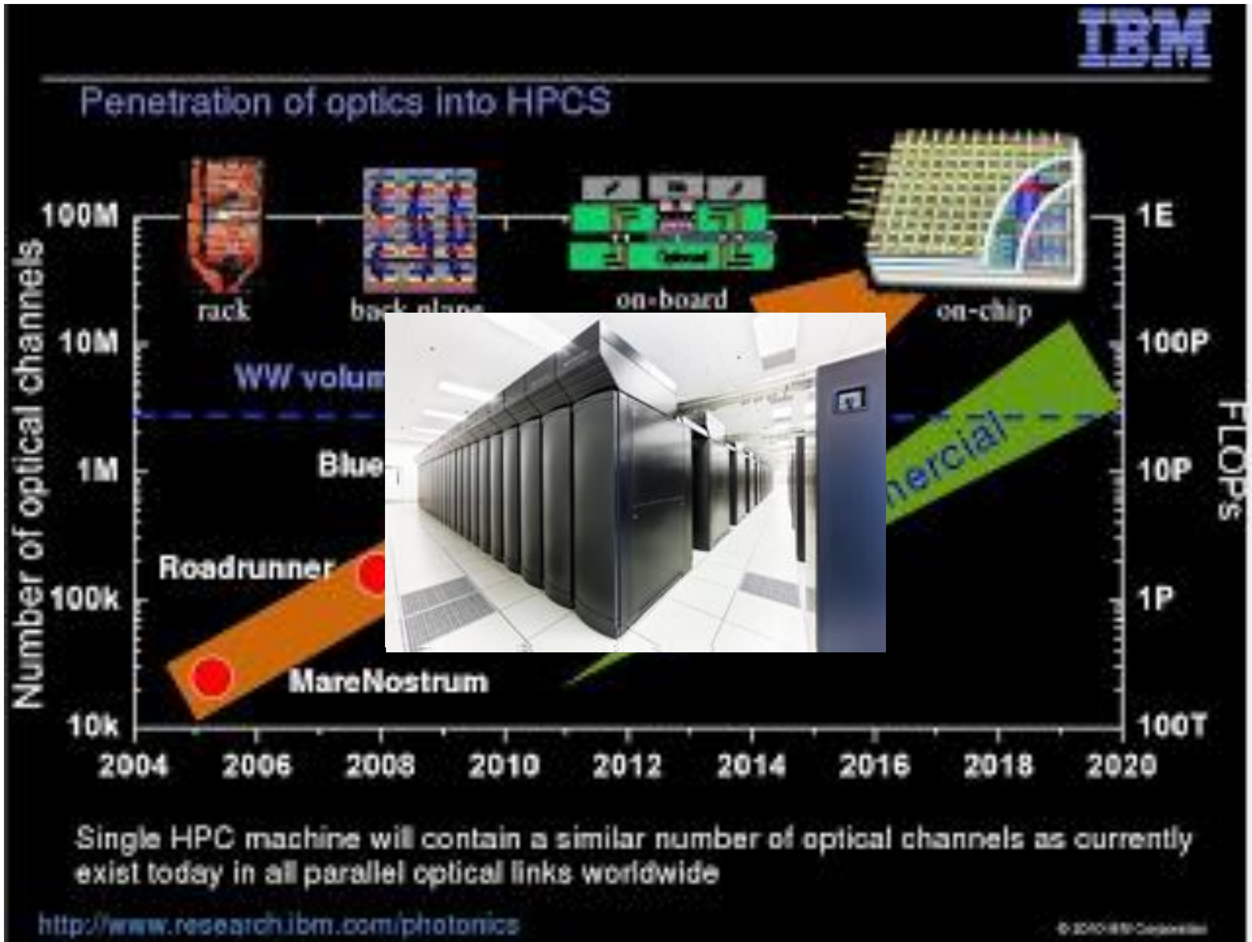
Fyzikální ústav
Akademie věd ČR, v. v. i.

COMSOL
Setkání uživatelů 2016

MODELOVÁNÍ PLANÁRNÍHO VLNOVODU S ABSORPČNÍ VRSTVOU

Vít Jirásek, Zdeněk Remeš, Václav Prajzler
Fyzikální ústav Akademie Věd České republiky

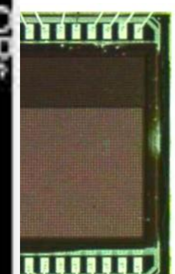
Hydrogenovaný amorfní křemík pro vlnovody

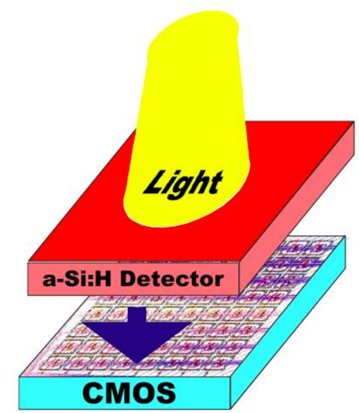


al.)

ated Circuits

yrsch et al., Sensors, 2008

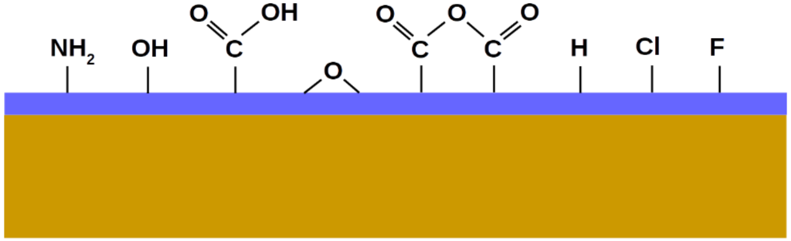




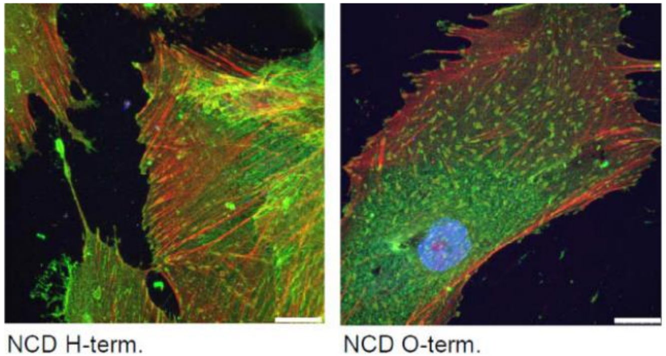
- degradace v nepříznivých podmínkách – nutnost ochrany

Vrstvy nanokrystalického diamantu

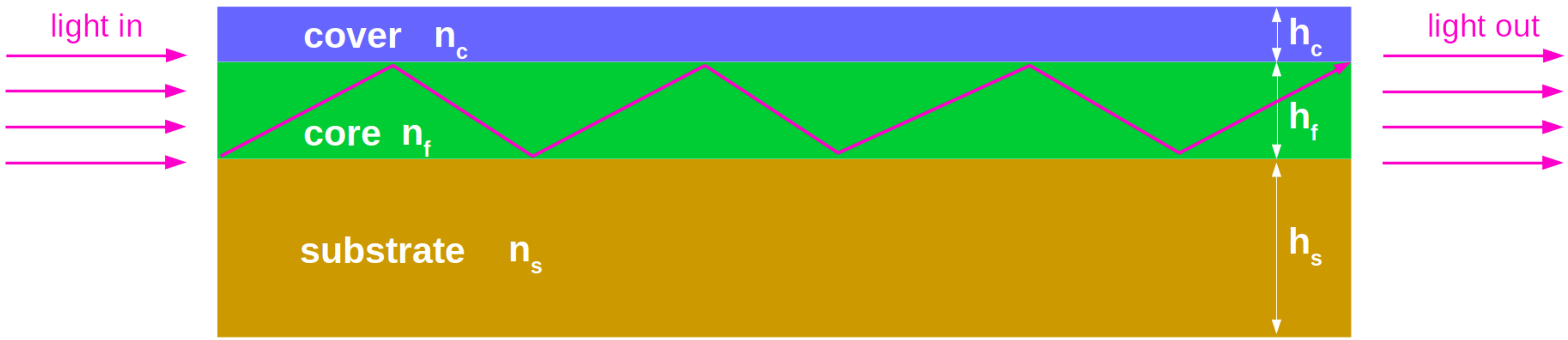
- MWCVD – chemická depozice z par podpořená MW plazma
- ochranná vrstva:
  - extrémně tvrdá
  - chemicky intertní
  - vysoce tepelně vodivá
- NCD funkcionalizace
  - smáčivost
  - el. vodivost
  - linkery



- bio-compatibilita



Planární optický vlnovod (POWG)



podmínky šíření světla: $n_c < n_f > n_s$

+ příčná rezonance

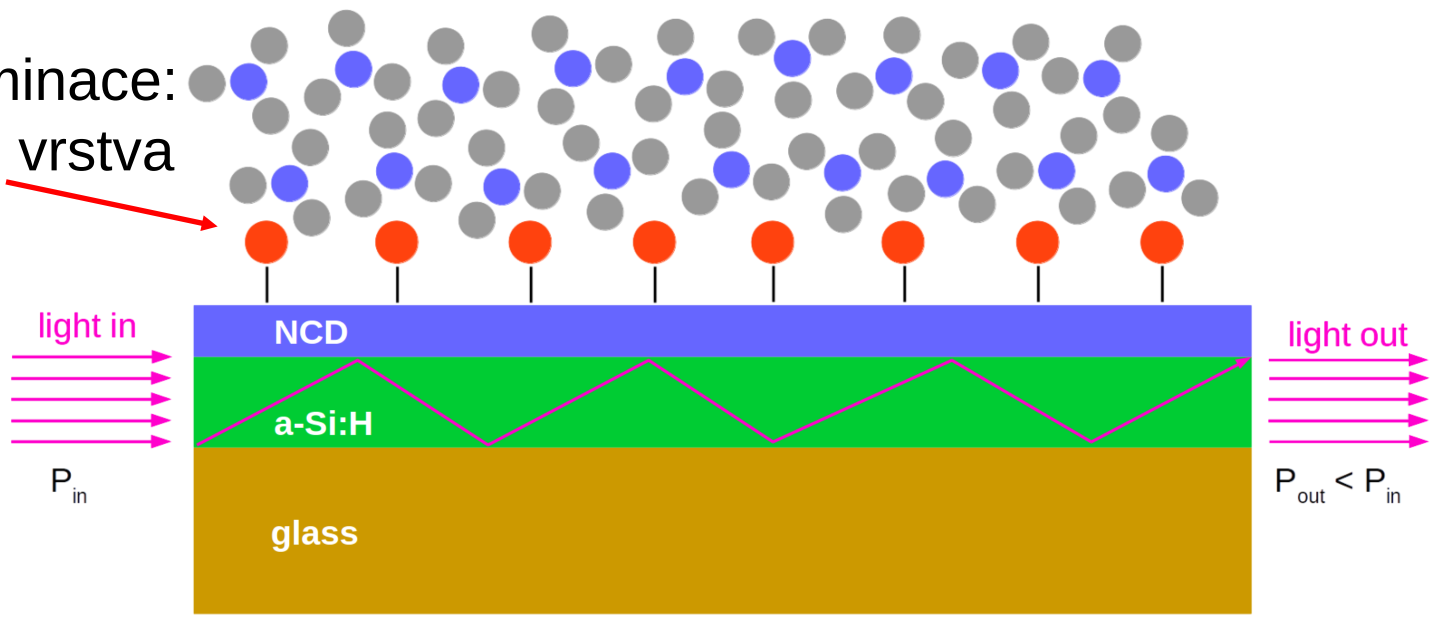
- <u>mode</u>: a stable field distribution in the propagation direction with only a periodic transverse dependence
  - TE a TM módy = s- nebo p-polarizace
- jednomódový vlnovod (single-mode): λ, h_f, n_i

POWG pokryté NCD diamantem

NCD-POWG adsorption monitor

adsorbed molecules

povrchová terminace:
funkční citlivá vrstva



- absorpční vrstva (několik nm): páry & kapaliny
- zeslabení optického signálu
- integrace & citlivost

Řešení modifikované disperzní rovnice

- model planárního vlnovodu: výška << šířka → 2D
- efektivní index lomu

$$\frac{2\pi h_f}{\lambda_0}\sqrt{n_f^2 - n_{eff}^2} = \arctan\left(p_{fs}\sqrt{\frac{n_{eff}^2 - n_s^2}{n_f^2 - n_{eff}^2}} \right) + \arctan\left(p_{fc}\sqrt{\frac{n_{eff}^2 - n_c^2}{n_f^2 - n_{eff}^2}} \right) + m\pi$$

$$m = 0,1,2\ldots$$

TE: $p_{fs} = p_{fc} = 1,$ TM: $p_{fs} = \frac{n_f^2}{n_s^2},$ $p_{fc} = \frac{n_f^2}{n_c^2},$

- bez optické absorpce

POWG design & simulace

disperzní rovnice → módová analýza (n_s , n_f , n_c ; λ)

h_f , n_{eff} ,
SM podmínky

0-D řešení

BM analýza

COMSOL

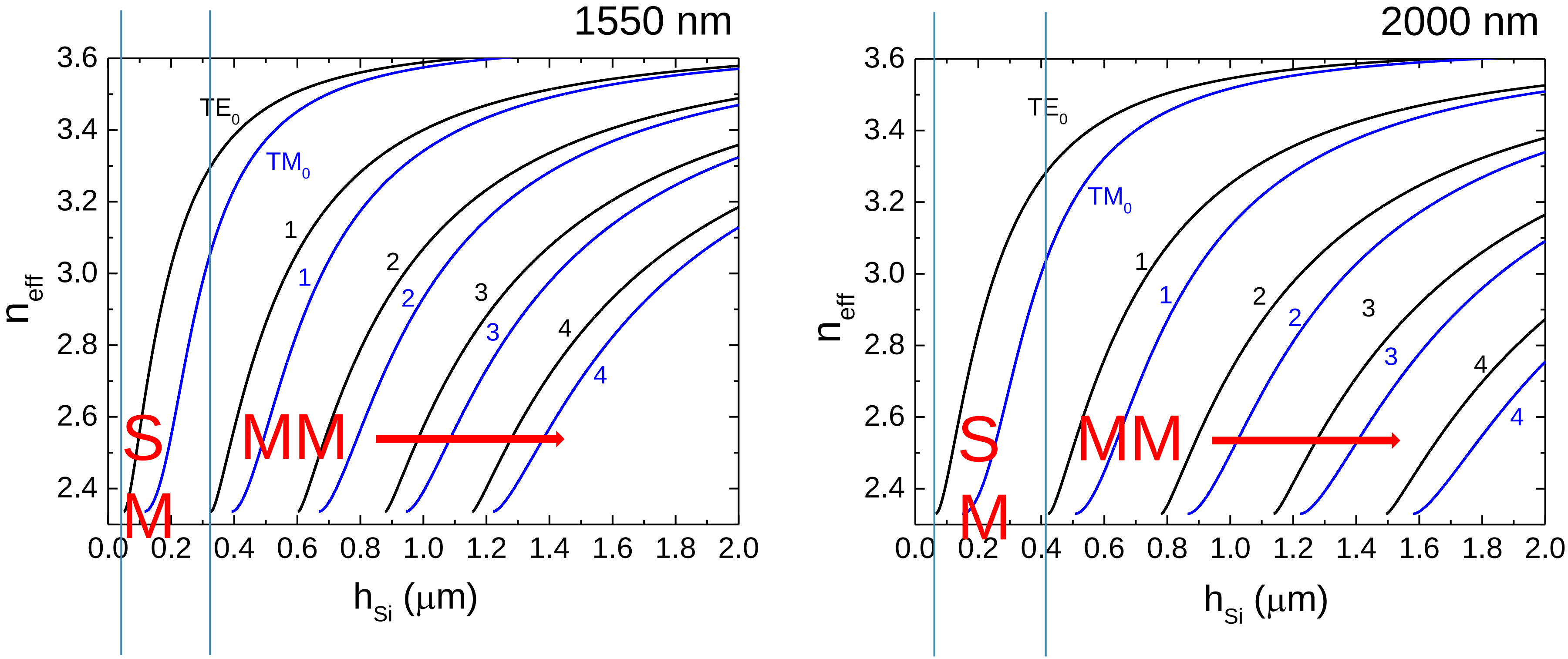
$\mathrm{h_{NCD}}$, $\mathrm{h_{abs}}$

FEM simulace
COMSOL

α_{Si} , α_{NCD} , α_{ads}

2-D EM pole
zeslabení signálu TE_0 módu

Výpočty módů



- 1-módový vlnovod pro 1550-2000 nm:
  h_{Si} =150-320 nm
- 280 nm zvoleno pro FEM simulace

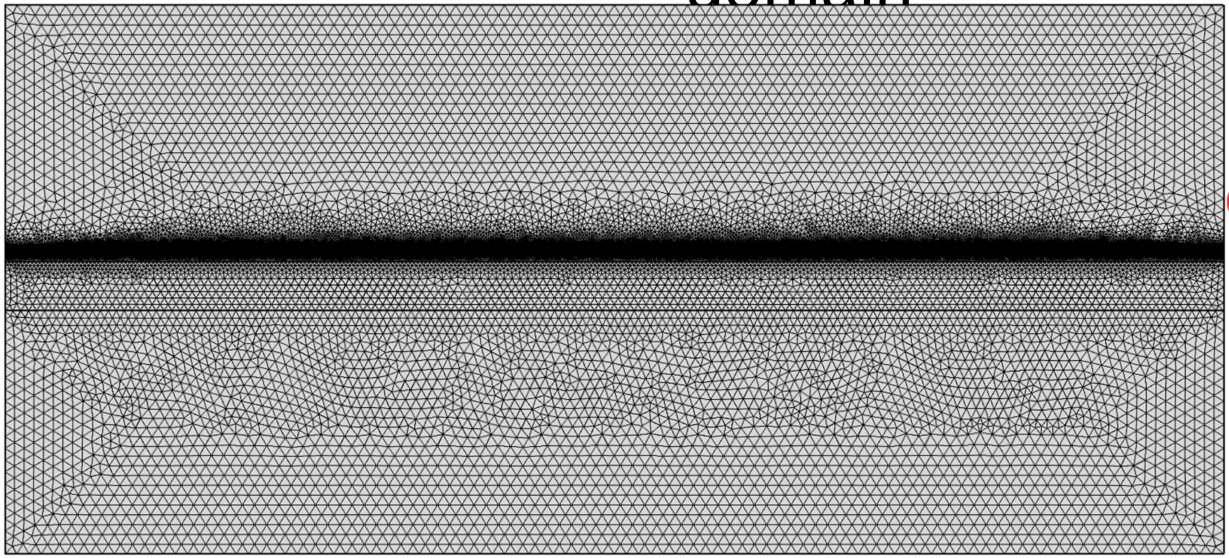
FEM simulace

- COMSOL Multiphysics (RF module, verze 4.4-5.0)

$$\nabla \times (\nabla \times \tilde{\mathbf{E}}) - k_0 \varepsilon_r \tilde{\mathbf{E}} = 0$$

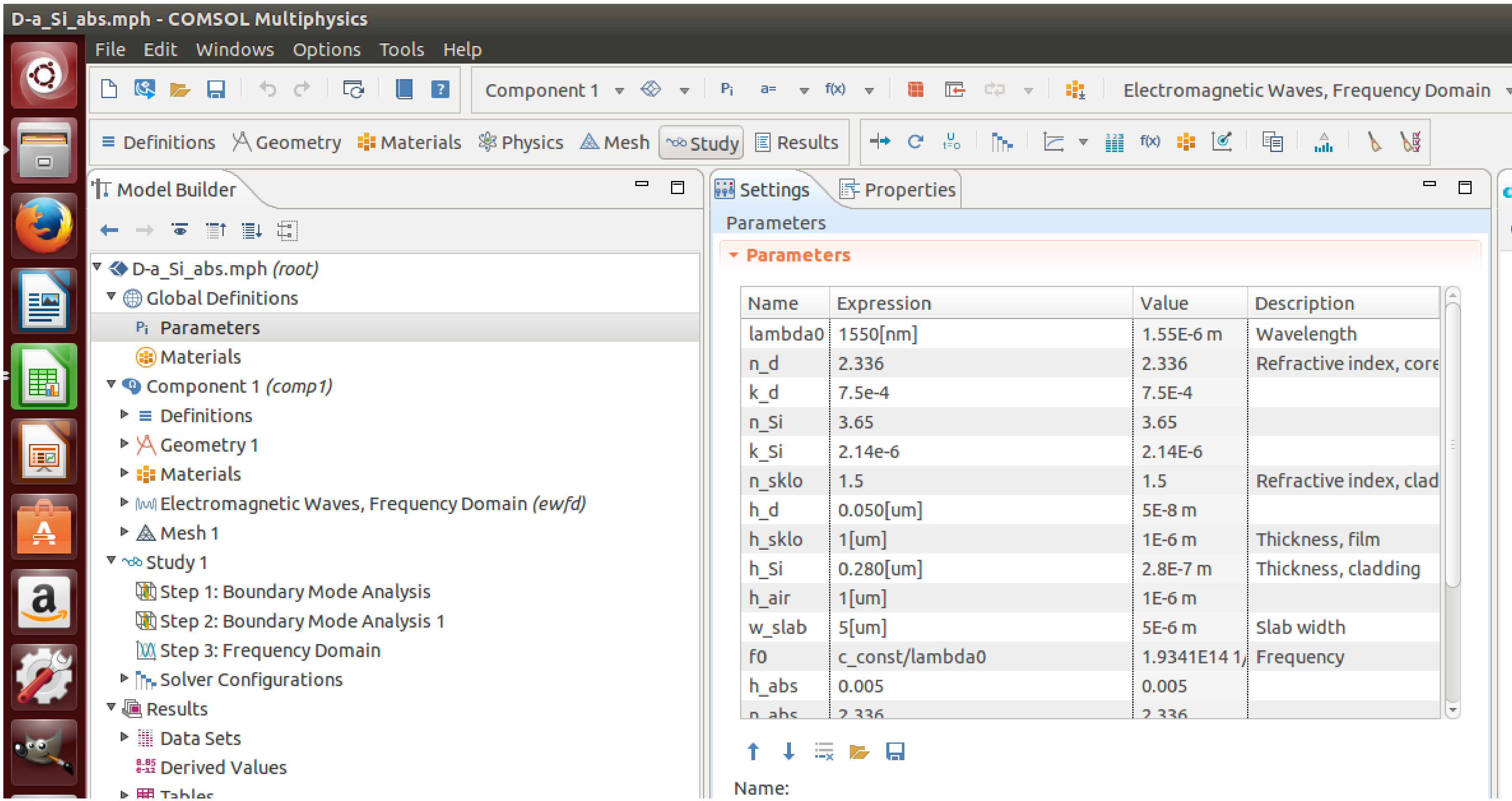
$$\tilde{\mathbf{E}}(x, y, z) = \tilde{\mathbf{E}}(x, y) \exp(-i k_z z)$$

- nemagnetické prostředí
- řešení ve frequency domain

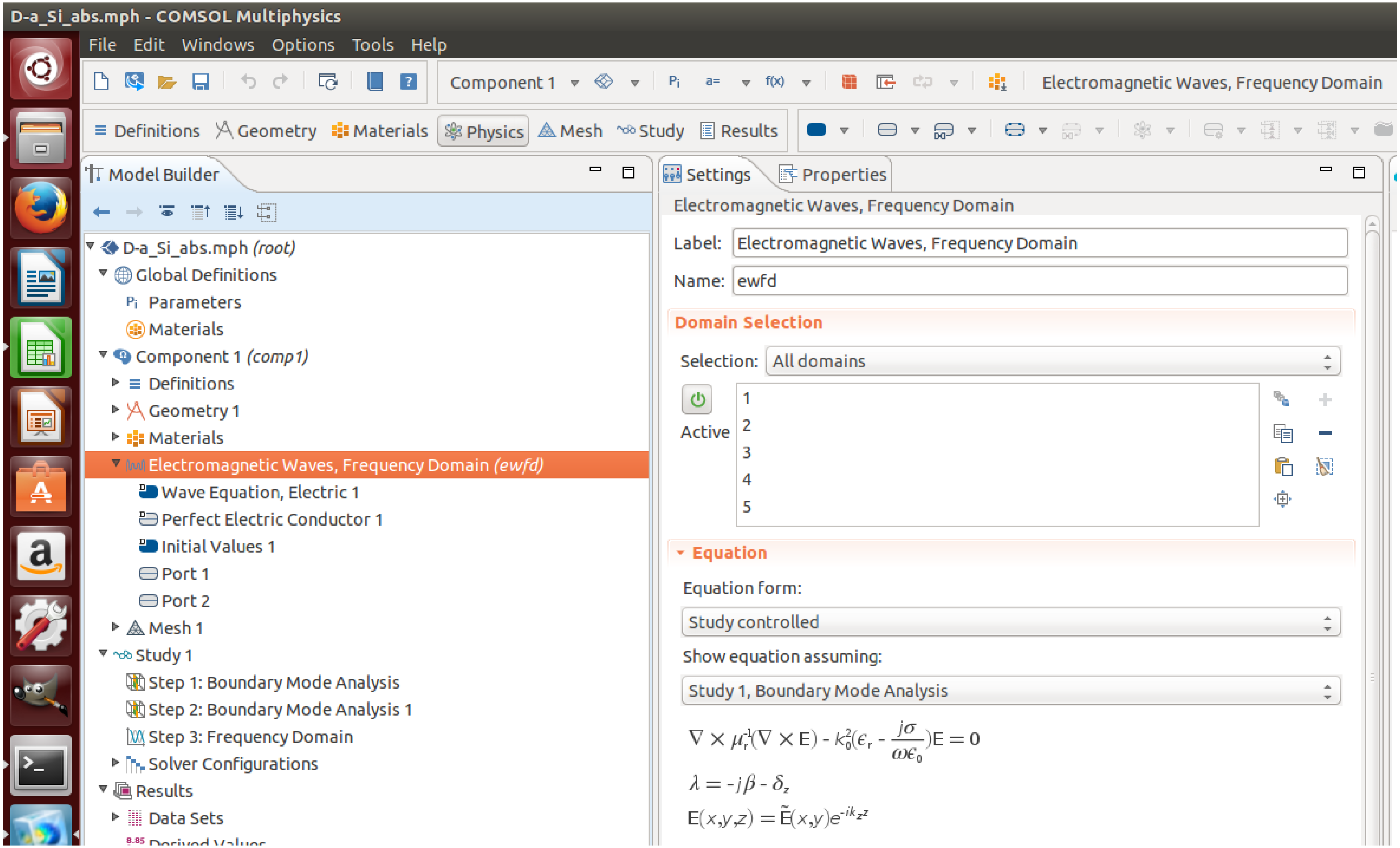


200-300 000 FEM elementů

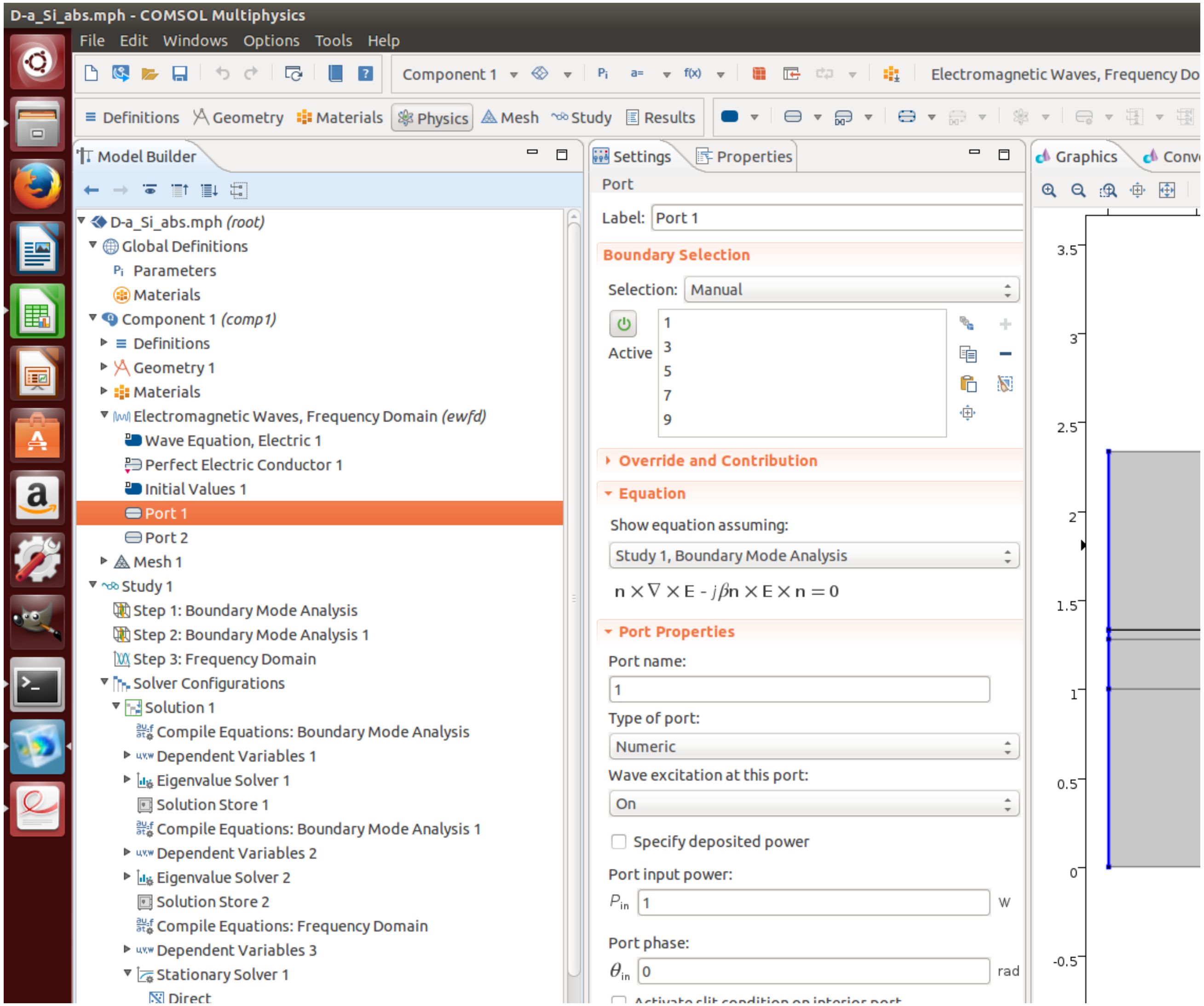
Definice, geometrie, parametry

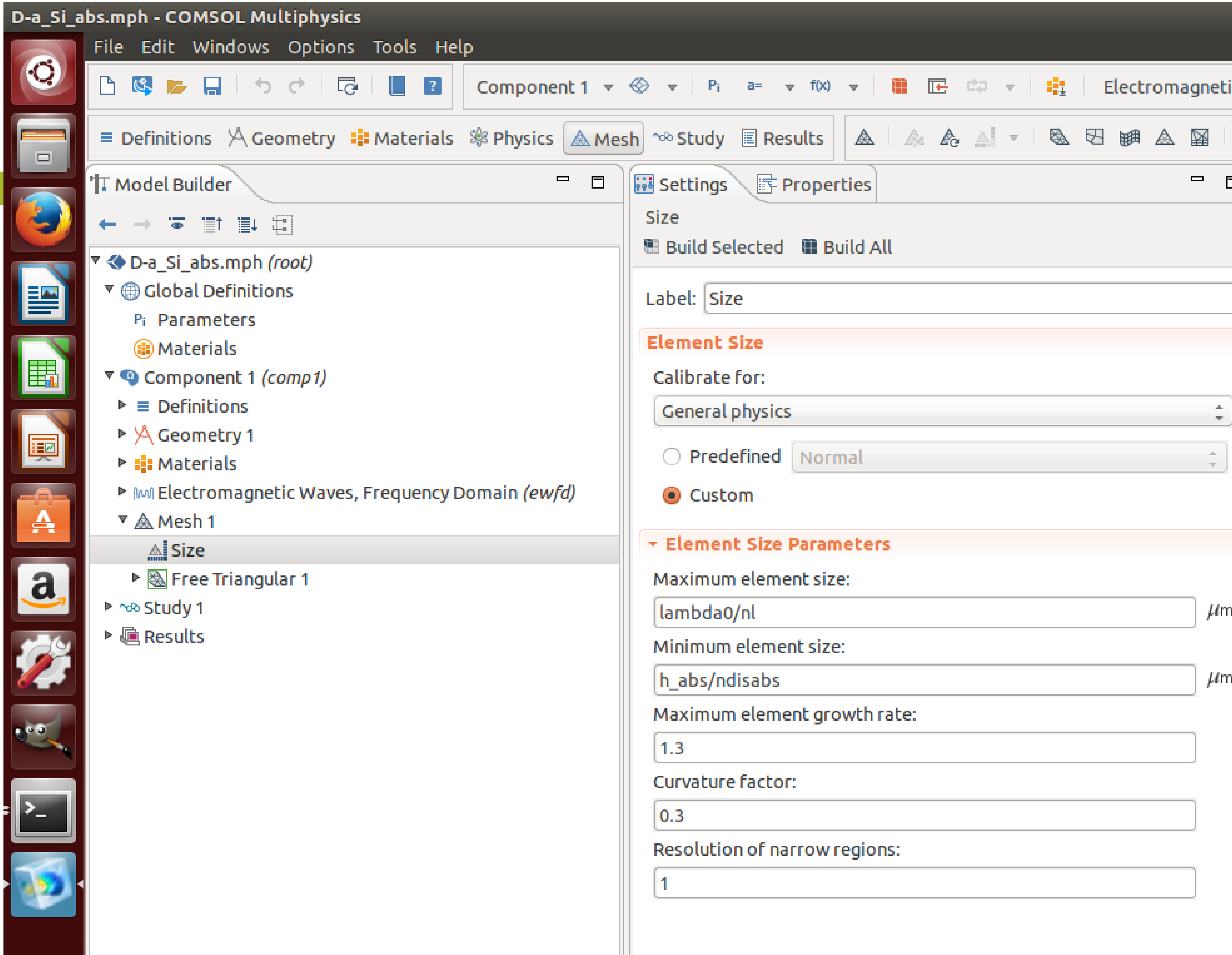


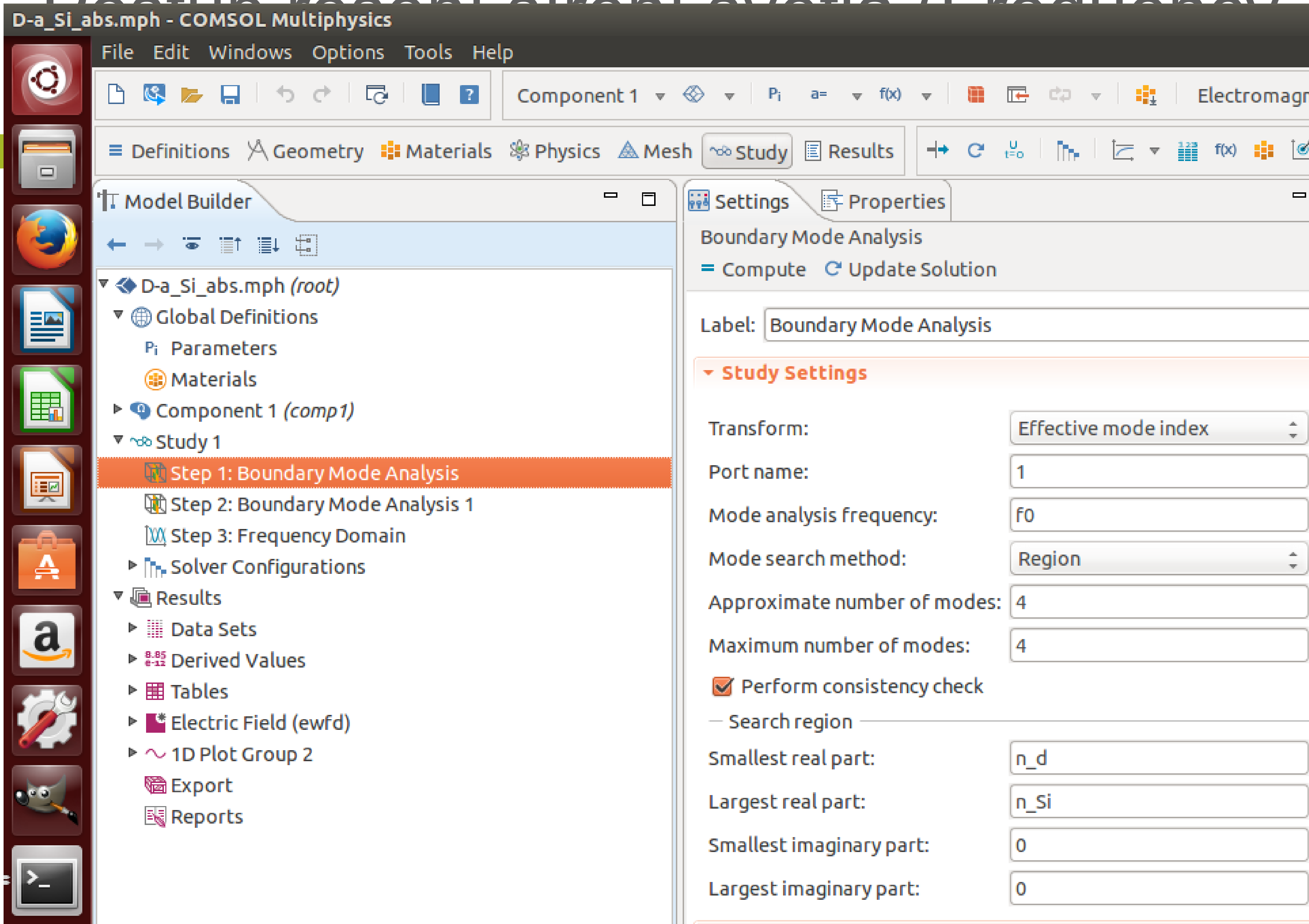
Definice, geometrie, parametry



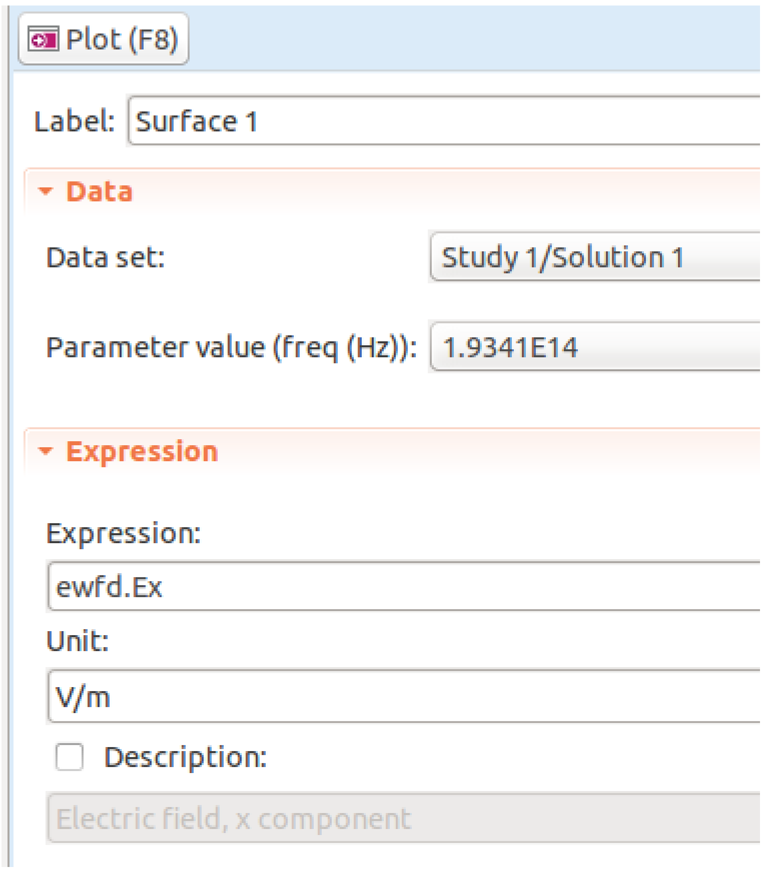
Okrajové podmínky

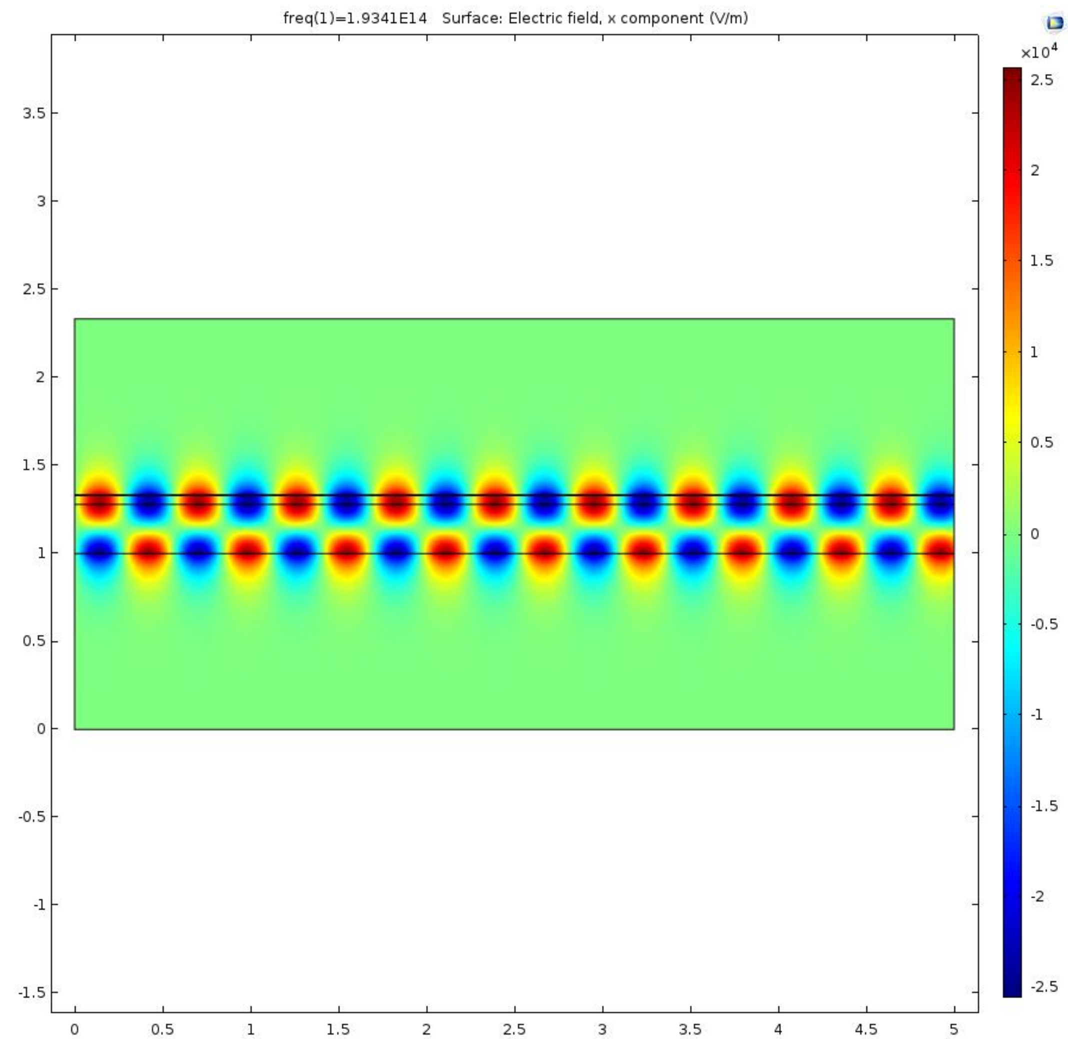



D-a_Si_abs.mph - COMSOL Multiphysics
File Edit Windows Options Tools Help
Component 1
Electromagnetic
Definitions Geometry Materials Physics Mesh Study Results
Model Builder
D-a_Si_abs.mph (root)
Global Definitions
Parameters
Materials
Component 1 (comp1)
Definitions
Geometry 1
Materials
Electromagnetic Waves, Frequency Domain (ewfd)
Mesh 1
Size
Free Triangular 1
Study 1
Results
Settings
Properties
Size
Build Selected
Build All
Label: Size
Element Size
Calibrate for:
General physics
Predefined
Normal
Custom
Element Size Parameters
Maximum element size:
lambda0/nl
µm
Minimum element size:
h_abs/ndisabs
µm
Maximum element growth rate:
1.3
Curvature factor:
0.3
Resolution of narrow regions:
1

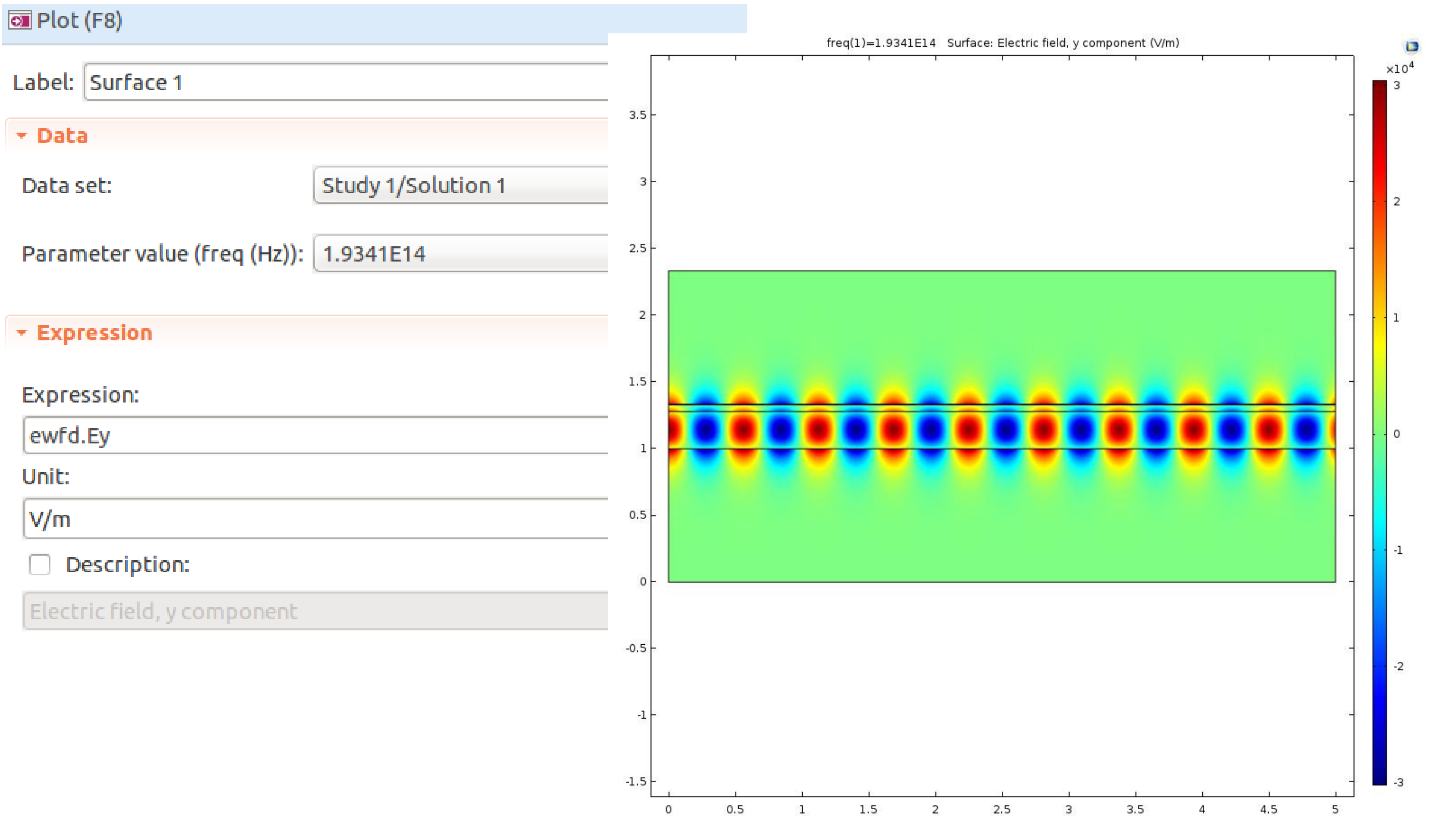

D-a_Si_abs.mph - COMSOL Multiphysics
File Edit Windows Options Tools Help
Component 1
Electromagne
Definitions Geometry Materials Physics Mesh Study Results
Model Builder
D-a_Si_abs.mph (root)
Global Definitions
Parameters
Materials
Component 1 (comp1)
Study 1
Step 1: Boundary Mode Analysis
Step 2: Boundary Mode Analysis 1
Step 3: Frequency Domain
Solver Configurations
Results
Data Sets
Derived Values
Tables
Electric Field (ewfd)
1D Plot Group 2
Export
Reports
Settings
Properties
Boundary Mode Analysis
Compute
Update Solution
Label: Boundary Mode Analysis
Study Settings
Transform: Effective mode index
Port name: 1
Mode analysis frequency: f0
Mode search method: Region
Approximate number of modes: 4
Maximum number of modes: 4
Perform consistency check
Search region
Smallest real part: n_d
Largest real part: n_Si
Smallest imaginary part: 0
Largest imaginary part: 0

Postprocessing

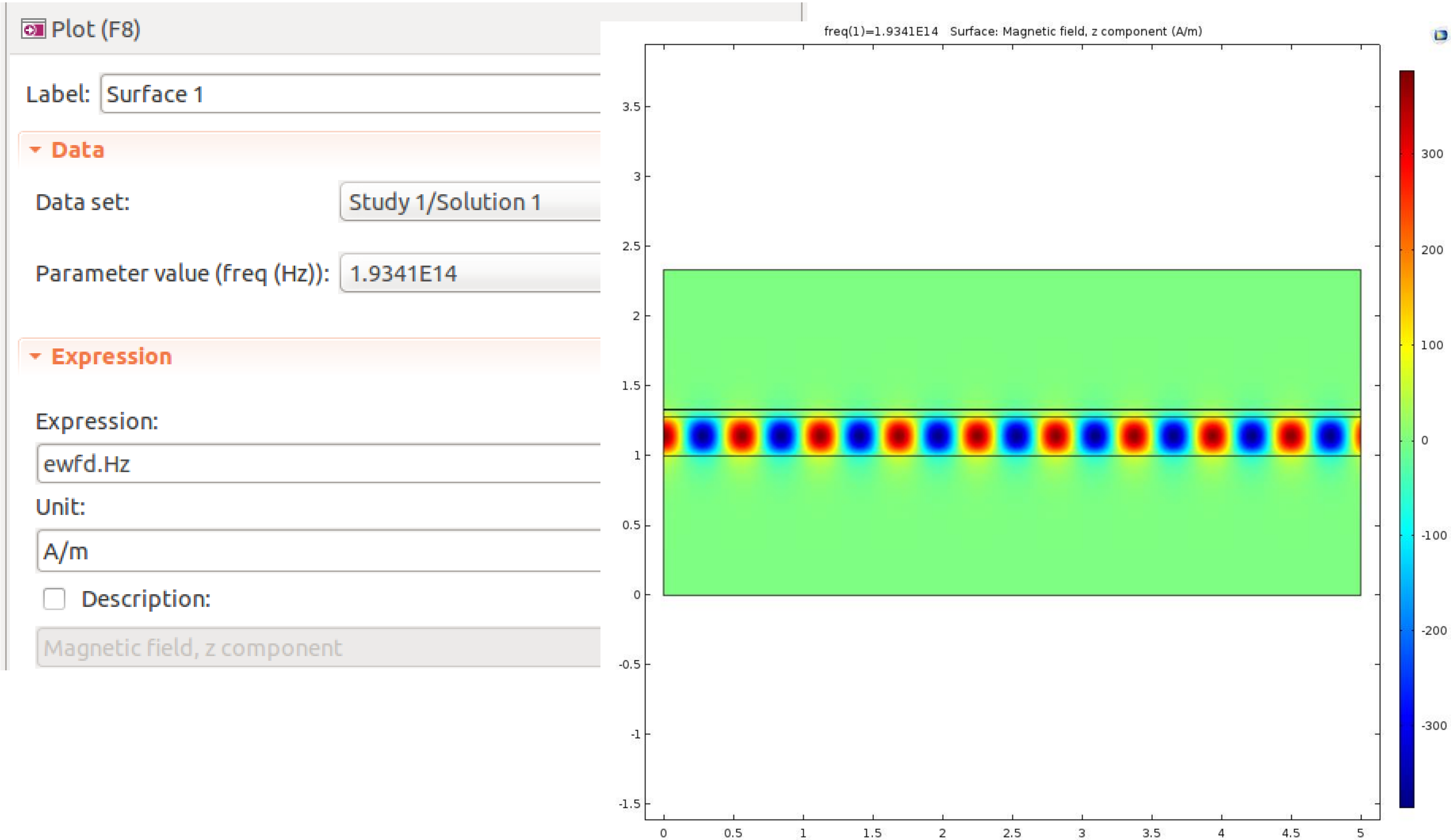




Postprocessing



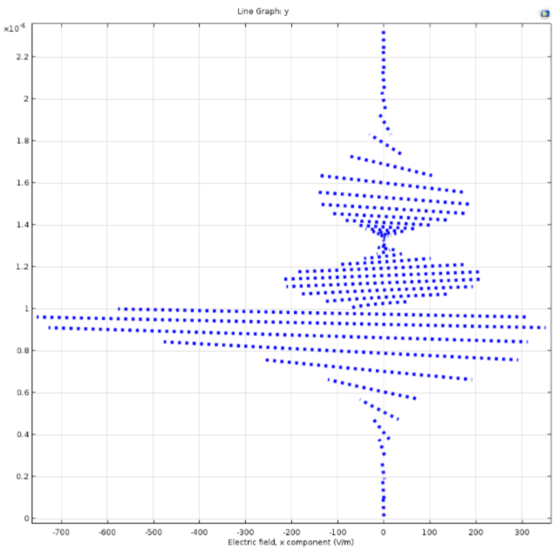
Postprocessing



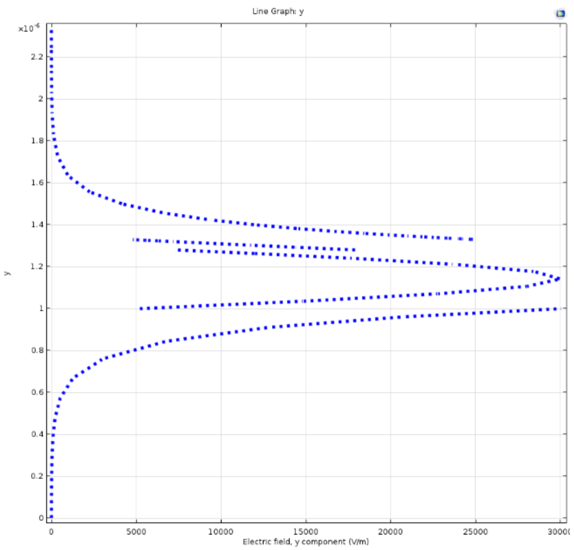
Postprocessing – profil módu

- mód TE_0
- $n_{eff} = 3.026$
- podél Portu 1
- dostupné až po vyřešení celé struktury

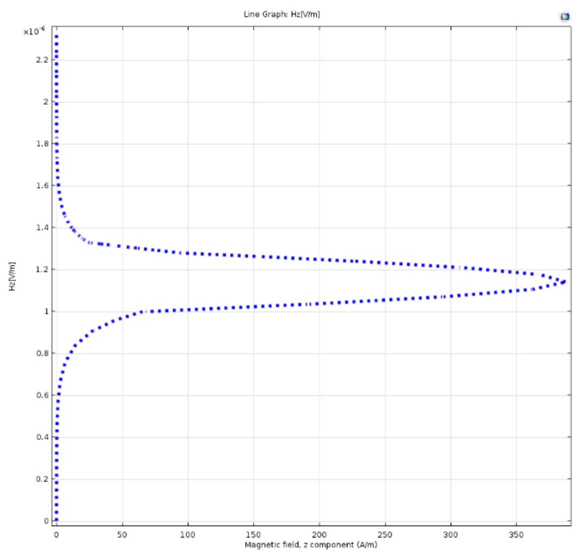
E_x



E_y



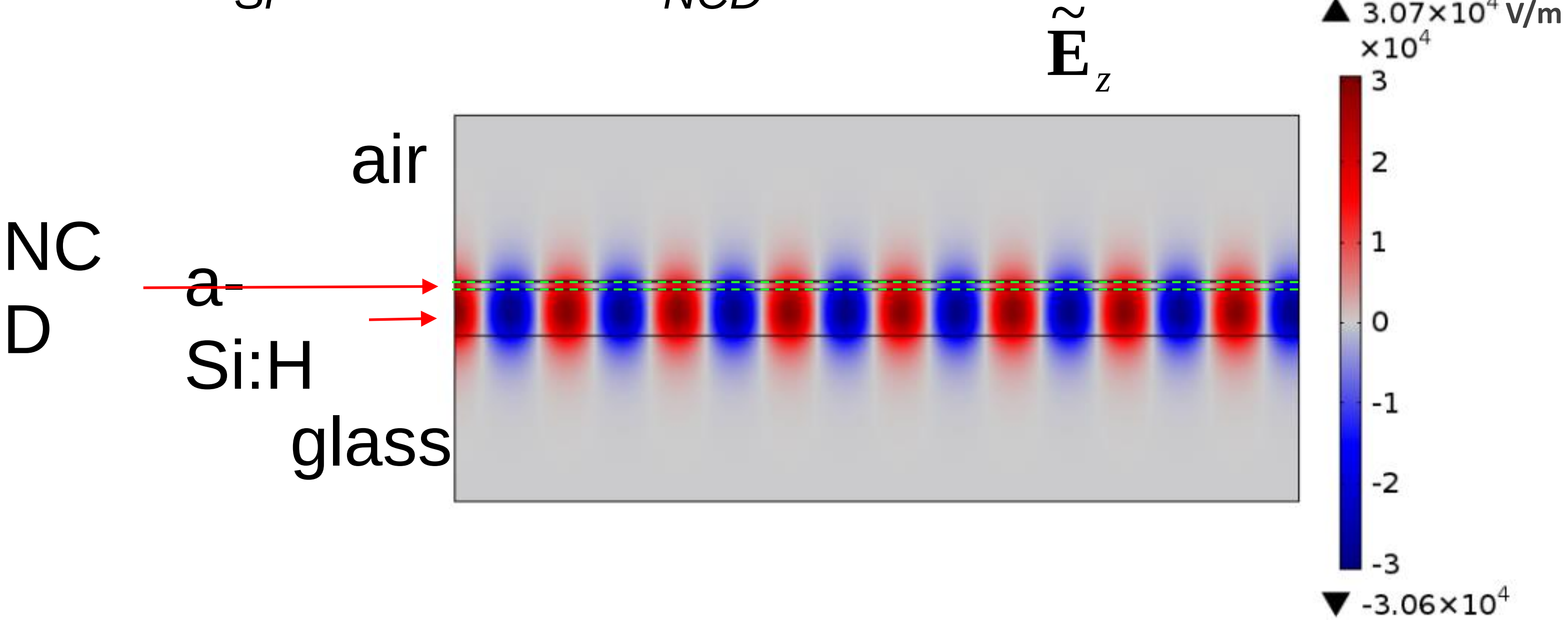
H_z



Výsledky simulace POWG

šíření světla v TE_0 módu při 2000 nm

n_{eff} = 3.025, h_{Si} = 280 nm, h_{NCD} = 50 nm



- evanescentní vlna vyhasínající ve vzduchu a ve skle
- monitorování nm-vrstvy bude možné

Výsledky simulací – útlum světla

útlum signálu: $att[dB/cm] = -\frac{10}{L}\log\frac{P_{out}}{P_{in}}$

L - délka vlnovodu ve směru šíření

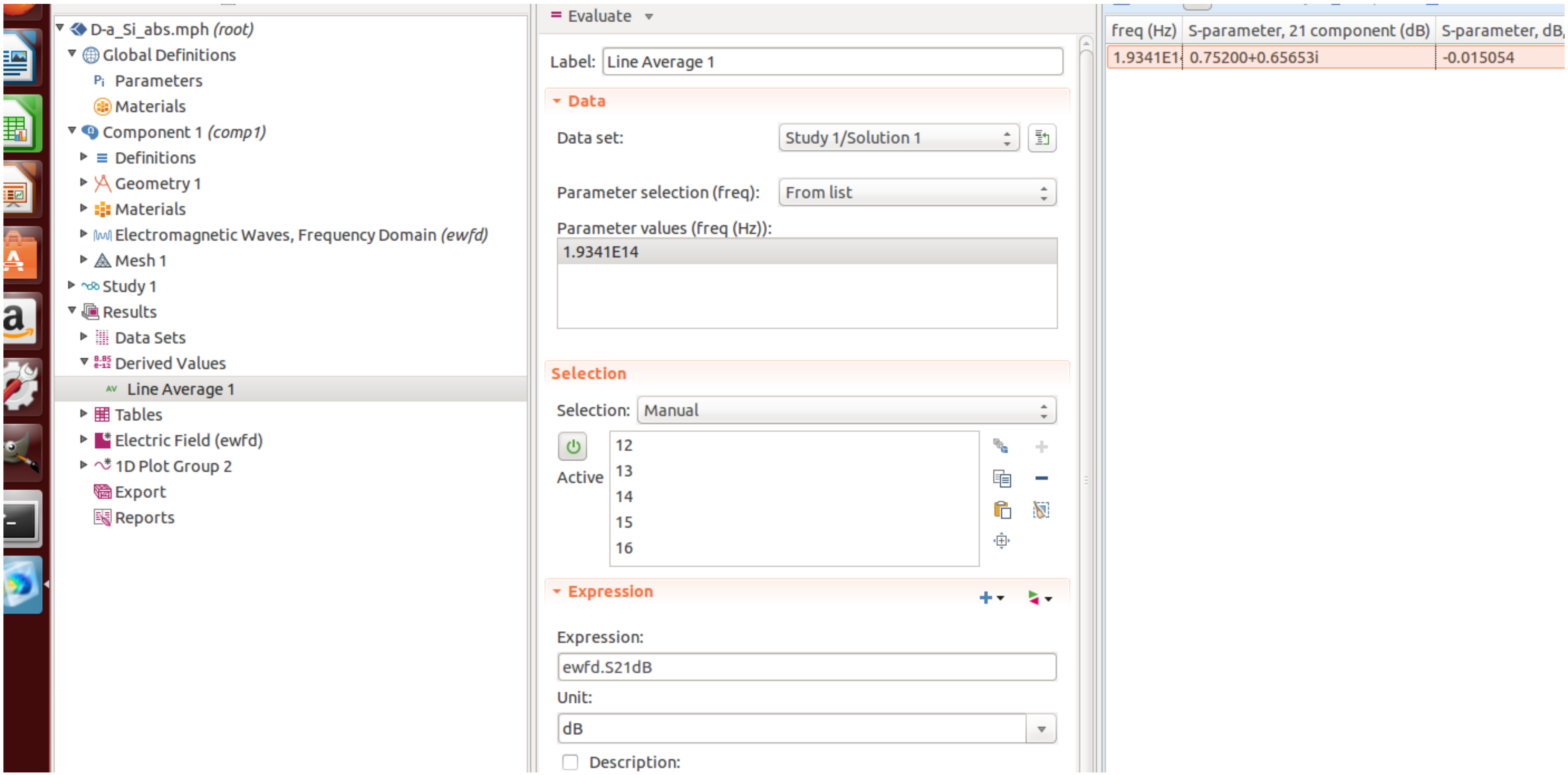
<u>COMSOL:</u> S_{xy} parametry $S_{21} = \frac{\sqrt{P_{out}}}{\sqrt{P_{in}}}$ (ewfd.S21) $S_{21}dB = 20\log S_{21}$ (ewfd.S21dB)

relativní pokles výkonu: $\frac{P_{out}}{P_{in}} = S_{21}^2$

útlum signálu: $att = -\frac{S_{21}dB}{L}$

<u>absorpce</u>: obecně komplexní S-parametry $\overline{S} = \sqrt{S_{Re}^2 + S_{Im}^2}$

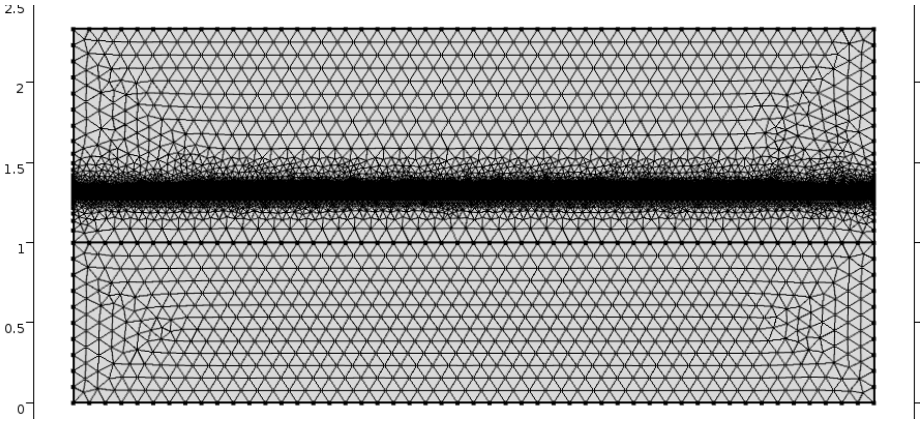
S – parametry – zeslabení



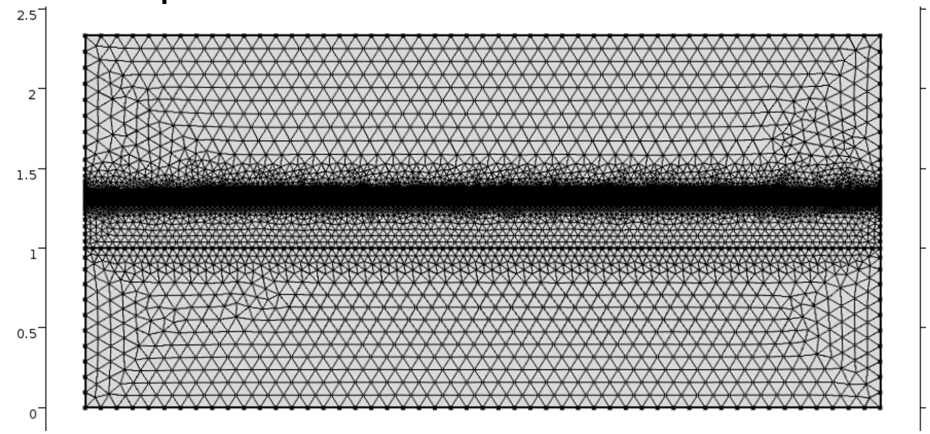
Vliv kvality sítě

maximální velikost prvku: λ/n_l

$n_l = 10$



$n_l = 40$



n_l (λ = 1550)	prvků	neff	S21dB bez absorpční vrstvy(dB)
10	198314	3.207	-0.004861
20	198572	3.207	-0.004852
40	200520	3.207	-0.004846
60	203936	3.207	-0.004845

Vliv kvality sítě

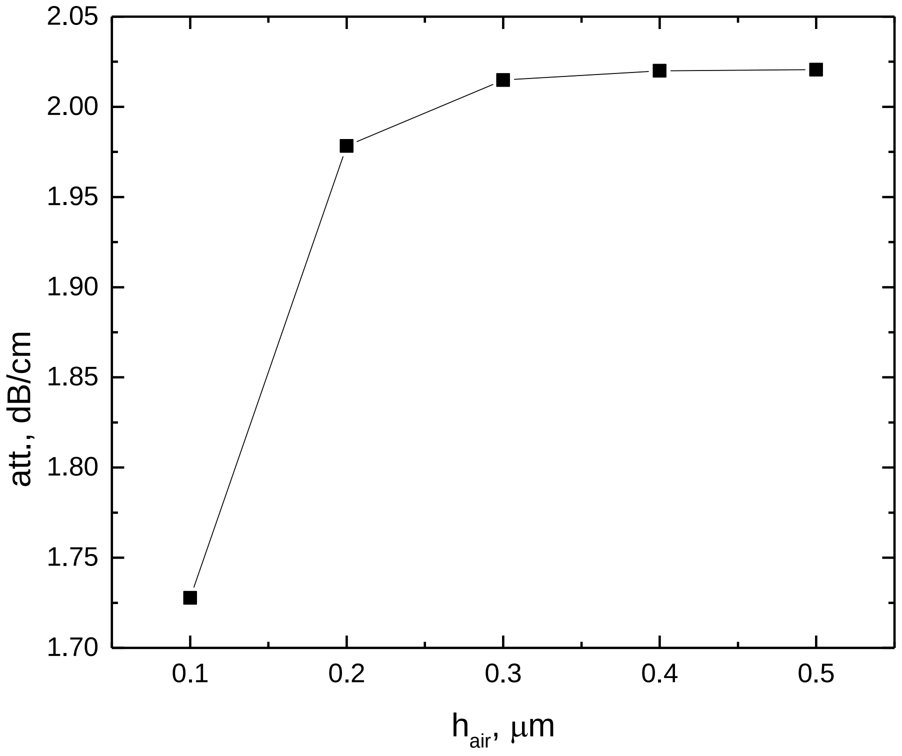
rozměr prvku v absorpční vrstvě: h_{abs}/n_{dabs}

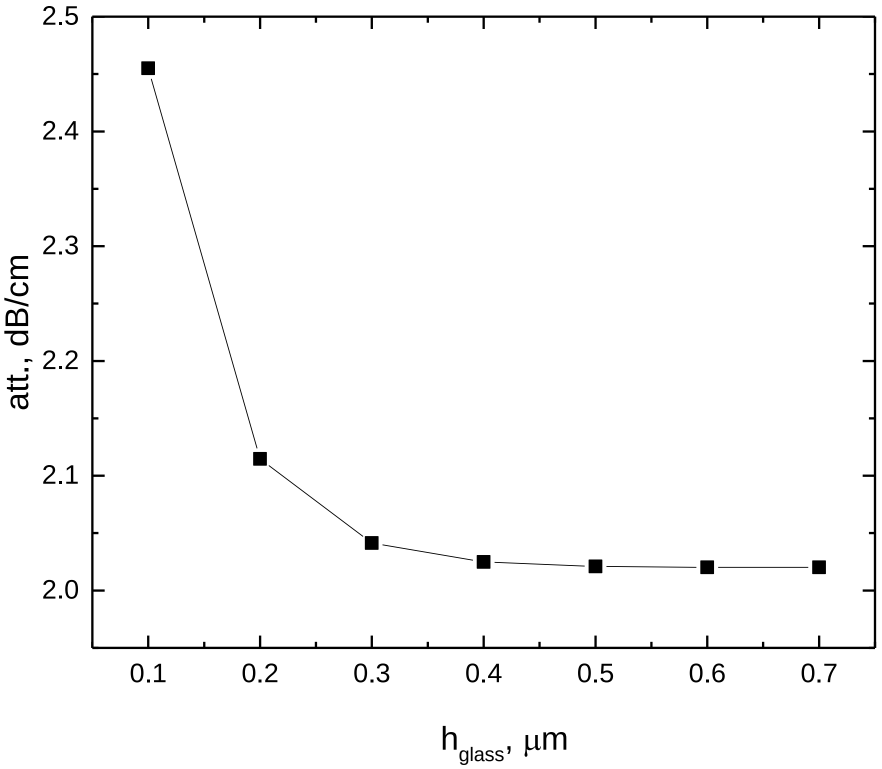
$\lambda = 2000$ nm, h_{abs} = 5 nm, absolutní max. rozměr prvku = $\lambda/20$

n_{dabs}	prvků	abs koef., cm^{-1}	S21dB (dB)	útlum (dB/cm)
7	322226	62.8	-0.0010103	2.0206
5	198314	62.8	-0.0010103	2.0206
3	105968	62.8	-0.0010103	2.0206
2	65460	62.8	-0.0010103	2.0206
1	29620	62.8	-0.0010104	2.0208
3	105968	0	-0.0007812	1.5625

Vliv vzduchu a skla

výška přidané vzduchové vrstvy: h_{air}
výška spodního skla: h_{glass}

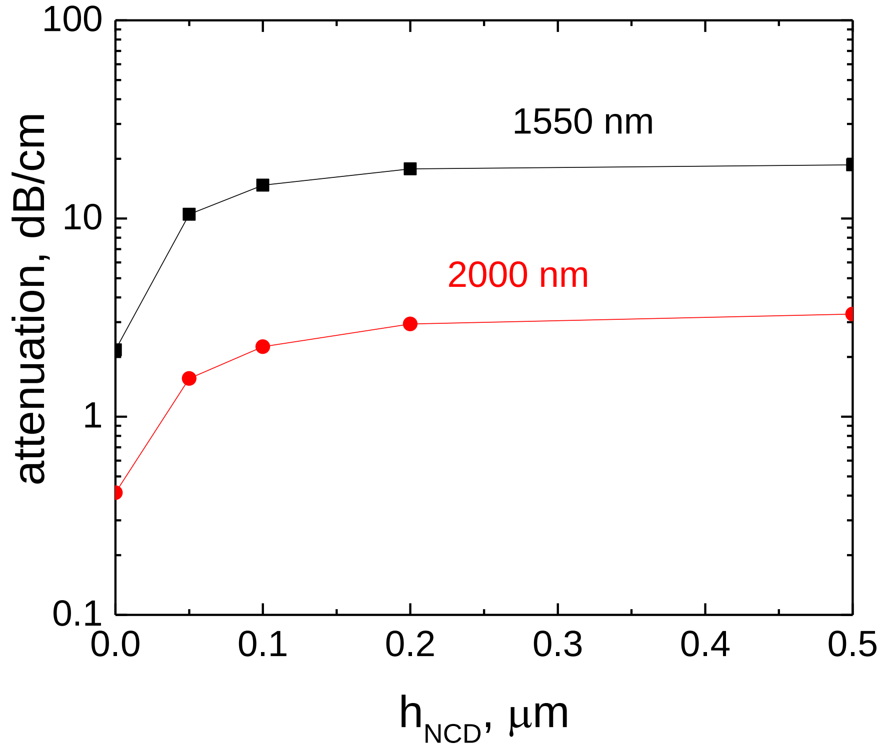




Výsledky simulací– útlum v NCD

bez absorpční vrstvy

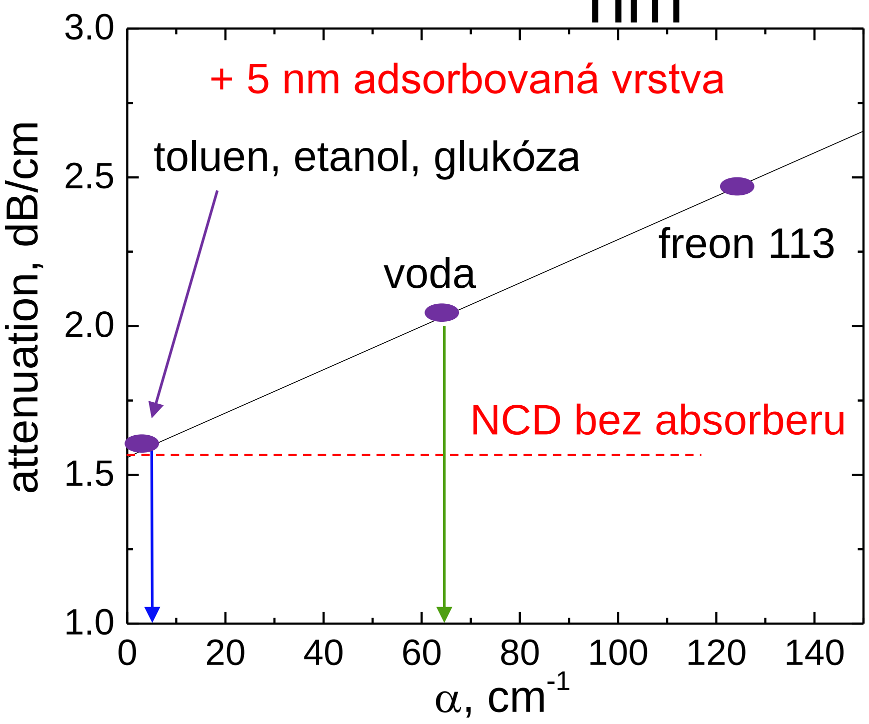
h_{Si} = 280 nm, TE_0 mód

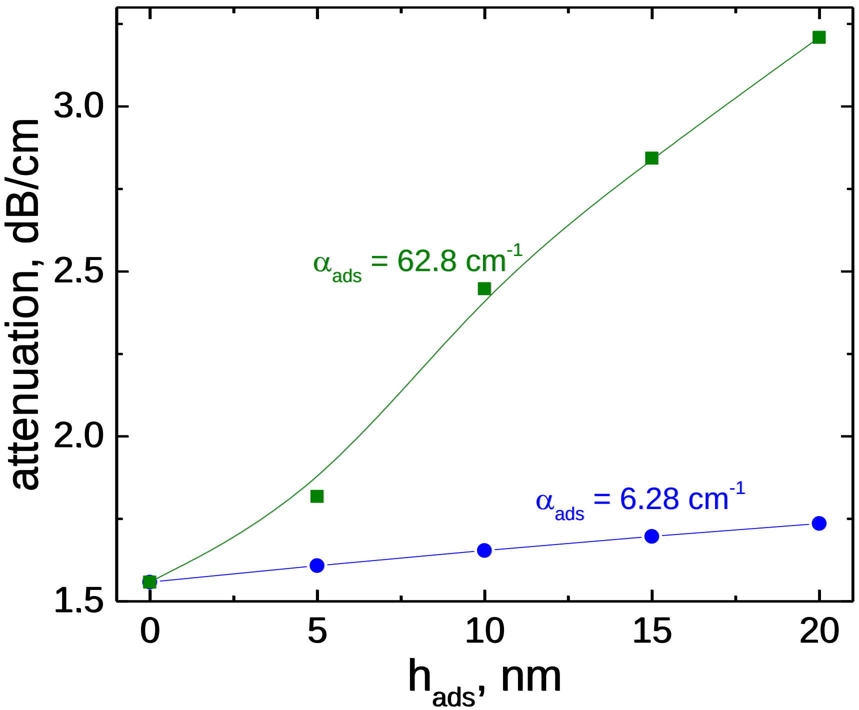


- silně závislé na λ
- absorpce v NCD ovlivňuje šíření světla vlnovodem

Výsledky simulací– s adsorbovanou vrstvou

h_{NCD} = 50 nm, λ = 2000 nm



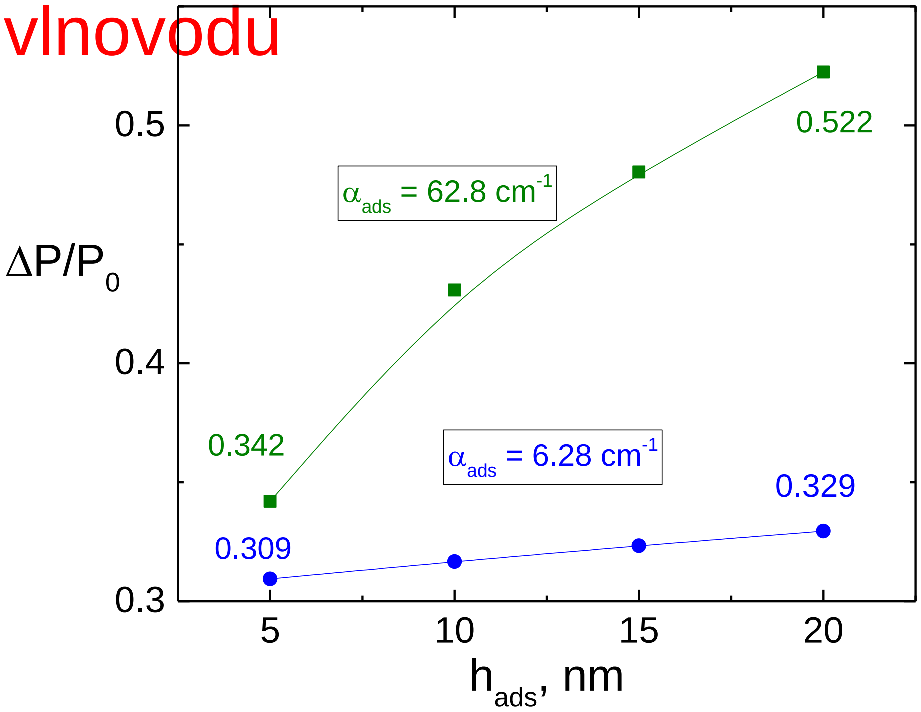


směrnice ∝ α_{ads}

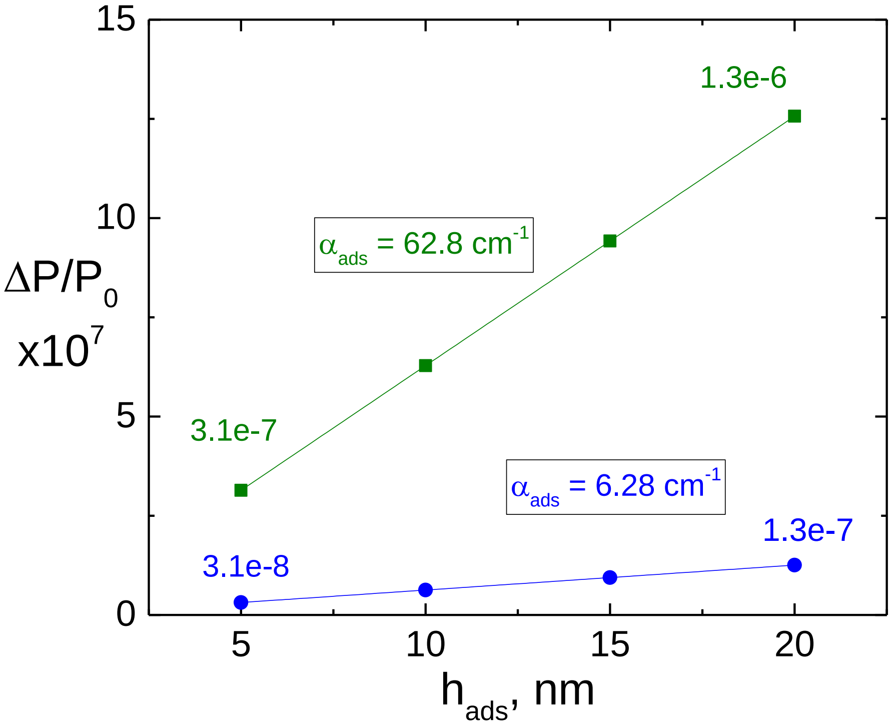
- vliv h_{abs}/h_{NCD}
- citlivost lze naladit délkou osvícené části vlnovodu

Výsledky simulací – monitorování adsorpce

pokles intenzity na 1 cm vlnovodu



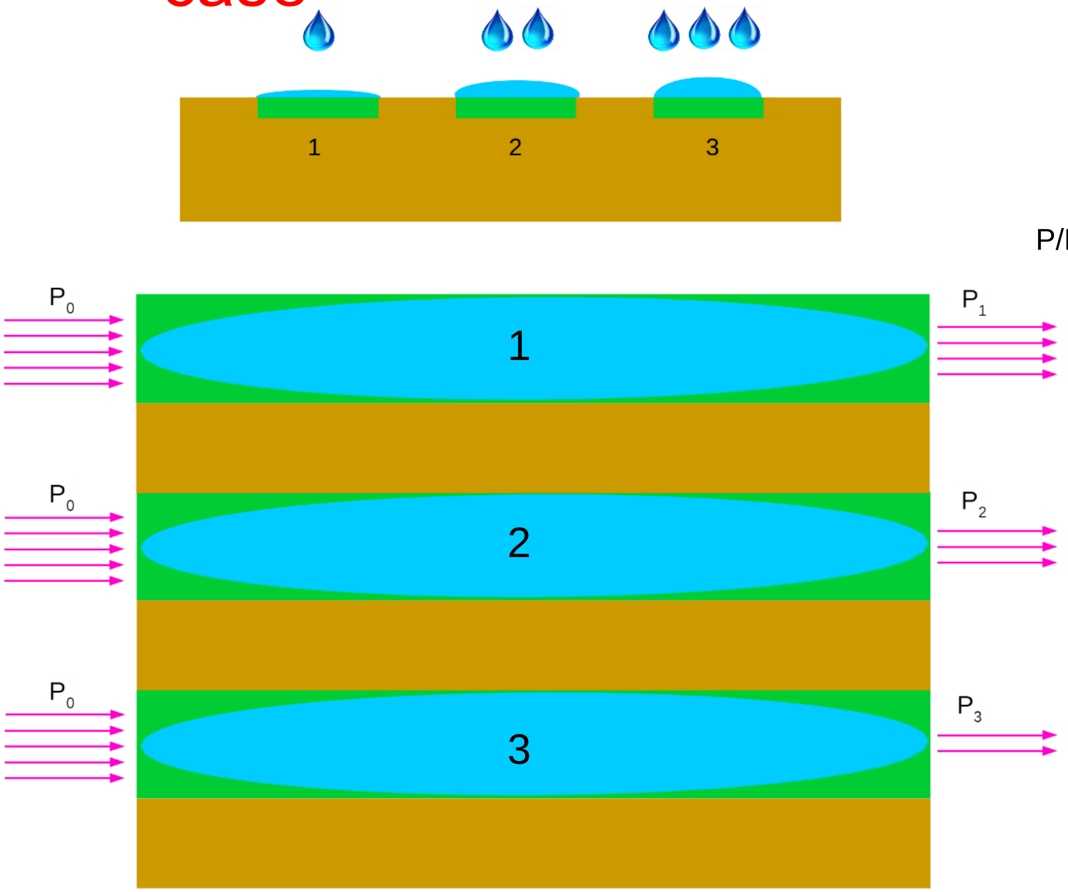
pokles intensity při transmis

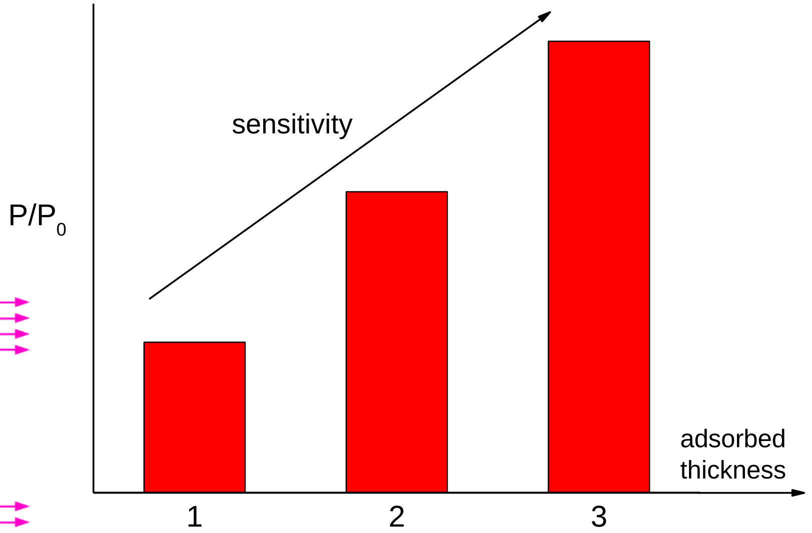


- o několik řádů vyšší citlivost než transmisní spektrometri

Výsledky simulací – monitor adsorpce

rychlý monitoring a řízení adsorpce v reálném čase





Závěr

- šíření světla planárním vlnovodem s absorpcí v krycí vrstvě vyřešeno FEM simulacemi ve 2D
- vysoce citlivý monitor adsorpce NCD/a-Si:H POWG v IČ oblasti je možný
- možnosti rozšíření výpočtů:
  - 3D geometrie
  - navázání a vyvázání světla
  - vliv rozptylu na hrubém rozhraní ?

Poděkování

Grantová agentura ČR, projekt č. 14-05053S.

Zdeněk Remeš remes@fzu.cz
Václav Prajzler prajzler@fzu.cz

Hledáme

NOVÉHO SPECIALISTU PRO FEM SIMULACE

- perspektivní obor
- bohatá mezioborová spolupráce v ČR i se zahraničím
- grantové, bilaterální, mezinárodní projekty

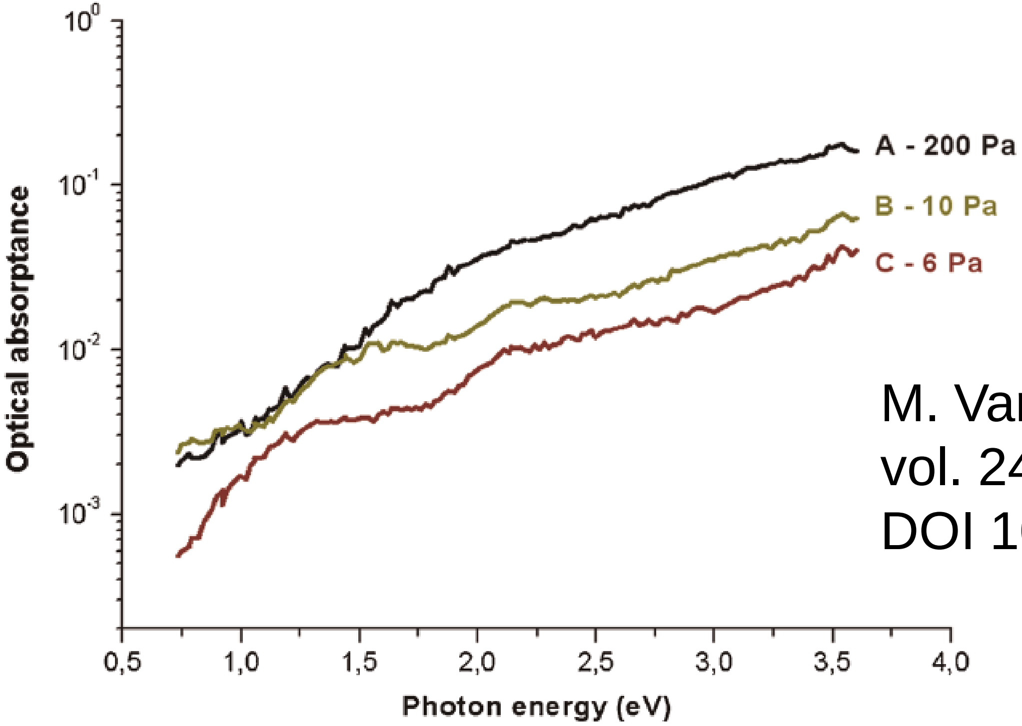
jirasek@fzu.cz

tel. 220 318 482

NCD for photonics – optical properties

- Nanocrystalline diamond films (NCD)

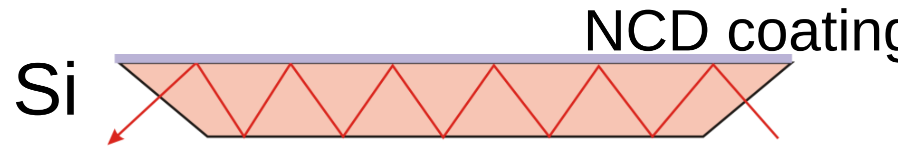
Optical absorption: sp^2 carbon & deposition



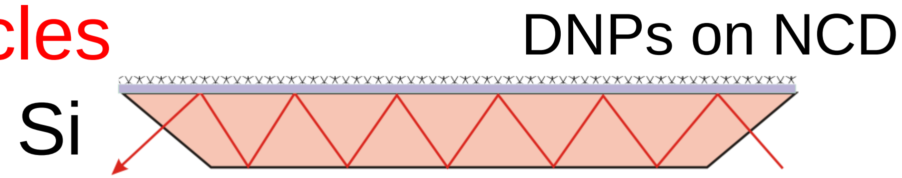
M. Varga *et al,* Phys. Status Solidi B
vol. 249, No. 12, 2635–2639 (2012)
DOI 10.1002/pssb.201200154

NCD for photonics – optical elements

ATR FTIR spectroscopy

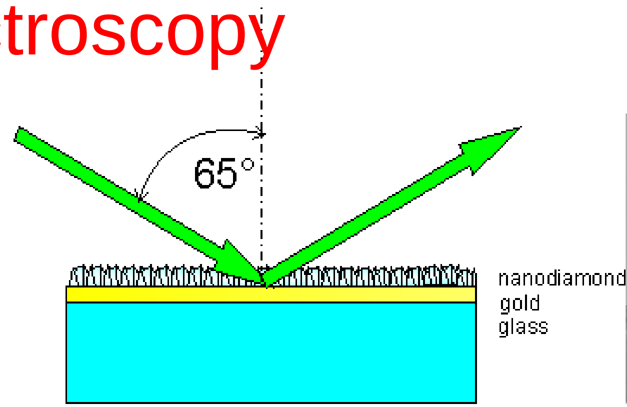


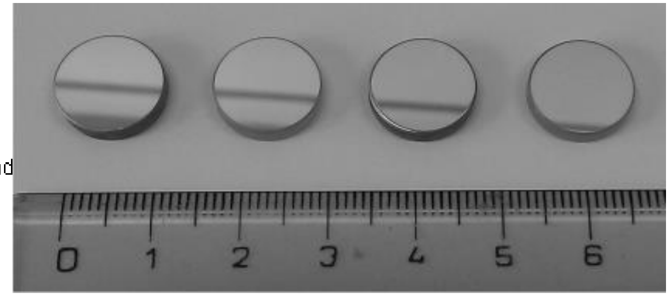
FTIR of diamond nanonparticles



Remeš *et al.*, Appl. Surf. Sci. 270 (2013) 411 - 417.

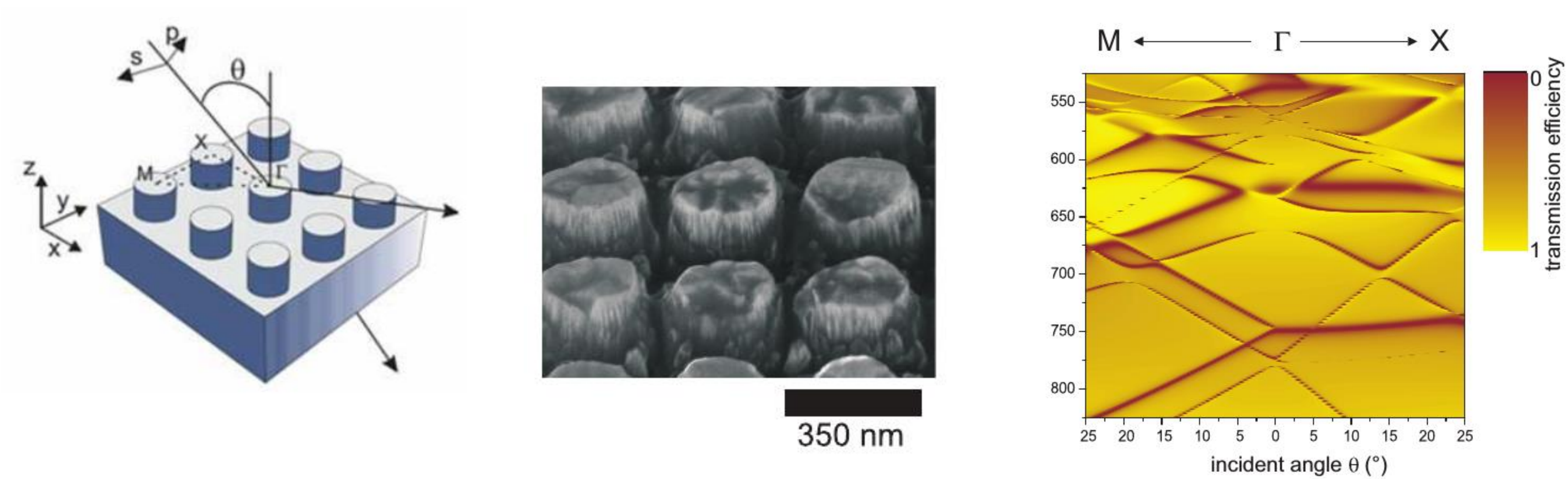
GAR FTIR spectroscopy





Remeš *et al.,* Diam. Relat. Mater. 20 (2011) 882 - 885

CVD diamond for photonics – photonic crystal

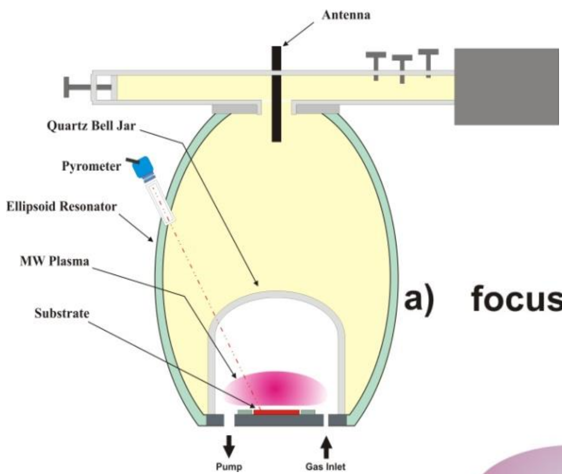


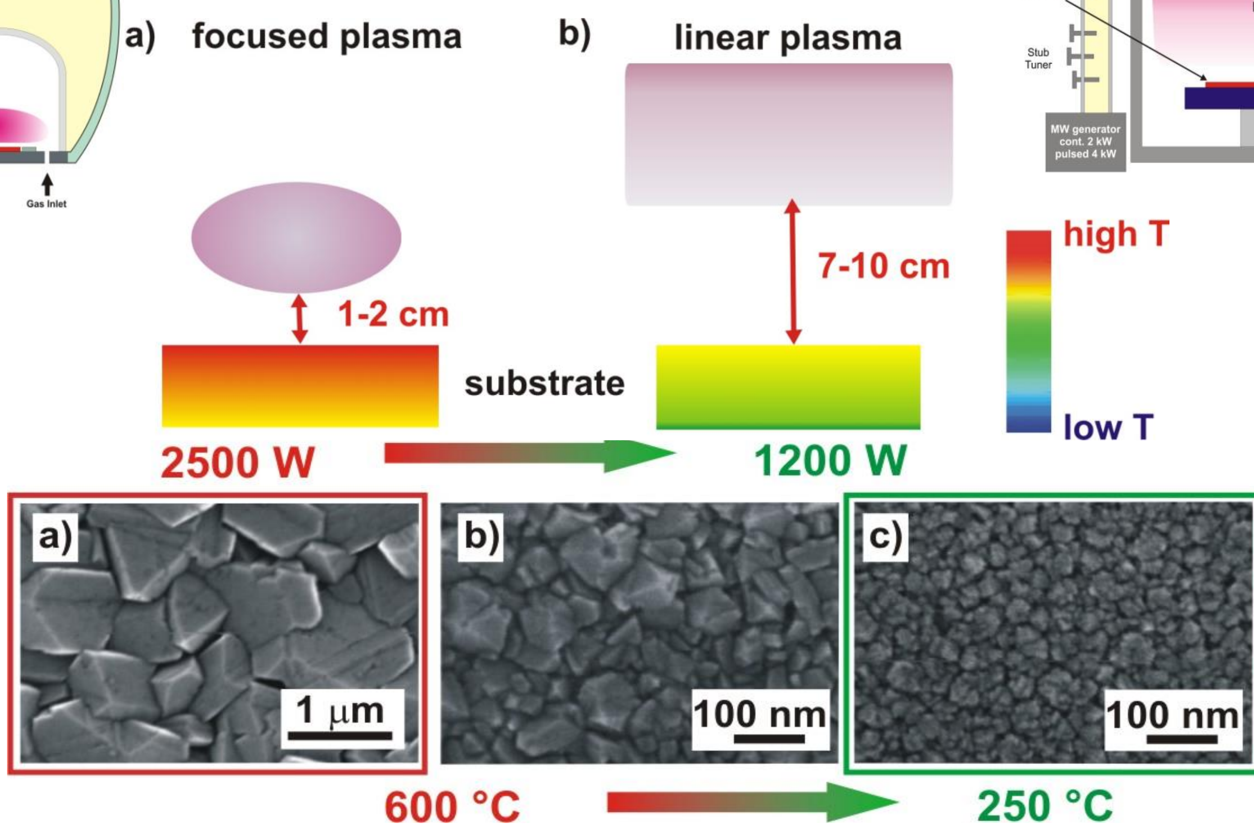
L. Ondič *et al.*, Scient. Rep. 2:914 (2012), DOI: 10.1038/srep00914

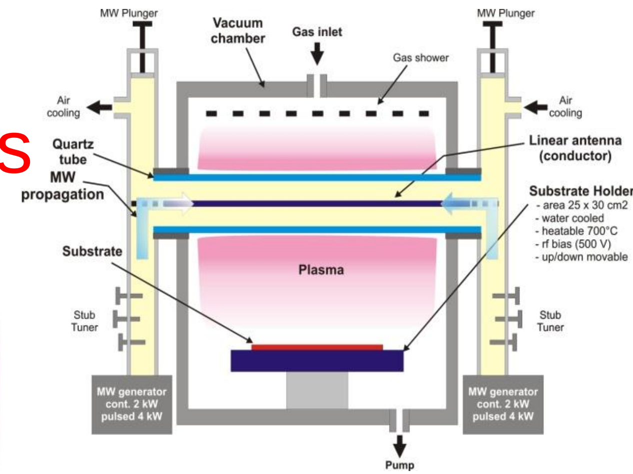
- selected wavelengths couple and propagate along
- tunable by nano-structuring

Nanocrystalline diamond films (NCD)

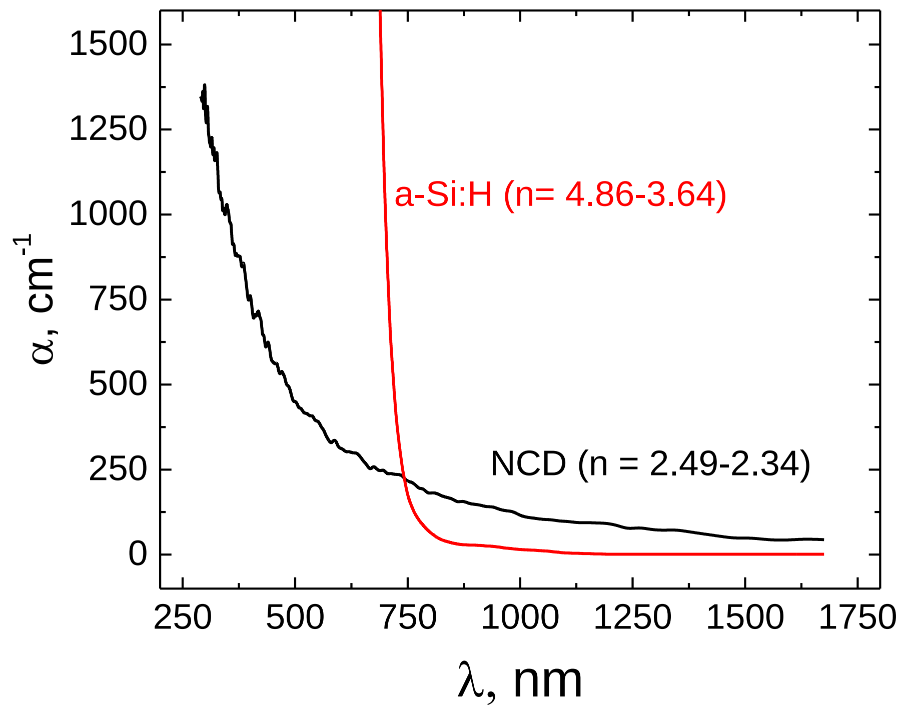
MW plasma reactors







Optical absorption of NCD and a-Si:H



- absorption of a-Si:H in IR rather small
- NCD absorption in coating: influence on light propagation in POWG to be assessed by FEM simulation or measurement