscopy for gas sensing with discrete optics, hollow-core fibers and on-chip waveguides[J]. Journal of Lightwave Technology, 2023, 41(13): 4079–4096.
- [5] POPA D, UDREA F. Towards integrated mid-infrared gas sensors[J]. Sensors, 2019, 19(9): 2076.
- [6] DINH T V, CHOI I Y, SON Y S, et al. A review on non-dispersive infrared gas sensors: Improvement of sensor detection limit and interference correction[J]. Sensors and Actuators B: Chemical, 2016, 231: 529–538.
- [7] BUTT M A, PIRAMIDOWICZ R. Integrated photonic sensors for the detection of toxic gasses—a review[J]. Chemosensors, 2024, 12(7): 143.
- [8] KUMARI B, BARH A, VARSHNEY R K, et al. Silicon-on-nitride slot waveguide: A promising platform as mid-IR trace gas sensor[J]. Sensors and Actuators B: Chemical, 2016, 236: 759–764.
- [9] BUTT M A, DEGTYAREV S A, KHONINA S N, et al. An evanescent field absorption gas sensor at mid-IR 3.39 μm wavelength[J]. Journal of Modern Optics, 2017, 64(18): 1892–1897.
- [10] TOMBEZ L, ZHANG E, ORCUTT J S, et al. Methane absorption spectroscopy on a silicon photonic chip[J]. Optica, 2017, 4(11): 1322–1325.
- [11] Xu Guizhen, Wang Jin, Ji Qizheng, et al. Design and analysis of slow-light Bloch slot waveguides for on-chip gas sensing[J]. Journal of the Optical Society of America B, 2020, 37(2): 257–263.
- [12] CHANDRA V, RANJAN R. Performance analysis of different slot waveguide structures for evanescent field based gas sensor applications[J]. Optical and Quantum Electronics, 2021, 53(8): 457.
- [13] ZEGADI R, LORRAIN N, BODIOU L, et al. Enhanced mid-infrared gas absorption spectroscopic detection using chalcogenide or porous germanium waveguides[J]. Journal of Optics, 2021, 23(3): 035102.
- [14] LIM J, SHIM J, KIM I, et al. Low-loss and high-confinement photonic platform based on germanium-on-insulator at mid-infrared range for optical sensing[J]. Journal of Lightwave Technology, 2023, 41(9): 2824–2833.
- [15] LIM J, SHIM J, KIM I, et al. Ultrasensitive mid-infrared optical gas sensor based on germanium-on-insulator photonic circuits with limit-of-detection at sub-ppm level[J]. ACS Photonics, 2024, 11(10): 4268–4278.
- [16] Pi Mingquan, Zheng Chuantao, Zhao Huan, et al. Ultra-wideband mid-infrared chalcogenide suspended nanorib waveguide gas sensors with exceptionally high external confinement factor beyond free-space[J]. ACS Nano, 2023, 17: 17761–17770.

- [17] BUTT M A, PIRAMIDOWICZ R. Suspended slot membrane waveguide based on germanium-on-silicon-on-insulator at $\lambda = 4.23 \mu\text{m}$ for CO_2 monitoring[J]. Micromachines, 2024, 15(12): 1434.
- [18] Lin Pensheng, QUELLMALZ A, PARHIZKAR S, et al. Atmospheric-level carbon dioxide gas sensing using low-loss mid-IR silicon waveguides[J]. Optics Express, 2025, 33(2): 3511-3521.
- [19] Lin Pensheng, HELLSTRÖM P E, ZERVOS C, et al. Suspended germanium-on-silicon photonic integrated circuits operating in the long-wave infrared and their use for ethanol sensing[J]. ACS Photonics, 2026, 13: 2637-2644.
- [20] GERVAIS A, JEAN P, SHI Wei, et al. Design of slow-light subwavelength grating waveguides for enhanced on-chip methane sensing by absorption spectroscopy[J]. IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics, 2018, 25(3): 1-8.
- [21] Peng Zihang, Huang Yijun, Zheng Kaiyuan, et al. Slow-light-enhanced on-chip 1D and 2D photonic crystal waveguide gas sensing in near-IR with an ultrahigh interaction factor[J]. Photonics Research, 2023, 11(10): 1647-1656.
- [22] Pi Mingquan, Zheng Chuantao, Bi Ran, et al. Design of a mid-infrared suspended chalcogenide/silica-on-silicon slot-waveguide spectroscopic gas sensor with enhanced light-gas interaction effect[J]. Sensors and Actuators B: Chemical, 2019, 297: 126732.
- [23] OTTONELLO-BRIANO F, ERRANDO-HERRANZ C, RÖDJEĞÅRD H, et al. Carbon dioxide absorption spectroscopy with a mid-infrared silicon photonic waveguide[J]. Optics Letters, 2019, 45(1): 109-112.
- [24] YOO K M, MIDKIFF J, ROSTAMIAN A, et al. InGaAs membrane waveguide: a promising platform for monolithic integrated mid-infrared optical gas sensor[J]. ACS sensors, 2020, 5(3): 861-869.
- [25] VLK M, DATTA A, ALBERTI S, et al. Extraordinary evanescent field confinement waveguide sensor for mid-infrared trace gas spectroscopy[J]. Light: Science & Applications, 2021, 10(1): 26.
- [26] KIM I, LIM J, SHIM J, et al. Freestanding germanium photonic crystal waveguide for a highly sensitive and compact mid-infrared on-chip gas sensor[J]. ACS sensors, 2024, 9(10): 5116-5126.
- [27] CHARRIER J, BRANDILY M L, LHERMITE H, et al. Evanescent wave optical micro-sensor based on chalcogenide glass[J]. Sensors and Actuators B: Chemical, 2012, 173: 468-476.
- [28] 皮明权, 郑传涛, 梁磊, 等. 片上红外气体传感技术的研究进展 (特邀)[J]. 光子学报, 2023, 52(3): 0352106.
- [29] EK S, LUNNEMANN P, CHEN Yaohui, et al. Slow-light-enhanced gain in active photonic crystal waveguides[J]. Nature Communications, 2014, 5(1): 5039.
- [30] KASPAR P, KAPPELER R, ERNI D, et al. Average light velocities in periodic media[J]. Journal of the Optical Society of America B, 2013, 30(11): 2849-2854.
- [31] ZOU Yi, CHAKRAVARTY S, CHUNG Chijui, et al. Mid-infrared silicon photonic waveguides and devices[J]. Photonics Research, 2018, 6(4): 254-276.
- [32] Zhang Dong, Liao Jie, Wang Pengjun, et al. Broadband and high-enhancement-factor integrated long-wave infrared sensor using the photonic crystal assisted subwavelength grating waveguide[J]. Journal of the Optical Society of America B, 2024, 41(5): 1170-1179.
- [33] Payne F P, Lacey J P R. A theoretical analysis of scattering loss from planar optical waveguides[J]. Optical and Quantum Electronics, 1994, 26(10): 977-986.
- [34] GORDON I E, ROTHMAN L S, HARGREAVES R J, et al. The HITRAN2024 molecular spectroscopic database[J]. Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, 2026: 109807.
- [35] DUONG DINH T T, LE ROUX X, KOOMPAI N, et al. Mid-infrared Fourier-transform spectrometer based on meta-material lateral cladding suspended silicon waveguides[J]. Optics letters, 2022, 47(4): 810-813.
- [36] PENADES J S, ORTEGA-MOÑUX A, NEDELJKOVIC M, et al. Suspended silicon mid-infrared waveguide devices with subwavelength grating metamaterial cladding[J]. Optics express, 2016, 24(20): 22908-22916.
- [37] KUMARI B, VARSHNEY R K, PAL B P. Design of chip scale silicon rib slot waveguide for sub-ppm detection of N_2O gas at mid-IR band[J]. Sensors and Actuators B: Chemical, 2018, 255: 3409-3416.
- [38] JOSHI K, MEENA B L, GEHLOT K. Universal multigas evanescent field absorption sensor in mid IR based on SOS slot waveguide[J]. Optical and Quantum Electronics, 2025, 57(1): 93.
- [39] RANACHER C, CONSANI C, VOLLERT N, et al. Characterization of evanescent field gas sensor structures based on silicon photonics[J]. IEEE Photonics Journal, 2018, 10(5): 1-14.
- [40] Zhao Huan, Zheng Chuantao, Pi Mingquan, et al. On-chip mid-infrared silicon-on-insulator waveguide methane sensor using two measurement schemes at $3.291 \mu\text{m}$ [J]. Frontiers in chemistry, 2022, 10: 953684.
- [41] Pi Mingquan, Zheng Chuantao, Peng Zihang, et al. Theoretical study of microcavity-enhanced absorption spectroscopy for mid-infrared methane detection using a chalcogenide/silica-on-fluoride horizontal slot-waveguide racetrack resonator[J]. Optics Express, 2020, 28(15): 21432-21446.
- [42] SALAJ J, VLK M, ZAKOLDAEV R, et al. Suspended nanophotonic waveguide for isotope-specific CO_2 detection[J]. Optica, 2024, 11(12): 1654-1662.

- [43] YALLEW H D, VLK M, DATTA A, et al. Sub-ppm methane detection with mid-infrared slot waveguides[J]. *ACS photonics*, 2023, 10(12): 4282-4289.
- [44] KUMAR H, SONI N, YADAV J. Chip-scale Ge_{1-x}Sn_x-based uniform cross-slot optical waveguide sensors for methane detection in the mid-infrared region[J]. *Journal of the Optical Society of America B*, 2025, 42(9): 1907-1917.

Mid-infrared gas sensor array based on suspended one-dimensional photonic crystal waveguides

DENG Lipeng¹, Tang Yi¹, MENG Fanlong¹, WANG Pengjun², CHEN Weiwei^{*}

(1 Faculty of Information Science and Engineering, Ningbo University, Ningbo 315211, China)

(2 College of Electrical and Electronic Engineering, Wenzhou University, Wenzhou 325035, China)

Abstract: Most gas molecules have characteristic absorption peaks in the mid-infrared spectral range, which can be used to analyze the type and concentration of gases. By reducing the group velocity of light, photonic crystal waveguide sensors enhance the interaction strength between light and gas molecules, thereby lowering the limit of detection and improving the sensitivity of the sensor. However, most currently reported photonic crystal waveguides are designed for single-gas detection. Limited by their operating bandwidth, their working spectral range cannot cover the characteristic absorption peaks of multiple gases, which limits their ability to detect multiple gases. Therefore, this work proposed a mid-infrared gas sensor array based on suspended one-dimensional photonic crystal waveguides. The proposed one-dimensional photonic crystal waveguides support two transmission modes, and their slow-light operating ranges match the characteristic absorption wavelengths of methane and carbon dioxide, respectively, thus allowing both gases to be detected. In this work, the Lumerical FDTD software is used to simulate and analyze the performance of the proposed sensor array. According to the Beer-Lambert law, the limit of detection and sensitivity of the sensor are mainly determined by the slow-light enhancement factor and the propagation loss. Therefore, by adjusting the structural parameters of the one-dimensional photonic crystal waveguide, high slow-light enhancement factors can be achieved for the two transmission modes at 3.31 μm and 4.23 μm , while keeping the two target wavelengths sufficiently away from the photonic band edge, thereby reducing the propagation loss. Furthermore, the wavelength-mode demultiplexer is designed and optimized by using the direct binary search (DBS) algorithm. When TE_0 modes at wavelengths of 4.23 μm and 3.31 μm are input into the device, they are directed to different output ports. Meanwhile, the TE_0 mode at 3.31 μm is converted into the TE_1 mode. On one hand, by adjusting the width and air hole radius of the one-dimensional photonic crystal waveguide, the slow-light operating regions of mode 1 and mode 2 are matched to the absorption peaks of carbon dioxide and methane, respectively. On the other hand, by removing the lower cladding on the underside of the proposed sensor array, the contact area between the evanescent field and the target gas is further increased. Finally, high slow-light enhancement factors are achieved by the proposed sensor array at 4.23 μm and 3.31 μm . Furthermore, the wavelength-mode demultiplexer was optimized using the DBS algorithm, enabling the device to separate the TE_0 mode at 4.23 μm from the TE_1 mode at 3.31 μm while being compact. Compared with other mid-infrared gas sensors designed for methane and carbon dioxide, the proposed sensor array can detect methane at 3.31 μm and carbon dioxide at 4.23 μm , and achieves both high slow-light enhancement factors and the low limit of detection. In summary, this work proposed, designed, and analyzed a mid-infrared gas sensor array based on suspended one-dimensional photonic crystal waveguides. By optimizing the structure of the one-dimensional photonic crystal waveguide, the array achieves slow-light enhancement factors of 2.02 at 4.23 μm and 4.06 at 3.31 μm , respectively. After optimization with the DBS algorithm, the wavelength-mode demultiplexer achieves insertion losses of 0.36 dB and 0.695 dB, with corresponding crosstalk values of -26.8 dB and -29.85 dB. Simulation results show that, with methane and carbon dioxide as the target gases, the limits of detection are 19.65 ppb and 4.356 ppb, and the sensitivities are 0.423 Wmol^{-1}L and 1.925 Wmol^{-1}L , respectively. Based on the above performance, the proposed sensor array can serve as a reference for the design of sensors for multi-gas detection.

Key words: Integrated Optics; Optical Waveguide Sensor Array; Mid-Infrared; Slow Light Enhancement

Factor

OCIS Codes: 130.5296; 130.6010; 230.7370; 300.6340

CSTR: 32255.14.gzxb20265508.0828002