

博士論文 (要約)

急峻で高ダイナミックレンジな波長感度特性を持つ

プラズモニック中赤外ディテクタ

安永 竣

---

<b>第 1 章 序論</b>	<b>5</b>
1.1 本研究の目的と意義	5
1.2 研究の背景	7
1.2.1 小型分光器	7
1.2.2 再構成分光法	9
1.2.3 中赤外ディテクタおよび波長選択性を実現する構造	10
1.2.4 回折格子を用いた表面プラズモン共鳴センサ	11
1.3 関連する先行研究	12
1.3.1 プラズモニック中赤外ディテクタ	12
1.3.2 再構成分光法における適切な波長感度特性について	12
1.4 本研究の端緒となった細幅なトレンチ構造	13
1.5 本論文の構成	15
<b>第 2 章 理論</b>	<b>16</b>
2.1 計測の理論: 再構成分光法	16
2.1.1 記号の定義	16
2.1.2 再構成分光法の原理	16
2.1.3 劣決定問題	17
2.1.4 特異値分解	17
2.1.5 波長感度特性の適切性	19
2.1.6 波長感度特性の急峻さと分光性能	20
2.1.7 仮定の波長感度特性を用いた数値実験	24
2.1.8 ダイナミックレンジと分光性能	30
2.2 計測の原理: 表面プラズモン共鳴	31
2.2.1 記号の定義	31
2.2.2 表面プラズモン共鳴	31
2.2.3 共鳴条件	32
2.2.4 SPR の伝搬長	32
2.2.5 局在表面プラズモン共鳴	33
2.3 デバイスの動作原理	34
2.3.1 熱発生と Free Carrier Absorption	34
2.3.2 ホール効果の測定	36
2.4 デバイス設計・製作	37
2.4.1 p 型シリコンの光透過特性	37
2.4.2 p 型シリコン上のアルミニウムおよび金の電流-電圧特性	40
2.4.3 デバイスタイプ 1	41
2.4.4 デバイスタイプ 2	46

2.4.5	デバイスタイプ3	48
2.4.6	ホール効果計測用デバイス	48
2.5	実験方法	49
2.5.1	抵抗変化としての光応答計測	49
2.5.2	ホール効果計測	53
<b>第3章</b>	<b>デバイス評価</b>	<b>55</b>
3.1	デバイス基礎特性評価	55
3.1.1	電気特性評価	55
3.1.2	偏光方向について	55
3.1.3	光強度について	57
3.1.4	バイアス電圧について	58
3.1.5	計測の再現性について	59
3.2	回折格子パラメータによる評価	60
3.3	ホール効果を用いた移動度計測	60
3.4	計測結果と理論の比較	61
3.4.1	再構成結果	61
3.4.2	波長感度特性の最大・最小比および傾きによる再構成結果への影響	62
3.5	考察	63
3.5.1	デバイス動作原理	63
3.5.2	入射角度依存性と急峻な波長感度特性発生について	64
3.5.3	波長分解能に関して	64
3.5.4	条件を緩めた感度行列の周波数成分と精度の考察	65
3.6	小型ワンチップ受光器の実装化検討	70
3.6.1	デバイス設計	70
3.6.2	デバイス製作	71
3.6.3	試作したワンチップデバイスの評価	76
3.7	デバイス評価の総括	76
<b>第4章</b>	<b>結論</b>	<b>77</b>
4.1	本研究の結論	77
4.2	今後の展望	78
<b>付録A</b>	<b>第3.5.4項における数式の証明</b>	<b>80</b>
A.1	命題1の証明	80
A.2	命題2の証明	80
	<b>参考文献</b>	<b>82</b>



# 第1章 序論

## 1.1 本研究の目的と意義

本研究の目的は、再構成分光法に適した波長感度特性を実現する中赤外ディテクタの受光面構造を示し、この受光面を用いて分光器を構成できることを示すことである。

中赤外領域には複数の定義があるが、一例として波長  $2.5 \mu\text{m}$  から  $25 \mu\text{m}$  の光を指し<sup>[1]</sup>。共有結合を有する物質はその結合の種類に応じて中赤外領域に固有の吸収帯域を有するため、分光を行うにあたって最も有意義な波長領域のひとつである<sup>[2]</sup>。分光により物質の差異を識別したり、さらに詳細な分光を行えば、物質の同定を行うことが可能である。

分光器に関しては、近年、小型分光器の研究が盛んに行われている。分光を行うために広く用いられている分光器は、広い波長幅で高波長分解能かつ高感度な分析が可能である反面、大きな筐体が必要で、かつ繊細な構造を用いるため、分光のためにはサンプルを作製して実験室に持ち込み、計測を行う必要があった。しかし、分析の対象や用途によっては、分析の精密さよりは、分光器を現場に持ち運べること、即座に大まかな結果が得られることのほうが重要である場合がある<sup>[3]</sup>。そのような用途に対しては、多少の波長分解能を犠牲にしても、持運び可能で、安価な小型分光器が必要である。

再構成分光法は、こうした近年の小型分光器への需要の高まりの中で注目を集めている分光法の一つである。波長に応じて変化する光応答が得られる構造を複数用いて、全波長帯に対する応答を一度に計測し、入射光スペクトルの推定を行う方法である<sup>[3]</sup> (**Fig. 1.1**)。構造としてシンプルかつ頑強で、製造が容易な小型分光器を構成する上では、感度 (**Responsivity**) が光の波長によって変化するディテクタのアレイを用いて再構成分光を行う構成が有利である<sup>[4, 5, 6, 7, 8, 9]</sup>。その場合、ディテクタの感度が波長によって変化する具合、すなわち波長感度特性がディテクタ間で異なることが重要<sup>[3]</sup>で、これにより再構成分光の性能が決定される。しかし、これまで提案された中赤外ディテクタの波長感度特性は、再構成分光の性能を向上する上で改善の余地が大きい。再構成分光の性能向上に適した受光面構造を示すことに本研究の第一の目的がある。

本研究の端緒は、中赤外ディテクタの受光面として、細幅なトレンチを配列しアルミニウム連続膜で覆った回折格子を用いたところ、急峻かつ高ダイナミックレンジな波長感度特性が得られたことであった。ここでいう急峻とは、波長変化に対して急激に感度が変化することであり、高ダイナミックレンジとは、波長方向に変化する感度の最大と最小の比が大きいことをいう。これまでの関連する研究において、各ディテクタの波長感度特性の類似度が低いほど再構成に有利であること<sup>[3]</sup>、波長感度特性に鋭いフィーチャが必要であること<sup>[10]</sup>が再構成分光法に重要な要素であることが述べられており、本ディテクタが再構成分光に理想的であると考えに至った。

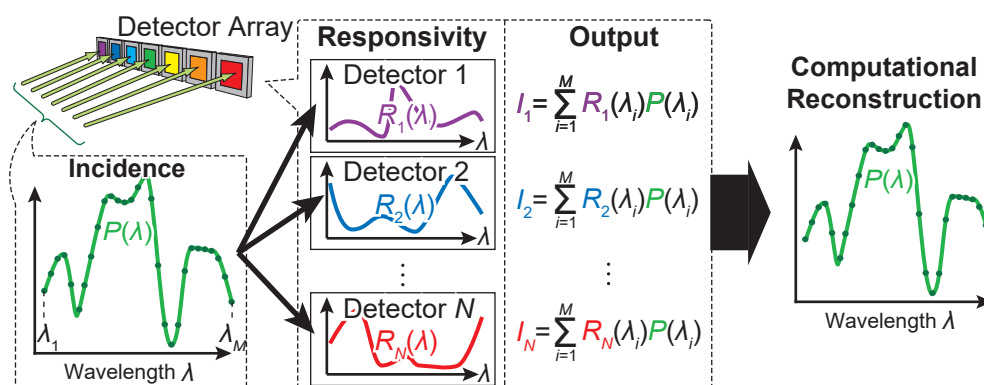


Fig. 1.1 再構成分光法のコセプト.

しかし、急峻さやダイナミックレンジに関する条件の具体的な議論はこれまで行われてこなかった。これらに関して具体的な条件が得られれば、高い分光性能を得るための受光面構造をデザインする際の指標とすることができる。さらに、本研究にとどまらず、別のコンセプトに基づいて報告される分光器構造においても、分光性能を向上させるための手がかりとすることができるため、重要な意義を有すると考えられる。したがって本研究ではまず、計測誤差に対する推定値のロバストさと分光の精度の観点から、再構成分光法に適した波長感度特性の急峻さをフーリエ変換と同様の考え方をを用いて理論的に定義する。そして、同様の考え方に基づいて、高ダイナミックレンジが必要であることを示す。

理論的に求めた指標に基づいて、本研究で提案するトレンチ構造のパラメータを変化させたディテクタを実際に製作・評価することで、理想的な感度特性を実現するための回折格子構造の条件を実験的に明らかにする。そして、実際に得られた波長感度特性をもとに数値的に再構成分光を行い、本研究で提案する受光面構造の分光性能を検証する。

加えて、実際に再構成分光法に基づいた小型分光器を実現する上では、受光原理が実用的であること、複数のディテクタをコンパクトに集積することが可能であることが重要である。本研究で目指すのは、ディテクタが光エネルギーを熱エネルギーに変換することで電気信号を得る、熱型中赤外ディテクタのための受光器である (Fig. 1.2)。本研究では、これらの要件を満たす中赤外ディテクタの受光面構造を提案し、原理実証を行う。

本研究の中赤外ディテクタを用いた分光器は、中赤外領域のなかでも短波長側、 $2.5 \mu\text{m}$  から  $3.7 \mu\text{m}$  の波長領域を対象に、再構成分光法に一般的な 20 個の受光面を用いて分光を行うことを想定する。この波長領域は、共有結合性の化学結合の吸収がおおまかな官能基ごとに異なる領域に現れ、物質の同定というよりはむしろ、幅広い物質の大まかな識別に向いている。小型分光器が実験室外で簡易的な検査の役割を果たすことを考えると、似た化学種のリストのなかで区別を行うよりは、人間の目で識別できないものを可視化する、異変を察知するという用途が考えられる。

実験室外での簡易的な検査という観点で、本研究の中赤外ディテクタを用いた分光器は、今日の半導体デバイスの基盤であるシリコンをベースとし、かつ、無毒な素材と一般的な半導体プロセスで容易に作製す

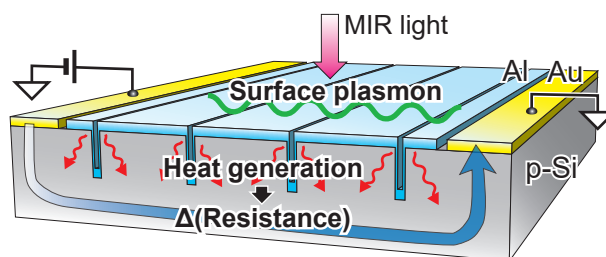


Fig. 1.2 本研究で提案する中赤外ディテクタのコンセプト.

ることができる利点がある。可動部品を使用しないため、デバイスとしての頑強性も期待できる<sup>[11,12]</sup>。したがって、化学的組成に基づく物体・物質の識別を行う、小型で持ち運び可能な、様々な環境において用いることができる分光装置の実現に力強く貢献する技術となる。

本研究で提案する受光面構造が実用的な中赤外分光器として今後の科学に貢献することはもちろん、本研究で行った、ディテクタの波長感度特性をフーリエ変換することでディテクタの分光性能を評価する方法が、今後の分光器の設計に資することを期待する。

## 1.2 研究の背景

### 1.2.1 小型分光器

分光法は物質の特性評価や化学分析の方法として広く用いられる方法である<sup>[13]</sup>。分光に用いる分光器は、従来、高い分解能を持つ一方で、大きな筐体を持ち、繊細で、持ち運ぶことは困難な上、非常に高価な装置であった。これは、従来の分光器が長い光路長と数多くの光受光器、そして可動部品によって構成されているためである<sup>[3]</sup>。しかし、そこまでの波長分解能が必要なく、分解能を多少犠牲にしてもその場ですぐに示唆的なデータを取得できることが重要視される場面があり、手で持ち、携行可能な分光器や、他のデバイスに組み込むことが可能な分光器を目指した小型化が1980年から1990年頃より研究されてきた<sup>[3,13]</sup>。

小型分光器に期待される応用先は多岐にわたり、リモートセンシング、IoT、生体計測、そしてマシンビジョンなどが期待されている。

リモートセンシングとしては、空中、海上、宇宙空間での無人機に搭載することが考えられる<sup>[12,14,15]</sup>。宇宙空間においては、惑星探査機に搭載して現地の大気や土壌の分析を行うことができる<sup>[16]</sup>。また、無人飛行機等を用いてガスによる光吸収を捉え、工場からのガス排出モニタリングを行う試み<sup>[17,18]</sup>や、精密農業への応用<sup>[15]</sup>、雲のモニタリングに用いて気候変動等の予測に役立てる取り組みもある<sup>[19]</sup>。リモートセンシングのような広域な計測対象だけでなく、小型で安価な分光器を多数用いてローカルな計測を多点で行い、IoTやセンサネットワークに役立てることも期待される<sup>[20]</sup>。たとえば、ガス種による光吸収の違いを利用して、周囲の環境をモニタリングする小型なガスメータの応用が考えられている<sup>[21,22]</sup>。中赤外領域の情報を生きたガスセンシングは重要で、対象のガスと波長を限定して個別にモニタリングする研究が行わ

れている<sup>[23, 24, 25]</sup>。安価で高性能な小型分光器が実現できれば、対象とするガスごとに個別のデバイスを用意するのではなく、一つのデバイスで複数のガスを計測できるようになると期待される<sup>[20]</sup>。

また、携行可能な小型デバイスに落とし込むことが可能になると、農産物や食品の安全モニタリング<sup>[26, 27]</sup>や、スマートフォンに取り付けての健康モニタリングデバイス<sup>[28]</sup>が実現できる。中赤外領域の情報を用いることで癌などの病変の検出などが可能<sup>[29]</sup>ということもあり、ヘルスケアへの応用も期待されている。

その他、可視光で弁別できない物体の識別に中赤外線が有用であることがあり、すでに **Multispectral/Hyperspectral Imaging** として利用されている<sup>[17]</sup>。小型分光器はこれらの技術を容易に利用できるようにする技術となると考えられ、機械による物体認識などに利用が期待できる<sup>[30]</sup>。

用途によって小型分光器に求められる仕様は異なるが、高額で大きく繊細な従来の分光器にはできなかった応用が期待されることから、一般に小型分光器は堅牢であることが求められる<sup>[12]</sup>。また、応用の敷居を下げ、IoT や生体計測等に利用していく上では、簡便に利用できる構成であること、そして安価に製造できることが重要になる。堅牢な構造を持ち、システムとして簡便な構成で、製造方法が大量生産に向いていることは、小型分光器の利用を拡大していく上で重要な要素であると考えられる。

さて、Yang ら<sup>[31]</sup>や Chang ら<sup>[31]</sup>らは近年開発されてきた分光器を (1) 分散光学系を使用して空間的に光を空間的に波長分散させ、波長ごとに異なるディテクタで検出するもの<sup>[32, 33, 34]</sup>、(2) 狭帯域バンドパスフィルタ多数用いて透過光を検出するもの<sup>[21, 35, 36, 37, 38]</sup>、(3) 時間的または空間的に変化する干渉計を用いてフーリエ変換を行うもの<sup>[39, 40, 41, 42]</sup>、(4) 再構成分光を行うものの4通りに分類した。このうち (1) から (3) は従来の大型分光器の考え方を踏襲して小型化を目指す取り組みである。

光を空間的に波長分散させる方法は、回折格子やプリズムなどを用いて入射光を波長ごとに空間的に分解し、それぞれの波長帯域の光強度を計測する方法である。長さの異なる導波路とカプラを利用して波長分解する **Arrayed Waveguide Gratings (AWGs)** を用いるもの<sup>[32]</sup>や、回折格子を用いて導波路内に光を導入して回折角の違いを利用する方法<sup>[33]</sup>、導波路内で波長による全反射の臨界角の違いを利用する方法<sup>[34]</sup>などがある。導波路を用いた光学系への組み込みに強みがあるが、波長分解を十分行うために光路長が必要となり、かつ、ロスのない小型な導波路を製作するために非常に精緻なプロセスが求められる。また、波長を分解して計測するため、ひとつひとつのディテクタに入射する光強度は波長分解に応じて減少し、強い入射光強度が必要となる。

狭帯域バンドパスフィルタを用いる方法は、一般的な中赤外ディテクタのまえにバンドパスフィルタを挟む構造である。透過波長固定のフィルタを用いるものとしては、メタマテリアルを用いたフィルタレイ<sup>[35, 36]</sup>などが提案されている。MEMS 構造の透過波長可変のファブリペロー干渉計を用いれば、単一のディテクタで分光器を構成することができる<sup>[38, 43]</sup>。しかし、波長分解能を確保するためにフィルタ数を増やすか、可動部品を必要である。さらに、受光器では狭い波長帯域の光のみを計測するため、入射光強度が必要となる点で空間的に波長分散させる方法と同様の短所を有する。

フーリエ変換を行う方法は、干渉計を用いて入射光を変調し、計測結果にフーリエ変換を行うことでスペクトルを得る方法である。ベンチトップ型の大型のフーリエ変換赤外線分光計 (**FT-IR**) と同様にマイケルソン干渉計を用いた小型分光器<sup>[40, 41]</sup>や、マッハ・ツェンダー干渉計を用いるもの<sup>[42]</sup>などが提案されている。マイケルソン干渉計はベンチトップ型では非常に広い波長領域と高い波長分解能を実現できる上、全波



長の信号を同時に計測するので Fellgett 利得の恩恵を被り、有利な S/N 比を得ることができるが、小型化の際には、可動部品を必要とし、かつ波長分解能が可動部の長さによって制限される点で欠点がある。現在、中赤外領域で動作する手に持てる大きさの小型 FT-IR が実用化されてきているが、数 kg オーダの重量があり<sup>[26]</sup> 軽いとは言い難く、さらなる小型化には構造的に困難が伴うと考えられる。マッハ・ツェンダー干渉計の場合には、光導波路を用いるため、自由空間を伝搬する光とは親和性が低い。

以上のように、旧来の分光技術を発展させて小型分光器を構成する研究は現在でも行われているが、光路長と波長分解能のトレードオフ、可動部品の有無、外界からの自由空間を伝搬する光を受光することなどを考慮すると、簡便で堅牢な小型分光器の構成にはどれも最適な方法とはいえない。そこで、近年の高速な計算機能力を活用して分光性能を向上させることができる再構成分光法に注目が集まっている。

### 1.2.2 再構成分光法

再構成分光法は、個々の波長のスペクトルを一つずつ取得するのではなく、波長方向に計測結果が変化するような計測方法を複数用意し、計測レンジ全体にわたって計測を行って、その結果をもとにもとの入射スペクトルを推定する方法である。計算によって他の原理に基づくディテクタが光路長による制限をうけるなかで、再構成分光法はその原理ゆえ、光路長ではなく、計測に利用する計測方法の個数によって波長分解能が決まる<sup>[3, 8, 44]</sup> ことが近年の注目の理由である。

再構成分光法には、波長に依存した形で光を空間的に分散させる方法<sup>[17, 45]</sup> もある。デバイスの寸法精度が多少悪くてもキャリブレーションにより誤差を吸収できるので、製作上の誤差に強い利点がある一方で、熱膨張により光分散する部分の形状が変形すると再構成に大きく影響し、温度変化に弱い欠点がある。そのため、受光部の波長応答を変化させる方法がより多く研究されている。波長依存性をもたない中赤外ディテクタの前に波長依存性をもつフィルタなどの光学素子を配置する方法 (Filter-Array-Detector-Array, FADA) と、受光器そのものの感度 (Responsivity) に波長依存性をもたせるアプローチがある<sup>[3, 12]</sup>。近年の主な再構成分光法の研究について **Table 1.1** にまとめる。どちらも、Fourier 変換方式と同様に、前波長帯域の信号を一度に受光するので、Fellgett 利得を享受できる方法である。

FADA 方式は既存の中赤外ディテクタをそのまま利用し、外部に光学フィルタを設けるだけで実現可能であり、成熟してきている中赤外ディテクタの技術をそのまま利用できる利点がある<sup>[48]</sup>。フィルタには **Table 1.1** に示したようにプラズモニック構造や誘電体メタマテリアル構造を用いるもの、薄膜積層型、ファブリペロー干渉計を用いるものなどがあるが、中赤外領域ではプラズモニック構造を用いるものが多い。しかし、フィルタとディテクタが別となっていることで小型化が制約を受ける上に、部品点数が増えて構造が複雑になるほか、自由空間を伝搬する光を受けるフィルタの小型化には限界がある。したがって、小型化を考えたときにはフィルタなしでディテクタ自体に波長依存性をもたせるものが適している<sup>[9, 12]</sup>。しかしディテクタ自体に波長依存性をもたせる試みは、中赤外領域においては未だ黎明期にあり、再構成分光法に適した波長感度特性を実現できる構造は検討が必要な段階である。

**Table 1.1** 近年の再構成分光法に関する研究.

Principle	Structure	Visible/Near-infrared ( $\lambda \leq 2.5 \mu\text{m}$ )	Mid-/Far-infrared ( $\lambda \geq 2.5 \mu\text{m}$ )
FADA	Plasmonic	Kurokawa(2011) <sup>[11]</sup>	Jang(2016) <sup>[46]</sup> , Craig(2018) <sup>[10]</sup> , Wang(2018) <sup>[47]</sup> , Meng(2021) <sup>[48]</sup> , Lee(2021) <sup>[49]</sup>
	Metamaterial		Shrestha(2020) <sup>[50]</sup>
	Multilayer	Oliver(2013) <sup>[51]</sup> , Huang(2017) <sup>[52]</sup> , Zhang(2018) <sup>[53]</sup> , Kim(2020) <sup>[54]</sup>	
	Fabry-Pérot		Zhang(2019) <sup>[55]</sup> , Chang(2021) <sup>[31]</sup>
	Other	Wang(2014) <sup>[56]</sup> , Bao(2015) <sup>[44]</sup> , Yang(2015) <sup>[45]</sup> , Wang(2019) <sup>[57]</sup> , Liu(2021) <sup>[25]</sup>	Yang(2021) <sup>[17]</sup>
Detector only	Bandgap	Yang(2019) <sup>[4]</sup>	Yuan(2021) <sup>[7]</sup>
	Plasmonic		Cerjan(2019) <sup>[8]</sup>
	Metamaterial	Cadusch(2019) <sup>[5]</sup> , Meng(2020) <sup>[6]</sup>	

### 1.2.3 中赤外ディテクタおよび波長選択性を実現する構造

中赤外ディテクタには大きく分けて量子型と熱型が存在する<sup>[58, 59]</sup>。量子型とは、可視光や近赤外領域におけるシリコンを用いたフォトディテクタと同様に、光子とエネルギーを交換したキャリアが半導体のバンドギャップなどのエネルギー障壁を乗り越えるのを利用するディテクタである。高速応答が可能なものの、信号雑音比よく中赤外領域の受光を行うためには、熱によるキャリアの励起を抑える必要があり、冷却機構を有する大掛かりで高価な筐体が求められ、素材も特殊なものを用いる必要がある。歴史的には化合物半導体、とくにHgCdTeが長らく主流の中赤外ディテクタとして用いられてきた。このような素材の特殊性ゆえ、中赤外領域の利用は限られていた。一方の熱型とは、熱的に隔離された小さな素子に中赤外線を吸収させ、熱に変換してその温度変化を電気的に検出する方法である。冷却が必要なく、比較的安価で単純な運用が可能である<sup>[58]</sup>。従来の中赤外ディテクタは応答速度や感度に難があった。応答速度を高めるためには受光素子の熱容量を減らすことが求められ、基板への熱伝導を最小限にするための微小な梁で支持され

た複雑で微細な小型受光素子を形成する必要があったためである。しかし、近年の微細加工技術の進歩により、熱型中赤外ディテクタが普及したため民間利用がすすんでいる。

量子型ディテクタでは、光子エネルギーがエネルギー障壁を下回るため光を検出できなくなるカットオフ波長が存在するのに対し、熱型中赤外ディテクタは光の強度によって感度が変化しない利点がある。したがって、光を吸収して熱に変換することさえできれば遠赤外領域まで光検知することが可能である。熱を電気信号に変換する方式によりさらに分類され、熱による抵抗変化を捉えるボロメータ、焦電効果を利用するもの、熱電効果を利用するサーモパイルなどがある。2010年現在では市場の95%をボロメータが占めている<sup>[59]</sup>。ボロメータの場合、温度抵抗変化係数が大きい素材が大きな信号を生むので、製品レベルでは酸化バナジウム、アモルファスシリコン、BaSrTi、シリコン・ゲルマニウム合金などが有望な素材として使用されている。しかし原理的には、抵抗が温度によって変化する物質であれば、ボロメータを形成することは可能である。

中赤外領域での波長選択性実現に関する研究は、エミッタに関する研究の形で多く行われてきた<sup>[30]</sup>。エミッタにおいて中赤外領域で波長選択性を実現する方法としては、材料の波長特性<sup>[60]</sup>、フォトニッククリスタル<sup>[61,62]</sup>、メタマテリアル<sup>[63,64]</sup>、プラズモニック構造<sup>[65,66]</sup>を用いる方法などがある。エミッタの放射率と同構造の吸収率は等しいので、これらの構造を熱型赤外ディテクタの受光面として使用できれば波長選択性を有する中赤外ディテクタが構成できると考えられる。しかし、エミッタの設計は多数の受光面を配列して同時に受光する再構成分光への応用とは別の観点から行われており、応用にはさらなる検討が必要である。

### 1.2.4 回折格子を用いた表面プラズモン共鳴センサ

本研究のディテクタは表面プラズモン共鳴 (Surface Plasmon Resonance, SPR) を利用したディテクタである。SPRとは、金属表面の自由電子が入射光とエネルギーの授受を行い、集団的に振動する状態で、プリズムや回折格子を利用して引き起こすことができる現象である<sup>[67]</sup>。共鳴条件が金属表面に接する誘電体の誘電率(屈折率)に非常に敏感なため、共鳴時にみられる光反射率の急激なディップが発生する条件を調べることで物質の検出を行う技術が広く利用されている。

SPRには、金属表面を伝搬してゆく伝搬型SPRと、入射波長よりも小さな金属構造において局所的に電荷が振動する局在SPRが存在する。伝搬型SPRは入射波長や入射角に鋭敏に依存する現象で、これを利用して波長方向に鋭く変化する特性を実現することができる。回折格子を用いる場合には、垂直に光を入射したときにも伝搬型SPRを発生させることが可能である。入射角に対する応答の鋭さなど、共鳴条件まわりの振る舞いを最適化するための回折格子形状の検討が行われている<sup>[68,69,70,71,72]</sup>が、用途ごとに最適な条件を見出すのが一般的である。

SPRが共鳴時に光を多く吸収するのは、光エネルギーを金属構造に取り込むことを意味し、SPRが発生すると高エネルギーのキャリア(電子または正孔)が生成される<sup>[73]</sup>。金属・半導体接触界面(Schottky接合)やpn接合のエネルギー障壁等を利用して高エネルギーキャリアを発生箇所から取り去らない限り、やがてキャリアの運動エネルギーは熱に変換される。したがって、SPRを利用して特定の波長・入射角のときに熱を発生させることが可能である。このことを利用して、回折格子を用いておこしたSPRで熱を発生させ、

金属薄膜の抵抗を変化させ、入射角を変化させたときの SPR 発生を電氣的に検出するデバイスの報告もある<sup>[72]</sup>。本研究は角度走査ではなく、波長方向のスペクトルを得ることを目的とするので、SPR の利用方法は異なるが、SPR を熱で捉える技術という点では同じである。

### 1.3 関連する先行研究

---

#### 1.3.1 プラズモニック中赤外ディテクタ

Ogawa ら<sup>[58]</sup>は、熱電対型の熱型赤外ディテクタの上にプラズモニック構造をつくりつけ、波長依存性や偏光依存性を実現するディテクタを報告している。MEMS (Micro Electro-Mechanical Systems) プロセス技術を用いて、シリコン基板上に、基板からの熱伝導を抑えるために長さをとって受光面を支える支柱と宙に浮いた受光面を実現した。支柱の中には熱電対の信号読み出し用の配線がなされ、受光面上には金でコーティングされた円形の凹みが設けられている。このくぼみの直径と配列周期を  $3\ \mu\text{m}$  および  $4.0\ \mu\text{m}$  から  $6\ \mu\text{m}$  および  $10.5\ \mu\text{m}$  まで変えることで、波長感度特性の単峰性ピークを約  $4\ \mu\text{m}$  から約  $10.5\ \mu\text{m}$  まで実現している。凹構造の寸法によって幅があるが、波長感度特性の全幅半値幅 (Full-Width Half-Maximum, FWHM) は  $1\ \mu\text{m}$  から  $2.5\ \mu\text{m}$  程度、最小・最大感度比は約 15% である。FWHM は広いものの、熱型赤外ディテクタ上に寸法の異なるプラズモニック構造をつくりつけることで、広い波長範囲で特徴的な波長感度特性を実現することができることを実証した研究である。

Zheng ら<sup>[74]</sup> および Cerjan ら<sup>[8]</sup> は同じ研究グループで、 $10^{19}\ \text{cm}^{-3}$  以上の高ドーピング p 型シリコン基板上にアルミニウムの回折格子をつくりつけたデバイスを報告している。回折格子は平坦なシリコン基板上に製作され、 $300\ \text{nm}$  の厚さでピッチの 20% の空隙を有する。受光面の寸法は  $25 \times 30\ \mu\text{m}^2$  で、ピッチ  $1.25\ \mu\text{m}$  から  $3.6\ \mu\text{m}$  の 20 種の回折格子を製作している。回折格子はアルミニウム電極も兼ねており、p 型シリコン基板と Schottky 接合を形成している。シリコン基板にはさらにインジウム電極が別に作り付けられ、回路を形成する。正孔はアルミニウム電極からシリコン基板内を通過してインジウム電極から外部へ流出し読み出される。回折格子に光が当たると、SPR の作用でシリコン基板の抵抗率が変化するので、外部から電圧を与えておけば光応答が電流変化として検出できるという原理である。これらのディテクタについて、Cerjan らは波長  $2.2 - 3.8\ \mu\text{m}$  の中赤外領域における応答をもとに、圧縮センシングを利用した再構成により、 $40\ \text{nm}$  の波長分解能を達成したと報告している。素材も特殊なものを使用せず、一般的な半導体プロセスで作成でき、外部フィルタもない、ディテクタの構成としては非常に簡便なものである。必ずしも丁寧なデバイスの取り扱いを必要としない、広い応用展開が望めるデバイスであると期待できる。ただし、回折格子の形状は単純に互いに異なる波長感度特性を呈出させるものにとどまっており、ノイズ耐性などを考えられていない。

#### 1.3.2 再構成分光法における適切な波長感度特性について

波長感度特性の適切性について述べた論文は多くないが、Oliver ら<sup>[51]</sup> は数値計算によって、ランダムな透過スペクトルを有するフィルタを用いて波長分解能を向上させる方法を提案した。Wang ら<sup>[56, 57]</sup> は、同様に波長分解能を高める上で波長感度特性のランダムさが重要でという考えに立ち、2 次元的フォトニック

クリスタルを用いて、可視光領域において変化に富む透過スペクトルを有する光透過フィルタを報告した。ここで報告されたフィルタは、規則的に円形の穴が配置された 2 次元フォトニッククリスタルが 1 枚のスラブ上に 36 面作り付けられたもので、CMOS センサの上に配置されており、それぞれのフォトニッククリスタルを透過した光を 1 つ 1 つの CMOS センサが受光する仕組みである。各フォトニッククリスタルがどのような透過特性を有するかを予め設計して作製しなくても、波長方向に変化に富んだ透過スペクトルを有するので、周期構造のパラメータを変化させることで互いに異なる透過スペクトルを有するフィルタアレイが作製できることを利用している。これらのどの研究も対象波長領域は可視または近赤外であるが、中赤外領域においても同様の考え方は適用可能である。

しかし、ランダムな波長感度特性は、互いの相関を小さくする上で必ずしも必要ではなく、十分条件に過ぎない上、望んだ波長領域、ディテクタ (あるいはフィルタ) 数でデバイスを作製する上で設計の指針を全く与えないという点は欠点であるといえる。光の透過や吸収特性を利用する以上、全くランダムな現象はありえず、そのなかで相関の低い波長感度特性を数十通り集めることは、デバイスの改善や他用途への転用などの応用可能性に乏しい。

相関の低い波長感度特性の組を用意するには、急峻に変化する波長感度特性を波長方向に少しずつずらすことが考えられる。ある波長においてあるディテクタの波長感度特性が急峻に変化する時、その波長範囲において急峻な波長感度特性は他の波長感度特性と明確に区別でき、線形独立性を担保することができる。この考え方は、再構成分光法においては新しいものではなく、空間的に変化するバンドギャップを用いるもの<sup>[4,7]</sup>や外部フィルタを用いるものの多く<sup>[31,46,47,48,55]</sup>は、結果的には似た特徴を有する波長感度特性を波長方向にずらして波長感度特性の組を構成している。

この考え方にたつとき、波長感度特性に求められるのは 1. 高ダイナミックレンジであること、2. 急峻な波長感度特性であること、3. 急峻な特徴の出現波長を任意に実現可能であることである (**Fig. 1.3**)。ディテクタの波長感度特性にオフセットが大きくダイナミックレンジが狭い場合、変化する特徴が相対的に小さくなり、波長感度特性に急峻な特徴がないと他のディテクタの波長感度特性との区別が曖昧になる。そして、計測範囲内でむらなく高分性能を実現するためには、すべてのディテクタの急峻な変化の範囲が計測波長範囲を網羅している必要がある。中赤外領域における再構成分光の研究では、FADA 方式ではこれを実現することができていたが、ディテクタ自体の感度に波長依存性をもたせる方法としては改善が必要な状況にあった。

---

### 1.4 本研究の端緒となった細幅なトレンチ構造

---

冒頭に述べたように、本研究の発端は機能性中赤外ディテクタの受光面として、細幅なトレンチを配列しアルミニウム連続膜で覆った回折格子を用いたところ、急峻な波長感度特性が得られたことであつた。**Fig. 1.4**にその時用いた構造と波長感度特性を示す。回折格子ピッチが  $3.0\ \mu\text{m}$ 、深さ  $500\ \text{nm}$  のトレンチをピッチの 10%にあたる  $300\ \text{nm}$  幅でシリコン基板表面に掘り、アルミニウムの連続膜でコーティングした。垂直な光入射に対してデバイス上では伝搬型 SPR が生じ、波長感度特性には特に急峻な立ち上がりが見られ、 $100\ \text{nm}$  以内の波長範囲で 5 倍以上に感度が上昇した。先行研究のように回折格子のパラメータを調節すれば、この急峻な立ち上がり位置をずらしていくことができると考えられる。その結果得られる数々の波長感

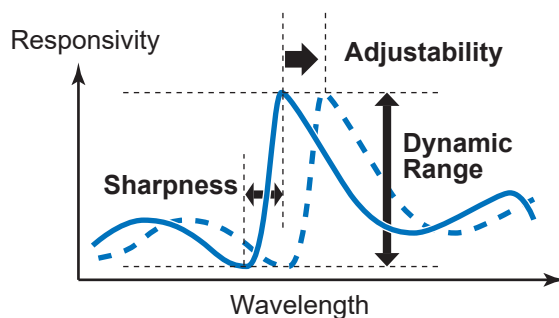


Fig. 1.3 再構成分光に必要な波長感度特性の要件.

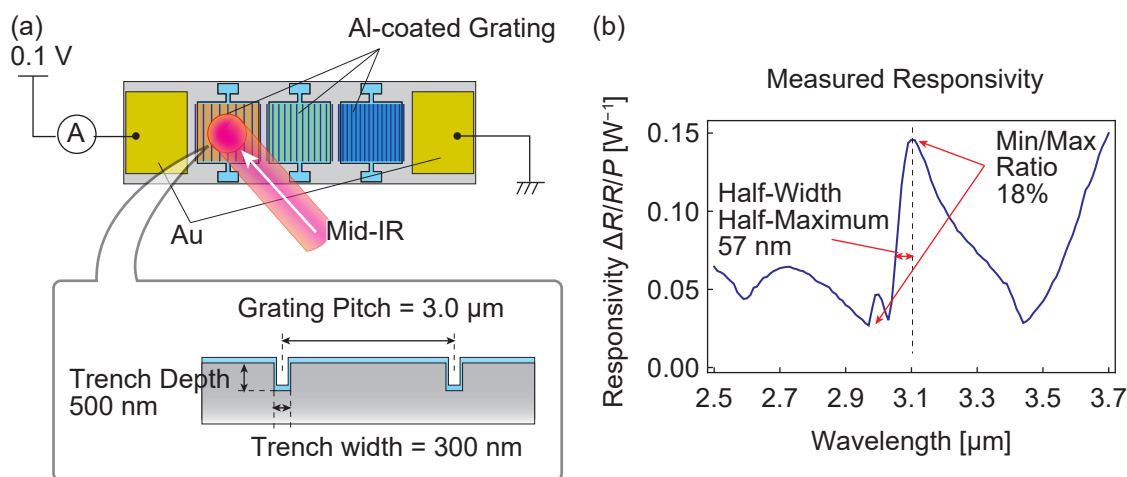


Fig. 1.4 中赤外ディテクタの構造 (a) および得られた波長感度特性 (b)<sup>[75]</sup>. (©2021 IEEE, 一部改変)

度特性は互いに立ち上がりの位置がずれ、急峻な立ち上がりゆえピーク位置が近くても同じ波長では大きな差となるので、互いの相関を小さくすることができるはずである。第 1.2.3 項で述べた、中赤外領域において波長感度特性を実現する方法と比較しても実現が容易な構造であり、本構造に基づいて分光器が実現できれば、広い応用が見込めると考えられる。

シリコン基板上のトレンチ構造はこれまでも種々のデバイスに利用されてきた。プラズモニックでない構造では可視・近赤外領域で動作する p-n または p-i-n フォトダイオードにおいて、クロストークを抑え、光吸収効率を高める構造としてシリコンの深掘りトレンチ<sup>[76, 77, 78]</sup>が報告されているが、根本的に異なる設計指針に基づき、異なる現象を利用するものである。プラズモニックデバイスとしては、近赤外領域で Schottky 障壁を超えるホット電子を捉えるフォトディテクタ<sup>[79, 80, 81]</sup>、近赤外領域における SPR 化学量センサ<sup>[69, 82]</sup>、そして中赤外領域でのアブソーバ・エミッタ<sup>[83, 84]</sup>がある。しかし、本研究のように、ピッチの 10% まで細くしたトレンチを用いて伝搬型 SPR を利用するデバイスはなく、本構造は新規な構造である。

したがって、今回見いだされた本回折格子形状の光応答特性については、実験的検証が必要である。本研

究では、デバイス製作と計測によって実際に得られた波長感度特性を再構成分光法における適切性の観点から評価し、回折格子を構成するパラメータなどによる応答の変化を実験的に検証することから着手した。

## 1.5 本論文の構成

---

### 第1章 序論

本研究の目的を述べ、小型分光器や中赤外ディテクタについての背景と、再構成分光法に関する先行研究について述べた。

### 第2章 理論

実験に先立ち、計測の理論とデバイス動作原理、デバイス製作について述べる。計測の理論では再構成分光法に関する理論である劣決定問題から、ディテクタが有すべき波長感度特性の条件を、フーリエ変換の考え方をを用いて導く。そして、それを実現するための基礎となる表面プラズモン共鳴、デバイスの動作原理についても述べる。その後、回折格子パラメータを検証するためのデバイス設計製作および実験方法について述べる。

### 第3章 デバイス評価

回折格子形状を決定するパラメータと、波長感度特性および反射率スペクトルを含めたデバイス性能の関係について、第2章で導いた理論と、実験結果をもとに詳述する。そして、再構成に適していると考えられる構造のデバイスを用いて実際に計測した波長感度特性で数値的に入射スペクトルの再構成を行い、本研究で提案する回折格子構造のディテクタが再構成分光を行うことができることを示す。また、本研究のディテクタの動作原理について実験的に検証する。その上で、再構成分光を行うための回折格子受光面構造の組をワンチップ上に同時に配置したデバイスを実際に設計製作し、小型分光器の実現可能性を示す。

### 第4章

本論文の結論を述べる。

## 第2章 理論

### 2.1 計測の理論: 再構成分光法

#### 2.1.1 記号の定義

$e$	真のスペクトルと推定したスペクトルの差のノルム
$E_n$	$n \times n$ の単位行列
$M$	計測範囲内のスペクトルを波長方向に離散化した点数
$N$	分光器に含まれるディテクタの個数
$r_i$	$i$ 番目のディテクタの波長感度特性を表す縦ベクトル
$R$	各ディテクタの波長ごとの感度を行ベクトルにもつ行列. $i$ 行目は $r_i^T$ である. 感度行列と呼称する.
$I, I^{\text{obs}}$	ディテクタの計測値を並べた縦ベクトル
$P$	離散化した入射強度スペクトルを表す縦ベクトル
$P^{\text{true}}$	真の入射強度スペクトル
$P^{\text{est}}$	入射強度スペクトルの推定値
$\lambda$	波長

#### 2.1.2 再構成分光法の原理

本研究の対象である赤外線分光器は、赤外線の強度に線形に応答する一組の赤外線ディテクタからなる。波長  $\lambda$  に対する  $i$  番目のディテクタの感度が  $R_i(\lambda)$  であるとき、強度スペクトルが  $P(\lambda)$  の光入射に対するこのディテクタの出力  $I_i$  は

$$I_i = \int_0^{\infty} P(\lambda) R_i(\lambda) d\lambda \quad (2.1)$$

となる。実際の計測においては波長範囲を限定し、波長方向に離散化して議論するので、

$$I_i = \sum_{k=1}^M P_{\lambda_k} R_{i,\lambda_k} \quad (2.2)$$



と書くことができる。ただし  $M$  は波長方向の点数である。  $N$  個の各ディテクタについて同様の式が成立するので、まとめて

$$\mathbf{I} = \begin{bmatrix} I_1 \\ I_2 \\ \vdots \\ I_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} R_{1,\lambda_1} & R_{1,\lambda_2} & \cdots & R_{1,\lambda_M} \\ R_{2,\lambda_1} & R_{2,\lambda_2} & \cdots & R_{2,\lambda_M} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ R_{N,\lambda_1} & R_{N,\lambda_2} & \cdots & R_{N,\lambda_M} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} P_1 \\ P_2 \\ \vdots \\ P_M \end{bmatrix} \quad (2.3)$$

$$= \mathbf{R}\mathbf{P}$$

と書くことができる。再構成は、計測値  $\mathbf{I}$  と予め計測しておいた  $\mathbf{R}$  からもとのスペクトル  $\mathbf{P}$  を推測する逆問題である。

### 2.1.3 劣決定問題

方程式  $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{y}$  において、 $\mathbf{x}$  のすべてのパラメータを一意に決定するには  $\mathbf{y}$  の情報が不十分である時、その問題は劣決定であるという。本研究であつかう逆問題では、ディテクタの個数は予め限られているのに対し、スペクトル方向には分割数を増やすことができるので、ディテクタの個数に対して離散スペクトル上の点数が多くなる劣決定問題を扱うことになる。

解となるスペクトルの自由度が計測値の自由度に対して大きいので、方程式  $\mathbf{R}\mathbf{P} = \mathbf{I}$  の解  $\mathbf{P}$  は無限にある。その中から最ももつともらしい解を選び取る上では、解に関する先験情報が必要となる。最小ノルム解 (Minimum Norm Solution) はその中でも代表的な方法であり、本研究においてはこの方法をもとに議論する。最小ノルム解とは、解  $\mathbf{P}$  のうち  $L_2$  ノルムが最小となるものを指す<sup>[85]</sup>。最小ノルム解  $\mathbf{P}^{\text{MNS}}$  は  $\mathbf{I} - \mathbf{R}\mathbf{P} = \mathbf{0}$  の拘束条件のもと、 $\mathbf{P}$  の  $L_2$  ノルムの2乗  $\mathbf{P}^T\mathbf{P}$  を最小化するという問題を Lagrange 未定乗数法を用いて解くことで求められ、

$$\mathbf{P}^{\text{est}} = \mathbf{P}^{\text{MNS}} = \mathbf{R}^T (\mathbf{R}\mathbf{R}^T)^{-1} \mathbf{I} = \mathbf{R}^{-g} \mathbf{I} \quad (2.4)$$

で表される<sup>[86]</sup>。このとき

$$\mathbf{R}^{-g} = \mathbf{R}^T (\mathbf{R}\mathbf{R}^T)^{-1} \quad (2.5)$$

を劣決定問題の一般化逆行列または擬似逆行列という。

### 2.1.4 特異値分解

行列  $\mathbf{R} \in \mathbb{R}^{N \times M}$  は直交行列  $\mathbf{U} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ 、 $\mathbf{V} \in \mathbb{R}^{M \times M}$  を用いて

$$\mathbf{R} = \begin{bmatrix} \mathbf{u}_1 & \cdots & \mathbf{u}_N \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sigma_1 & & 0 & \cdots & 0 \\ & \ddots & \vdots & & \vdots \\ & & \sigma_N & 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{v}_1^T \\ \vdots \\ \mathbf{v}_M^T \end{bmatrix} = \mathbf{U}\mathbf{\Sigma}\mathbf{V}^T \quad (2.6)$$

と書ける。ただし  $\sigma_k (1 \leq k \leq N)$  は行列  $\mathbf{R}$  の特異値で、 $\mathbf{R}$  とその随伴行列の積  $\mathbf{R}\mathbf{R}^*$  (いまは実行列を考えているので  $\mathbf{R}\mathbf{R}^T$ ) の固有値の非負の平方根である。これを特異値分解という。正方行列を用いて行または列の入れ替えをすることができるので、 $\mathbf{\Sigma}$  の  $(i, i)$  成分の特異値は最大のものから降順に並べることができる。以

下, 基本的に特異値分解を行った時の特異値は  $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots$  と降順になるようにするものとする.  $\mathbf{U}, \mathbf{V}$  は直交行列なので, 各列ベクトルの内積はクロネッカーのデルタになる:

$$\mathbf{u}_k^T \mathbf{u}_l = \delta_{kl} \quad (1 \leq k, l \leq N) \quad (2.7)$$

$$\mathbf{v}_k^T \mathbf{v}_l = \delta_{kl} \quad (1 \leq k, l \leq M) \quad (2.8)$$

$\mathbf{u}_k, \mathbf{v}_k$  はそれぞれ計測値のベクトル空間, スペクトルのベクトル空間の基底をなすので, 計測値  $\mathbf{I}$  は  $\mathbf{u}_k$  の, スペクトル  $\mathbf{P}$  は  $\mathbf{v}_k$  の線形結合で以下のように書くことができる.

$$\mathbf{I} = \sum_{k=1}^N a_k \mathbf{u}_k \quad (2.9)$$

$$\mathbf{P} = \sum_{k=1}^M b_k \mathbf{v}_k \quad (2.10)$$

ここで  $a_k, b_k$  は実数の係数である. 式 (2.6) の右から  $\mathbf{V}$  をかけた  $\mathbf{RV} = \mathbf{U}\Sigma$  を列ごとに見ると,

$$\mathbf{R}\mathbf{v}_k = \begin{cases} \sigma_k \mathbf{u}_k & (1 \leq k \leq N) \\ 0 & (N+1 \leq k \leq M) \end{cases} \quad (2.11)$$

となる. したがって式 (2.10) より

$$\begin{aligned} \mathbf{I} = \mathbf{RP} &= \mathbf{R} \sum_{k=1}^M b_k \mathbf{v}_k \\ &= \sum_{k=1}^N b_k \sigma_k \mathbf{u}_k + \sum_{k=N+1}^M b_k \cdot 0 \end{aligned} \quad (2.12)$$

を得る. これと式 (2.9) を比較すると,  $1 \leq k \leq N$  について  $b_k \sigma_k = a_k$  すなわち

$$b_k = \frac{a_k}{\sigma_k} \quad (2.13)$$

が成立し, それ以外の係数  $b_k$  ( $N+1 \leq k \leq M$ ) については任意の値が許されることがわかる. 劣決定問題においてこのように解は一意に定まらず, 解に関する先験情報をもとに解を決定する.

$\mathbf{P}$  の  $L_2$  ノルムの2乗  $\mathbf{P}^T \mathbf{P}$  は式 (2.8) より

$$\begin{aligned} \mathbf{P}^T \mathbf{P} &= \left( \sum_{k=1}^N b_k \mathbf{v}_k + \sum_{k=N+1}^M b_k \mathbf{v}_k \right)^T \left( \sum_{k=1}^N b_k \mathbf{v}_k + \sum_{k=N+1}^M b_k \mathbf{v}_k \right) \\ &= \sum_{k=1}^N b_k^2 + \sum_{k=N+1}^M b_k^2 \end{aligned} \quad (2.14)$$

であるから, ノルム最小となるのは  $b_k = 0$  ( $N+1 \leq k \leq M$ ) となるときである. したがって最小ノルム解は

$$\mathbf{P}^{\text{MNS}} = \sum_{k=1}^N \frac{a_k}{\sigma_k} \mathbf{u}_k \quad (2.15)$$

で表される.

計測においては計測誤差は避けることができないものであり、その計測誤差は式(2.9)により  $a_k$  に転嫁される。式(2.15)より、推定には  $a_k$  が  $1/\sigma_k$  倍される。したがって、もし感度行列  $\mathbf{R}$  の特異値のなかに非常に小さい値があった場合には、計測誤差が大きく増幅され、大きな推定誤差につながり、解が不安定になる。小さな特異値をゼロとみなして再構成を行うことも可能だが、その分自由度が下がるので解の分解能が低下することに繋がる。また、小さな特異値の打ち切りを決定する閾値に恣意性が生じ、解の妥当性が保証できなくなる。分解能を保ったまま計測誤差に対してロバストに入射スペクトルの推定を行うためには、特異値の中に非常に小さい値がないことが必要である。

ノイズに対するロバストさの指標として条件数 (condition number) が知られている。条件数とは、逆問題の悪条件の指標として用いられるもので、誤差が解に伝搬する際の倍率の上限を表す。行列  $\mathbf{R}$  の条件数  $\kappa(\mathbf{R})$  は

$$\kappa(\mathbf{R}) = \|\mathbf{R}^{-g}\| \cdot \|\mathbf{R}\| \quad (2.16)$$

で定義され、行列のノルムにユークリッドノルムを使用する場合、最大特異値と最小特異値の比に等しい。

$$\kappa(\mathbf{R}) = \frac{\sigma_1}{\sigma_N} \quad (2.17)$$

特異値の定義と行列のトレースについての恒等式  $\text{tr}(\mathbf{A}) = \sum_i \alpha_i$  (ただし  $\alpha_i$  は行列  $\mathbf{A}$  の固有値) より

$$\sum_{i=1}^N \sigma_i^2 = \text{tr}(\mathbf{R}\mathbf{R}^T) = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^M R_{ij}^2 \quad (2.18)$$

の関係があるから、最大特異値について

$$\sigma_1 \geq \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^M R_{ij}^2} \quad (2.19)$$

と下限が定まる。したがって、感度のオーダが決まれば、最大特異値の値はある程度決定される。したがって、最大特異値を下げることは困難であり、最小特異値を上げることがノイズに対するロバストさを確保する上での方針となる。

行列  $\mathbf{R}$  の  $k$  番目の特異値  $\sigma_k$  に対応する右特異ベクトル  $\mathbf{v}_k$  は、 $\mathbf{R}$  の各行、すなわち各ディテクタの波長感度特性  $r_i$  ( $1 \leq i \leq N$ ) の第  $k$  主成分である。したがって、最小固有値が大きいことは各ディテクタの波長感度特性のばらつきが大きく、どれも互いに類似度が低いことと同値である。

### 2.1.5 波長感度特性の適切性

分光器の評価指標としては、前項で述べた計測誤差に対するロバストさと波長分解能に加え、そもそも再構成によって真のスペクトルがどれだけ正しく再現できるか、すなわち再構成の精度が挙げられる。前者については感度行列  $\mathbf{R}$  の特異値の分布で評価することが可能である。すなわち、最大特異値に比した際の最小特異値が大きさがノイズに対する解の安定性の指標となる。後者は、真のスペクトルと推定したスペクトルの差のノルム  $e = \|\mathbf{P}^{\text{true}} - \mathbf{P}^{\text{est}}\|$  で測ることができる。ノイズがない状態では、式(2.3)と式(2.4)から

$$\mathbf{P}^{\text{est}} = \mathbf{R}^{-g} \mathbf{I}^{\text{obs}} = \mathbf{R}^{-g} \mathbf{R} \mathbf{P}^{\text{true}} \quad (2.20)$$

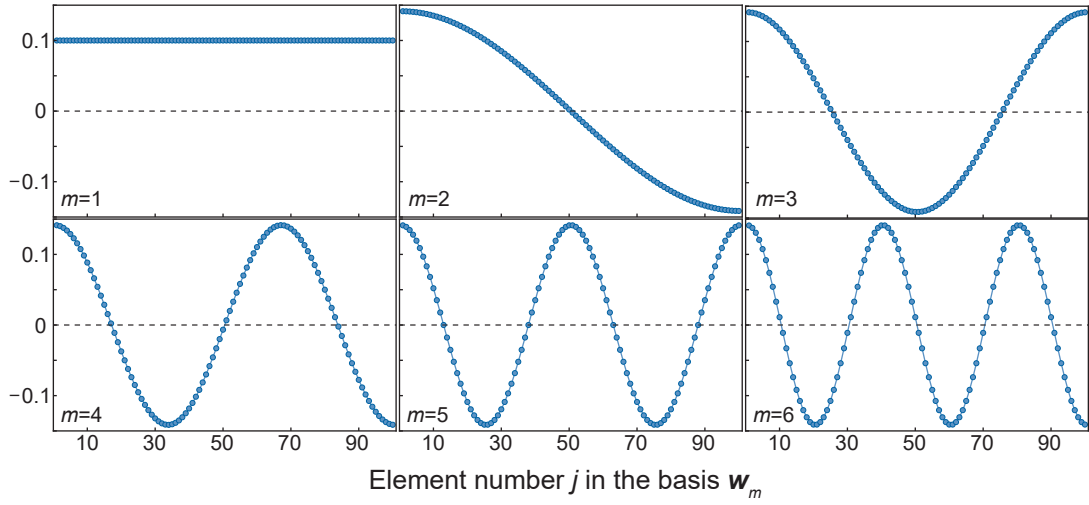


Fig. 2.1  $M = 100$  のときの基底  $w_m$  のプロット.

が成立するので,

$$e = \|(E_M - R^{-g}R)P\| \quad (2.21)$$

と書くことができる.

### 2.1.6 波長感度特性の急峻さと分光性能

各ディテクタの波長感度特性の急峻さを定量化するため、三角関数を基本とする基底で波長感度特性を表現することを考える. 急峻なフィーチャがあれば、より高い振動成分まで大きな振幅を有する. したがって、高い振動成分の絶対値により急峻さを表現できると考えられる. しかし、通常の離散フーリエ変換では周期的な信号を想定するので、波長感度特性の両端の値が異なる場合、その接続部はステップ関数のようになる. これが原因で高周波成分まで大きな値をもたせることになり、波長感度特性自体がもつ高周波成分と区別ができない. 実際、Fig. 1.4 に示した波長感度特性では、両端の値が大きく異なる. そこで本研究では、両端の差を吸収でき、かつ振動のはやさを表現できる基底として、半整数倍振動のコサインカーブを用いる. 各要素が次のように表される  $M$  本の  $M$  次元ベクトル  $\{w_m\}$  はスペクトル空間における正規直交基底をなす.

$$(w_m)_j = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{M}} & m = 1 \\ \sqrt{\frac{2}{M}} \cos\left(\pi \frac{m-1}{M} (j - \frac{1}{2})\right) & m \geq 2 \end{cases} \quad (2.22)$$

これらは  $w_1$  が DC 成分を表し、 $w_2$  がスペクトル全幅の 2 倍を周期とする 0.5 倍振動成分、 $w_3$  がスペクトル幅のを周期とする基本振動、 $w_4$  が 1.5 倍振動、...となっている.  $M = 100$  のときの例を Fig. 2.1 に示す. これらの基底はスペクトル空間の正規直交基底であるから、 $i$  番目のディテクタの波長感度特性  $r_i$  を次

のように書き表すことができる。

$$\mathbf{r}_i = \kappa_{i1}\mathbf{w}_1 + \kappa_{i2}\mathbf{w}_2 + \cdots + \kappa_{iM}\mathbf{w}_M \quad (2.23)$$

この表現の形は、次のように定義される離散フーリエコサイン変換のタイプ II を行うこととほぼ同一であるが、各基底が正規化されている点が異なる。

$$X_m = \sum_{j=1}^M x_j \cos \left[ \pi \frac{m}{M} \left( j - \frac{1}{2} \right) \right] \quad (2.24)$$

これは数列  $\{x_m\}$  を折り返して 2 倍長の数列とし離散フーリエ変換することと同義で、数列の振動の速さを表す数列に変換できる。

$N$  個のディテクタについてまとめると、以下のように表現できる。

$$\mathbf{R} = \begin{bmatrix} \mathbf{r}_1^T \\ \mathbf{r}_2^T \\ \vdots \\ \mathbf{r}_N^T \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \kappa_{11} & \kappa_{12} & \cdots & \kappa_{1M} \\ \kappa_{21} & \kappa_{22} & \cdots & \kappa_{2M} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \kappa_{N1} & \kappa_{N2} & \cdots & \kappa_{NM} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{w}_1^T \\ \mathbf{w}_2^T \\ \vdots \\ \mathbf{w}_M^T \end{bmatrix} = \mathbf{KW} \quad (2.25)$$

ここで、行列  $\mathbf{K}$  の各行ベクトル  $\boldsymbol{\kappa}_k$  ( $1 \leq k \leq N$ ) は、対応するディテクタの波長感度特性の振動周期ごとの強さを表しており、左に行くほど長い振動周期に、右に行くほど短い振動周期に対応する。また、 $\mathbf{W}$  は  $M \times M$  の直交行列である。

これ以降、本論文においてフーリエ変換とはこの半整数倍のコサインカーブを基底として表現することを指す。感度行列のフーリエ逆変換は  $\mathbf{R} = \mathbf{KW}$  で、フーリエ変換は  $\mathbf{K} = \mathbf{RW}^T$  によって計算できる。そして、各コサインカーブの係数を並べた行列  $\mathbf{K}$  を、フーリエ係数行列と呼ぶことにする。

### 計測誤差に対するロバストさ

式 (2.6) より、 $\mathbf{R} = \mathbf{U}\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{V}^T = \mathbf{KW}$  であるから、右から  $\mathbf{W}^T$  をかけて

$$\mathbf{K} = \mathbf{U}\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{V}^T\mathbf{W}^T = \mathbf{U}\boldsymbol{\Sigma}(\mathbf{W}\mathbf{V})^T \quad (2.26)$$

が成立する。ここで、 $\mathbf{W}, \mathbf{V}$  はともに直交行列であるからその積も直交行列である。したがって、式 (2.26) は行列  $\mathbf{K}$  についての対角化の形となっており、 $\mathbf{K}$  の特異値は  $\mathbf{R}$  の特異値と同一である。第 2.1.5 項で述べたように、この特異値の最小値が最大値に比べ小さくないことが計測誤差に対するロバストさを示し、第 2.1.4 項より最小固有値の大きさは行列  $\mathbf{K}$  の各列ベクトルのばらつきを示すので、 $\mathbf{K}$  の各列はなるべく互いに類似度が低くなる必要がある。

波長感度特性は連続的に変化するため、遅い振動成分ほど大きな値をもち、速い振動成分になるほど寄与が小さくなっていくと考えられる。仮に  $\mathbf{K}$  の各行ベクトル  $\boldsymbol{\kappa}_k$  が非常に遅い変化の成分しか持たず、速い変化の成分が急激に小さくなるようなものであると、実質的にベクトルを表現するパラメータは遅い変化の成分のみとなり、互いの相違度を確保することが難しくなる。したがって、計測誤差に対するロバストさを確保する上で、遅い変化に対応する成分から十分速い変化する成分まで広く含むことが必要である。全  $N$

個の波長感度特性が互いに十分に線形独立となるためには、少なくとも  $N$  次元の要素が必要であり、したがって  $N$  個の振動成分が十分大きな必要がある。大きな寄与をもつ遅い振動から順に  $N$  個の振動成分を考えるとこれは  $(N-1)/2$  倍振動までの成分に相当するので、ノイズ耐性を高めるためには、少なくとも計測波長範囲で  $(N-1)/2$  回以上振動するような振動成分まで大きな振幅を有する波形が必要であることを意味している。

それよりも早い振動成分の振幅が大きい場合、互いの波長感度特性の独立性を高める働きをするので、ノイズ耐性には有利に働くと考えられるが、次項に述べる再構成の精度についても考慮が必要である。

### 再構成の精度

本項では行列のノルムとして以下で定義されるユークリッドノルムを用いる。

$$\|A\| = \sup_{\mathbf{x} \neq \mathbf{0}} \frac{\|A\mathbf{x}\|}{\|\mathbf{x}\|} \quad (2.27)$$

行列のユークリッドノルムは、その行列の最大特異値である。

推定誤差は第 2.1.5 項での議論より  $e = \|(E_M - R^{-g}R)P\|$  で与えられる。ここに  $R = KW$  を代入すると、式 (2.15) より

$$\begin{aligned} e &= \|(R^{-g}R - E_M)P^{\text{true}}\| \\ &= \|(R^T(RR^T)^{-1}R - E_M)P^{\text{true}}\| \\ &= \|(W^TK^T(KWW^TK^T)^{-1}KW - E_M)P^{\text{true}}\| \\ &= \|W^T(K^T(KK^T)^{-1}K - E_M)WP^{\text{true}}\| \\ &= \|(K^T(KK^T)^{-1}K - E_M)WP^{\text{true}}\| \end{aligned} \quad (2.28)$$

ここで 4 段目から 5 段目において  $W$  が直交行列のためベクトルの大きさを変えないことを利用した。

$WP^{\text{true}}$  は、入射スペクトル  $P^{\text{true}}$  の振動周期ごとの成分を表しており、そのノルムは  $P^{\text{true}}$  と等しい。また、 $W$  が感度行列と関係なく定義された行列であるため、 $WP^{\text{true}}$  も感度行列とは無関係である。

ここで、行列  $K$  の左から第  $N$  列目までを  $K_N$ 、第  $N+1$  列目から第  $M$  列目までを  $\Delta$  と表すことにする。 $K_N$  は  $N \times N$  行列、 $\Delta$  は  $N \times (M-N)$  行列である。

$$K = \begin{bmatrix} K_N & \Delta \end{bmatrix} \quad (2.29)$$

$K_N$  は各ディテクタの波長感度特性の DC 成分から  $(N-1)/2$  倍振動成分までの情報を、 $\Delta$  は  $N/2$  倍以上の振動成分を表す行列である。波長感度特性は連続的であるため、高周波成分に比べ低周波成分が多く、 $K$  の成分の絶対値は左に行くほど大きく、右に行くほど小さい傾向がある。それと同時に、今回、各ディテクタの波長感度特性が互いに異なっていて線形独立である場合を考えているので、それを並べた感度行列  $R$  に単位行列をかけた  $K$  の各行も線形独立である。したがって、左から  $N$  列までの低周波成分のみで見ても  $K_N$  の各行は互いに線形独立であると考えられ、 $K_N$  は正則行列であり逆行列を持つと考えることができる。また、 $K_N$  の各要素は  $\Delta$  より十分大きく、 $K_N^{-1}\Delta$  の各要素の絶対値は 1 より十分小さいと考える。以下では、この仮定に基づいての議論する。

式(2.28)の  $\mathbf{K}^T(\mathbf{K}\mathbf{K}^T)^{-1}\mathbf{K}$  は次のように書くことができる.

$$\begin{aligned}\mathbf{K}^T(\mathbf{K}\mathbf{K}^T)^{-1}\mathbf{K} &= \begin{bmatrix} \mathbf{K}_N^T \\ \Delta^T \end{bmatrix} \left( \begin{bmatrix} \mathbf{K}_N & \Delta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{K}_N^T \\ \Delta^T \end{bmatrix} \right)^{-1} \begin{bmatrix} \mathbf{K}_N & \Delta \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \mathbf{K}_N^T \\ \Delta^T \end{bmatrix} (\mathbf{K}_N\mathbf{K}_N^T + \Delta\Delta^T)^{-1} \begin{bmatrix} \mathbf{K}_N & \Delta \end{bmatrix}\end{aligned}\quad (2.30)$$

ここで、 $\mathbf{K}_N$  の各要素の絶対値は  $\Delta$  の各要素の絶対値に比べ十分大きいので、式(2.30)において  $\Delta$  の2次以上の項を無視することにし、 $\mathbf{K}_N^{-1}\Delta = \mathbf{\Omega}$  とおくと、

$$\begin{aligned}\mathbf{K}^T(\mathbf{K}\mathbf{K}^T)^{-1}\mathbf{K} &= \begin{bmatrix} \mathbf{E}_N & \mathbf{K}_N^{-1}\Delta \\ \Delta^T(\mathbf{K}_N^T)^{-1} & \mathbf{O} \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \mathbf{E}_N & \mathbf{\Omega} \\ \mathbf{\Omega}^T & \mathbf{O} \end{bmatrix}\end{aligned}\quad (2.31)$$

を得る. いま、入射スペクトルを振動成分ごとに展開した  $\mathbf{W}\mathbf{P}^{\text{true}}$  のうち、第1から第  $N$  成分とそれより高次の振動成分を

$$\mathbf{W}\mathbf{P}^{\text{true}} = \begin{bmatrix} \tilde{\mathbf{P}}_N \\ \tilde{\mathbf{P}}_{M-N} \end{bmatrix}\quad (2.32)$$

とわけると、式(2.28)および式(2.31)より

$$\begin{aligned}e &= \left\| \begin{bmatrix} \mathbf{O} & \mathbf{\Omega} \\ \mathbf{\Omega}^T & -\mathbf{E}_{M-N} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \tilde{\mathbf{P}}_N \\ \tilde{\mathbf{P}}_{M-N} \end{bmatrix} \right\| \\ &= \left\| \begin{bmatrix} \mathbf{\Omega}\tilde{\mathbf{P}}_{M-N} \\ \mathbf{\Omega}^T\tilde{\mathbf{P}}_N - \tilde{\mathbf{P}}_{M-N} \end{bmatrix} \right\| \\ &= \sqrt{\|\mathbf{\Omega}\tilde{\mathbf{P}}_{M-N}\|^2 + \|\mathbf{\Omega}^T\tilde{\mathbf{P}}_N - \tilde{\mathbf{P}}_{M-N}\|^2} \\ &\leq \sqrt{\|\mathbf{\Omega}\tilde{\mathbf{P}}_{M-N}\|^2 + (\|\mathbf{\Omega}^T\tilde{\mathbf{P}}_N\| + \|\tilde{\mathbf{P}}_{M-N}\|)^2} \\ &\leq \sqrt{\|\mathbf{\Omega}\|^2\|\tilde{\mathbf{P}}_{M-N}\|^2 + (\|\mathbf{\Omega}^T\|\|\tilde{\mathbf{P}}_N\| + \|\tilde{\mathbf{P}}_{M-N}\|)^2}\end{aligned}\quad (2.33)$$

ここで、3行目から4行目においてベクトルノルムの劣加法性  $\|\mathbf{a} + \mathbf{b}\| \leq \|\mathbf{a}\| + \|\mathbf{b}\|$  を、4行目から5行目において行列のユークリッドノルムがベクトルのユークリッドノルムと両立する関係  $\|\mathbf{A}\mathbf{a}\| \leq \|\mathbf{A}\|\|\mathbf{a}\|$  を用いた. 劣加法性は

$$\begin{aligned}\|\mathbf{a} + \mathbf{b}\| &= \sqrt{\|\mathbf{a}\|^2 + \|\mathbf{b}\|^2 + 2\|\mathbf{a}\| \cdot \|\mathbf{b}\|} \\ &\leq \sqrt{\|\mathbf{a}\|^2 + \|\mathbf{b}\|^2 + 2\|\mathbf{a}\|\|\mathbf{b}\|} \\ &= \|\mathbf{a}\| + \|\mathbf{b}\|\end{aligned}\quad (2.34)$$

より、両立関係については行列ノルムの定義から

$$\begin{aligned}\|\mathbf{A}\mathbf{a}\| &= \|\mathbf{a}\| \left\| \mathbf{A} \frac{\mathbf{a}}{\|\mathbf{a}\|} \right\| \\ &\leq \|\mathbf{a}\|\|\mathbf{A}\|\end{aligned}\quad (2.35)$$

と示される。式 (2.33) より、推定誤差の上限は  $\|\boldsymbol{\Omega}\| = \|\mathbf{K}_N^{-1}\boldsymbol{\Delta}\|$  の増加関数である。したがって、定性的には、感度行列  $\mathbf{R}$  の振動周期ごとの成分を配列した  $\mathbf{K}$  において、左側  $N$  列までの値、すなわち  $(N-1)/2$  倍振動までの成分の絶対値が大きく、 $N+1$  列以降の値、すなわち  $N/2$  倍振動以上の成分の絶対値が小さいほど推定誤差が小さくなることがわかる。

もし仮に  $\mathbf{K}$  が  $N$  列目までの成分しか持たない場合には、 $\boldsymbol{\Omega} = \mathbf{0}$  であり

$$e = \|\tilde{\mathbf{P}}_{M-N}\| \quad (2.36)$$

となる。この誤差は、 $N$  個のディテクタを用いて再現することができない、スペクトルの高周波成分を指しており、入射スペクトルも  $N/2$  倍振動以上の成分がない場合には  $e = 0$  となる。

### 急峻さに関する要件まとめ

ノイズ耐性を向上させるための要請として、波長感度特性をフーリエ変換したときのフーリエ係数が高周波成分まで大きな絶対値をもつことが示された。これは、各ディテクタの波長感度特性のフーリエ係数が互いに線形独立となる必要があるため、 $N$  個すべてのディテクタのフーリエ係数が線形独立であるためには、少なくともフーリエ係数行列  $\mathbf{K}$  の左から  $N$  列の絶対値が大きい必要がある。左から  $N$  列の要素は、DC 成分、0.5 倍振動、1 倍振動、 $\dots$ 、 $(N-1)/2$  倍振動を表しており、したがって、少なくとも  $(N-1)/2$  倍振動に相当する成分までは波長感度特性に含まれている必要がある。

一方、精度に関する要請は、フーリエ係数行列  $\mathbf{K}$  の左から  $N$  列目までで構成した行列  $\mathbf{K}_N$  と、 $N+1$  列目以降で構成した行列  $\boldsymbol{\Delta}$  の積のノルムが小さいことであった。すなわち、 $(N-1)/2$  倍振動までの成分の絶対値が大きく、 $N/2$  倍振動以上の成分の絶対値が小さいことが再構成精度のための要件である。

両者の両立のためには結局、 $(N-1)/2$  倍振動までの成分の絶対値が大きく、 $N/2$  倍振動以上の成分の絶対値が小さいことが求められる。したがって、波長感度特性は急峻であればあるほどよいわけではなく、計測波長範囲内でディテクタの個数の半分以上の振動をするような速い成分はむしろ再構成に不利に働くといえる。

### 2.1.7 仮想の波長感度特性を用いた数値実験

第 2.1.6 項の議論を数値実験により検証した。

#### 実験方法

Mathematica (Wolfram Research) を用いて、以下のステップにより周波数成分の分布が異なる仮想の波長感度特性を作製し、その応答を計算した上で、ノイズ耐性と再構成精度について評価した。

#### 乱数を発生

$[-1, 1]$  の範囲で  $N \times M$  の乱数行列を発生させた。



## ローパスフィルタをかける

各行にローパスフィルタをかけ、一定以上の振動成分を抑制した感度行列を作製した。ローパスフィルタをかける前の乱数列はすべてのカットオフ周波数について共通で、同一の乱数列に異なるカットオフ周波数のローパスフィルタをかけた。各行は  $M$  個の要素を有するが、 $M$  個を1周期として、カットオフ周波数が  $f_{\text{cutoff}}$  (角周波数で  $2\pi f_{\text{cutoff}}$ ) となるローパスフィルタを設計した。ローパスフィルタは FIR フィルタで、カーネルの長さは  $M/2$  とした。ディテクタの感度はすべて正であるから、ローパスフィルタをかけた後、感度行列の全成分の最小値が0、最大値が1となるように全体を再マッピングした。Fig. 2.2 は、 $M = 200$ ,  $N = 20$  として計算した例である。Fig. 2.2(a) に使用したローパスフィルタの周波数特性を、Fig. 2.2(b) に作製した感度行列の各列ベクトルを離散コサイン変換した際の  $\mathbf{K}$  の要素の絶対値を、Fig. 2.2(c) にカットオフ周波数が 5, 9.99, 20 のときの各列ベクトルを示す。

## 入射スペクトルへの応答を計算

仮想の入射スペクトル  $\mathbf{P}^{\text{true}}$  として、Fig. 2.3 に示す、4通りのスペクトルを用意した。上段はスペクトルの形状、下段は基底を変換した  $\mathbf{W}\mathbf{P}^{\text{true}}$  の絶対値である。これらはガウス関数  $\exp\left[-(x-\mu)^2/2\sigma_{\text{in}}^2\right]$  の形状をしており、それぞれ  $\sigma_{\text{in}} = 1, 5, 20, 50$  である。また、計測レンジ内での全体の強度が一定となるよう正規化してある。これに対し感度行列  $\mathbf{R}$  をかけ、計測誤差を含まない理想的な計測値  $\mathbf{I}^{\text{ideal}}$  を得た。Fig. 2.4 は  $M = 200$ ,  $N = 20$ ,  $f_{\text{cutoff}} = 20.0$ ,  $\sigma_{\text{in}} = 20$ ,  $\mu = 101$  のときの例である。

## 計測値にノイズを加える

計測系に一定のノイズが加わることを考え、計測値の平均に比例した標準偏差を有するガウス分布にしたがってノイズを計測値に加えた。すなわち、各ディテクタの計測誤差を含む計測値  $I_n^{\text{obs}}$  ( $1 \leq n \leq N$ ) と理想的な計測値  $I_n^{\text{ideal}}$  の差は、ガウス分布  $\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_{\text{noise}}^2}} \exp\left[-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma_{\text{noise}}^2}\right]$  に従い、ノイズの標準偏差  $\sigma_{\text{noise}}$  は  $N$  個の全ディテクタの理想的計測値の平均  $\langle I_n^{\text{ideal}} \rangle$  に比例するとする。

$$\sigma_{\text{noise}} = \sigma_r \langle I_n^{\text{ideal}} \rangle \quad (2.37)$$

ここで、 $\sigma_r$  はノイズレベルを決定する係数である。この計測誤差は、個々のディテクタの出力値にはよらず、入射光強度やデータロガーの計測レンジから決定される、計測のダイナミックレンジに依存することを想定している。実際、本研究のディテクタは抵抗変化を利用するので、デバイスに流れる電流の変化量

本図は雑誌掲載の形での刊行 (5年以内に出版予定) が予定されるため、

非公開とする

**Fig. 2.2** 仮想の波長感度特性. (a) 乱数列にかけるローパスフィルタのゲイン  $G$  の周波数特性. (b) ローパスフィルタをかけた乱数列を離散コサイン変換した結果. 係数は絶対値をとって dB で表示. (c) 生成されたスペクトル. 計測レンジ全体に対するカットオフ周波数  $f_{\text{cutoff}} = 5.00, 9.99, 20.0$  について表示.

本図は雑誌掲載の形での刊行 (5 年以内に出版予定) が予定されるため、  
非公開とする

**Fig. 2.3** 入射スペクトルとして用意した 4 種のガウス関数型スペクトル. 下段は  $\mathbf{W}$  行列をかけた後の振動の速さごとの成分の絶対値を計算した結果である.

本図は雑誌掲載の形での刊行 (5 年以内に出版予定) が予定されるため、  
非公開とする

**Fig. 2.4** ディテクタ出力値計算結果の例.

本図は雑誌掲載の形での刊行 (5 年以内に出版予定) が予定されるため、  
非公開とする

**Fig. 2.5** スペクトル推定値の例. 上段はノイズなしの場合で,  $\mathbf{I}^{\text{ideal}}$  に一致. 下段は  $\sigma_f = 0.01$  の場合の推定値である.

は全電流に比して小さく, フォトダイオードのように光強度によって電流量が大きく変化することはない. したがって電流に起因するショットノイズは計測を通じて一定であると考えられる. 一方で, 入射光強度は計測中, その強度に比例して揺らぐことが考えられる. したがって, センサ出力のレンジに比例したノイズをすべてのディテクタに均一に想定することは妥当であると考えられる.

### 再構成を行う

理想的な計測値を計算する際に用いた感度行列  $\mathbf{R}$  に対応する擬似逆行列  $\mathbf{R}^{-g}$  を計算し,  $\mathbf{P}^{\text{est}} = \mathbf{R}^{-g} \mathbf{I}^{\text{obs}}$  により入射スペクトルを推定した. 擬似逆行列を計算する際, 最大特異値の  $10^{-4}$  以下となる特異値は 0 とした. **Fig. 2.5** に再構成した結果の例を示す.

以上の再構成の手順を, 感度行列  $\mathbf{R}$  を構成する乱数列をかえて 10 回の試行を繰り返した.

### 再構成の精度を評価

まず, それぞれのスペクトル幅  $\sigma_{\text{in}}$ , ピーク位置  $\mu$  の入射スペクトル  $\mathbf{P}^{\text{true}} = \mathbf{P}_{\sigma_{\text{in}}, \mu}^{\text{true}}$  ごとに, 数値実験の結果得られたスペクトルの推定値と真の値の差のノルム  $E_{\sigma_{\text{in}}, \mu} = \|\mathbf{P}_{\sigma_{\text{in}}, \mu}^{\text{est}} - \mathbf{P}_{\sigma_{\text{in}}, \mu}^{\text{true}}\|$  を求め,  $\|\mathbf{P}^{\text{true}}\|$  で正規化する

本図は雑誌掲載の形での刊行 (5 年以内に出版予定) が予定されるため、  
非公開とする

**Fig. 2.6**  $N = 20$  および  $40$  のときの感度行列の特異値の分布例 (a) と、10 回の試行すべてについて最大特異値の  $10^{-4}$  以上の特異値の個数.

ことによって、単位入射光強度あたりの推定誤差を計算する [11].

$$\hat{E}_{\sigma_{in},\mu} = \frac{\|\mathbf{P}_{\sigma_{in},\mu}^{est} - \mathbf{P}_{\sigma_{in},\mu}^{true}\|}{\|\mathbf{P}_{\sigma_{in},\mu}^{true}\|} \quad (2.38)$$

そして、スペクトル幅ごとに、すべてのピーク位置の平均をとり、さらに試行回数について平均をとる:

$$\hat{E}_{\sigma_{in}} = \langle\langle \hat{E}_{\sigma_{in},\mu} \rangle\rangle_{\mu} \quad (2.39)$$

数値実験において、再構成前と再構成後で差が小さいほど推定誤差は小さくなるので、ここでは推定誤差の小ささによって再構成の精度を評価する.

### ノイズ耐性を評価

ノイズがある場合とない場合の推定値の差は、ノイズにより推定値が乱される程度を示している. ここでは、 $\sigma_r = 0.01$  と計測誤差なしの場合の差を考える.

$$\Delta \hat{E}_{\sigma_{in},\mu} = \frac{\|\mathbf{P}_{\sigma_{in},\mu}^{est}(\sigma_r = 0.01) - \mathbf{P}_{\sigma_{in},\mu}^{est}(\sigma_r = 0)\|}{\|\mathbf{P}_{\sigma_{in},\mu}^{true}\|} \quad (2.40)$$

推定誤差の場合と同様に、すべてのピーク位置の平均をとり、さらに試行回数について平均をとる.

$$\Delta \hat{E}_{\sigma_{in}} = \langle\langle \Delta \hat{E}_{\sigma_{in},\mu} \rangle\rangle_{\mu} \quad (2.41)$$

この値は、ノイズに対する弱さを示しており、小さいほどノイズ耐性が高いことを示している.

理論的には、感度行列の条件数がノイズ耐性の指標となるので、数値実験の結果を感度行列の条件数と比較する.

### 実験結果

疑似逆行列を構成する際に、最大特異値の  $10^{-4}$  未満の特異値を切り捨てる操作を行った結果、切り捨てられる特異値が実際に存在した. もとの感度行列の特異値の分布と残った特異値の個数を、 $N = 20$  および  $40$  について **Fig. 2.6** に示す. カットオフ周波数が小さいほど最大特異値に比べ最小特異値が小さくなり、切り落とされる特異値の個数が増加する傾向が確かめられた. このことは、カットオフ周波数が小さなローパスフィルタで均されるほどディテクタ間の波長感度特性の相似性が増した結果であると考えることができ

本図は雑誌掲載の形での刊行 (5 年以内に出版予定) が予定されるため、  
非公開とする

**Fig. 2.7** 入力スペクトルの幅  $\sigma_{in}$  ごとの正規化した推定誤差.

本図は雑誌掲載の形での刊行 (5 年以内に出版予定) が予定されるため、  
非公開とする

**Fig. 2.8**  $N = 20$  および  $40$  のときの推定誤差  $\hat{E}$  についての評価結果.

る。おおよそカットオフ周波数が  $N/2$  以上となるとすべての特異値が  $10^4$  オーダの間に入り、擬似逆行列のランクが落ちないことがわかった。

$M = 200$ ,  $N = 20$  のとき、ノイズの強さに対する推定誤差  $\hat{E}_{\sigma_r}$  を **Fig. 2.7** に示す。スペクトル幅が狭い時は、すべてのカットオフ周波数について推定誤差のベースラインが高く、80%近いが、スペクトルの幅が広がるにつれてベースラインが下がる。おおよそカットオフ周波数が 5 あるいは 7.5 のとき最も小さい。ノイズレベルを上げると推定誤差が大きくなる傾向がみられ、その広がり方はカットオフ周波数が小さいほど顕著である。

この傾向は、**Fig. 2.8** により詳細にあらわれている。**Fig. 2.8** はノイズなしのときの推定誤差  $\hat{E}$  を入射スペクトルの幅ごとにプロットしたものである。それぞれ、 $M = 200$  のもとで  $N = 20$  および  $40$  のときの結果を並べて表示してある。

$N = 20$  のとき、入射スペクトルが広い  $\sigma_{in} = 20$ ,  $50$  のときには、カットオフ周波数が小さいとほぼ正確に入射スペクトルを再構成することができており、カットオフ周波数が  $N/2$  付近から高くなるにつれて推定誤差が増加してゆく。より狭い  $\sigma_{in} = 5$  では、 $f_{cutoff} = N/2$  付近で極小となっており、低周波側でも高周波側でも精度が落ちることがわかる。さらに狭くなる  $\sigma_{in} = 1$  では、傾向としては  $\sigma_{in} = 5$  のときとおなじであるものの、最大 0.8 程度と全体に値が大きく、どのようなカットオフ周波数でも再構成にはかなり限界がある。以上の結果は、ディテクタの個数をかえて  $N = 40$  とした場合にも再現され、高周波のカットオフ周波数でも良くスペクトルを再構成した。また、狭いスペクトルについての推定誤差の最小値が減少した。低いカットオフ周波数のときの精度は  $N = 20$  のときとほぼ同様だが、 $\sigma_{in} = 5$  において  $f_{cutoff} = 15$  ( $f_{cutoff}/N = 3/8$ ) のときにほぼ推定誤差なく再構成できたほか、 $\sigma_{in} = 1$  のとき  $f_{cutoff} = N/2$  付近で最小 0.6 となり、 $N = 20$  のときにくらべ 2 倍再構成の精度が向上した。

カットオフ周波数が大きくなるほど再構成の精度が低下することは、高周波成分を表す  $\Delta$  の各要素が大きな絶対値を持つようになり、 $\Omega$  が増加したことに対応すると考えられ、式 (2.33) と整合する。一方、狭いスペクトルのときに低周波側の精度が低下したことは、擬似逆行列  $\mathbf{R}^{-g}$  の計算の際に、最大固有値の  $10^{-4}$

本図は雑誌掲載の形での刊行(5年以内に出版予定)が予定されるため、  
非公開とする

**Fig. 2.9**  $N=20$  および  $40$  のときのノイズ耐性評価結果. (a) ノイズへの脆弱性を表すパラメータ  $\Delta\hat{E}$  についての評価結果, (b) 全 10 回の試行における条件数, すなわち最大特異値と最小特異値の比.

以下の固有値を打ち切ったことに関係すると考えられる. 固有値の個数が減るということはすなわち, スペクトル再構成に使用できる基底の数が減るということである. そのため, 広いスペクトル幅の場合には細かな表現をする必要がないので再現性を高く維持できるが, 狭いスペクトルになり高周波まで表現する必要がある場合には再現しきれず, もとのスペクトルとのずれは大きくなる.

したがって, 高い周波数成分を含まない, ならかな波長感度特性を有するディテクタを使用する場合には, ディテクタの個数をあげても精度を上げることを見込むことはできないが, 高い周波数成分を含む場合にはむしろディテクタの個数を増やさなければ精度を欠くことになり, 十分な個数を用意すればより狭いスペクトルまで精度よく再構成することができるようになる.

ノイズ耐性の評価結果を **Fig. 2.9** に示す. **Fig. 2.9(a)** がノイズレベル  $\sigma_r = 0.01$  と計測誤差なしのときの推定値の差を評価した結果で, **Fig. 2.9(b)** が感度行列の条件数, すなわち最大固有値と最小固有値の比を全 10 回の試行についてプロットしたものである.  $N=20$  のときには, カットオフ周波数が大きくなるにつれて高まるのがノイズに対して強くなり,  $N/2$  をこえるとノイズによってほとんど推定値が変化しないことがわかる. 逆に,  $N/2$  を下回るとノイズに対して非常に弱くなり, スペクトルの大きさを上回る誤差がのってもはやもとのスペクトルを推測することは不可能となる. 条件数についてみると, こちらはカットオフ周波数が増加するにつれて減少することがわかる.  $\sigma_r = 0.01$  のときに再構成ができる境界のカットオフ周波数  $N/2$  付近では, おおよそ  $10^2$  のオーダーである. カットオフ周波数が低い領域では, 小さな特異値の刈り取りが行われた結果,  $10^4$  で頭打ちになっていることが表れている. 同様の傾向は  $N=40$  のときでも見ることができ, より多くのディテクタを用意した場合には, ノイズ耐性のある計測を行うには波長感度特性が高いカットオフ周波数まで含んでいることが必要となる. ノイズ耐性を実現する上で波長感度特性に含まれるべき最大の周波数は, およそ  $N/2$  であるといえる.

以上の結果は, 波長感度特性がランダムであることが必ずしも良い結果に結びつかないことを示している. 波長感度特性のランダム性が高いということはそれだけスペクトルに高周波成分が存在することを示す. ノイズ耐性を実現する上では高い周波数成分まで含まれている必要があるが, 高々  $(N-1)/2$  程度までが必要で, それ以上の成分は精度を減じる方向に働く. ランダム性の高い波長感度特性を有するディテクタを数多く用意し, 分光器に組み込むことが可能である場合には,  $(N-1)/2$  が大きくなるので, 精度を高めることも可能であるが, ディテクタの数を増やした分だけ分光器は複雑かつ大きくなる.

高周波成分が存在することによって精度を減じる原因は  $\|\Omega\| = \|\mathbf{K}_N^{-1}\Delta\|$  が大きくなることであるから, 再構成における  $\Delta$  の寄与が小さくなるよう, 計測点の個数  $M$  を少なくし,  $N$  に近いか等しい値まで減らす戦略も考えられる. しかしその場合には, 各計測点に対し, 計測点の間の値をどのように代表させるかという

問題が発生する。各点での感度のみを拾って感度行列を構成することは、ランダム性の高い波長感度特性を有するディテクタである場合、ズレが大きくなるので、細かく計測点を刻んでから平均ないし重み付き平均をとることが望ましいが、これは波長感度特性に平滑フィルタをかけることと同義である。

ランダムな波形に平滑化フィルタをかけたとき、各ディテクタ間の相関の低さを保証することは難しく、ノイズ耐性を必ずしも担保できない。長い波長領域にわたってスペクトルの特徴を限られた個数のディテクタで感受することを考えたとき、ノイズ耐性と推定精度を両立するには、ある程度のなめらかな波長感度特性としつつ、設計により確実に各々のディテクタの波長感度特性が相関しないようにすることが重要である。

第 1.3.2 項でのべたように、ノイズ耐性を高めるために各々のディテクタの波長感度特性の差別化を確実にすることを考えた時、短い波長幅で急激に値が変化するような急峻な区間を有する波長感度特性を少しずつずらしてゆく戦略が有利である。このとき、前後での値の変化量および急峻な区間の傾きが重要である。相関を考える時、変化の前後で比較するので、変化量は絶対量ではなく、変化前の値に対する相対量変化で考える必要がある。急峻な区間の傾きは、フーリエ変換した際の高い周波数成分にも対応し、周波数特性ベースの議論からも要請される性質である。

本研究の端緒として発見した回折格子構造は、変化前後の比の大きな急激な変化を有する急峻な波長感度特性をもつと同時に、非連続的な区間はなく、ランダムスペクトルのような高周波成分もない。もし、観測された波長感度特性をそのまま平行移動することが可能であるとすれば、この戦略のもとで有利に働く構造であると考えられる。

### 2.1.8 ダイナミックレンジと分光性能

第 1.3.2 項において高ダイナミックレンジであることの必要性を定性的に述べたが、本節では、波長感度特性の急峻さを表現するために導入したフーリエ変換を用いて高ダイナミックレンジの必要性を示す。

波長感度特性を第 2.1.6 項の方法に基づいてフーリエ変換したときの第一成分は DC 成分、すなわち波長感度特性の平均に比例する値である。基本的にディテクタの光応答は正の応答であるから、どのようなディテクタでもある程度の大きさの DC 成分を含む。

前節の数値実験と同様に、ディテクタの S/N 比は DC 成分、すなわち大まかなディテクタの感度帯によって決定されると考えると、他の振動成分の大きさは DC 成分に対する相対値で考えるべきである。波長感度特性のオフセットが大きく、ダイナミックレンジが低い場合、DC 成分に比べ他の振動成分を表すフーリエ係数の絶対値はすべて相対的に小さくなる。第 2.1.6 項において、計測ノイズ耐性を確保するために、フーリエ係数がばらつくことが必要であることを導いたが、大きな DC 成分はすべての振動成分のばらつきを減じる意味をもつ。すなわち、低ダイナミックレンジであることは再構成のノイズ耐性を損なう。

数値的に乱数で作製した波長感度特性のフーリエ係数 (Fig. 2.2) にみられるように、DC 成分は基本的にその他の振動成分より大きな値をとる。本研究の基底をもちいてフーリエ変換を行うとき、DC 成分よりも大きな AC 成分が現れるのは、波長感度特性が単一の波長で値をもち、その他で 0 となるようなきわめて特殊な場合のみである。しかも、そのような場合であっても DC 成分に対する AC 成分の絶対値の比は高々  $\sqrt{2}$  であり、同じオーダーである。したがって、実際の波長感度特性を考える上では、感度のオフセットを抑

え，ダイナミックレンジを大きくとることが，再構成のノイズ耐性を上げる上で有利にはたらく．このことは，実際の波長感度特性を用いて第3.4節で確認する．

## 2.2 計測の原理: 表面プラズモン共鳴

### 2.2.1 記号の定義

$\epsilon_m$	金属の比誘電率
$\epsilon_d$	誘電体の比誘電率
$k$	波の波数
$k_x$	表面プラズモンの伝搬方向の波数
$\omega$	波の角振動数
$c$	真空中の光速 299792458 m/s
$\lambda$	真空中の波長

### 2.2.2 表面プラズモン共鳴

表面プラズモン共鳴 (Surface Plasmon Resonance, SPR) とは，金属と誘電体の界面において，電磁波の入射により金属表面の自由電子が集団的振動する状態をいう．プラズモンとは，自由な荷電粒子の集団的振動である<sup>[67]</sup>．金属バルク中のプラズモンは縦波 (疎密波) であり，進行方向に対して自由電子の振動方向が平行であるため，進行方向と電場が直交する横波である電磁波とはエネルギーの授受を行うことがないが，誘電体と接する金属表面においては，自由電子により形成される電場が進行方向と垂直な成分をもつため，電磁波と結合 (couple) することができる．このときの金属表面の自由電子の集団的振動を表面プラズモンといい，金属界面に局在する電磁波を表面電磁波という．

表面プラズモンと入射光の振動数と，波数ベクトルの伝搬方向成分が一致した時，入射光は表面プラズモンに変換されるかたちで吸収され，遠方で観測すれば光の反射率が低下する．金属に吸収された光エネルギーは，表面プラズモンとしての集団的振動が時間経過で解けた後に高エネルギーキャリア (ホットキャリア) を生み出すが，ショットキー接合などのエネルギー障壁をつかって外部に取り出されない場合，次第に熱に変換される．したがって，表面プラズモン共鳴の条件では効率よく光エネルギーから熱エネルギーへの変換が行われることになる．

表面プラズモン共鳴がおこるとき，表面電磁波が遠方への放射光とならず界面に局在することが必要である．これはすなわち，表面電磁波が界面の法線方向にエバネッセント波になっているということである．ここで，波の進行方向を  $x$  軸，金属界面を  $z = 0$  として金属側が正，誘電体側が負になるように法線方向に  $z$  軸をとる．磁場が界面に並行になる場合，磁場の界面に平行な成分が連続であることを考えると磁場の  $y$  成分は次のように書くことができる．

$$H_m = H_0 \exp[i(k_x x - \omega t)] \exp(-\gamma_m) \quad (z \geq 0) \quad (2.42)$$

$$H_d = H_0 \exp[i(k_x x - \omega t)] \exp(\gamma_d) \quad (z \leq 0) \quad (2.43)$$

ここで  $\gamma_m, \gamma_d$  は正の実数である。電場の  $x, y$  成分が連続かつ電束密度の  $z$  成分が連続となる境界条件を解くと、

$$\frac{\epsilon_m}{\epsilon_d} = -\frac{\gamma_m}{\gamma_d} \quad (2.44)$$

を得る。誘電体において  $\epsilon_d > 0$  であるから、 $\epsilon_m < 0$  となる場合に表面電磁波が存在可能である。

一方、電場が界面に平行になる場合、電場の  $y$  成分は同様に次のように書くことができる。

$$E_m = E_0 \exp[i(k_x x - \omega t)] \exp(-\gamma_m) \quad (z \geq 0) \quad (2.45)$$

$$E_d = E_0 \exp[i(k_x x - \omega t)] \exp(\gamma_d) \quad (z \leq 0) \quad (2.46)$$

磁場の  $x, y$  成分が連続かつ磁束密度の  $z$  成分が連続となる境界条件を解くと、

$$\frac{\mu_m}{\mu_d} = -\frac{\gamma_m}{\gamma_d} \quad (2.47)$$

となる。しかし、中赤外領域において一般に  $\epsilon_d > 0$  かつ  $\epsilon_m > 0$  であり、こちらは成立しない。したがって、表面プラズモン共鳴は磁場が界面に並行になる光が界面に入射する場合にのみ発生する。この偏光を TM 偏光、逆に電場が並行になる偏光を TE 偏光という。

式 (2.42) より、表面プラズモン共鳴の電磁場は界面から  $\gamma$  程度の長さを減衰しながら媒質内に侵入する。

### 2.2.3 共鳴条件

表面プラズモンの分散関係、すなわち波進行方向の波数  $k_x$  と振動数  $\omega$  の関係は

$$k_x = \frac{\omega}{c} \operatorname{Re} \left[ \sqrt{\frac{\epsilon_m \epsilon_d}{\epsilon_m + \epsilon_d}} \right] \quad (2.48)$$

で与えられる<sup>[67]</sup>。入射光と表面プラズモンが結合した状態である SPR では、入射光と表面プラズモンの  $k_x$  および  $\omega$  が一致する必要があることから、共鳴条件が求まる。

入射光と表面プラズモンとの結合に回折光を用いることができる。ピッチ  $p$  の回折格子が入射光に対して垂直であるとき、入射角  $\theta$  で入射した光の回折光の波数は

$$k_x = k \sin \theta + \frac{2m\pi}{p} = \frac{2\pi}{\lambda} \sin \theta + \frac{2m\pi}{p} \quad (2.49)$$

で表される。ただし  $m$  は回折次数を表す整数である。したがって回折格子を用いた場合、表面プラズモンの共鳴条件は、TM 偏光でかつ

$$\frac{2\pi}{\lambda} \sin \theta + \frac{2m\pi}{p} = \frac{\omega}{c} \operatorname{Re} \left[ \sqrt{\frac{\epsilon_m \epsilon_d}{\epsilon_m + \epsilon_d}} \right] \quad (2.50)$$

である<sup>[67, 87]</sup>。

### 2.2.4 SPR の伝搬長

金属内の自由キャリアの運動にはダンピング要素があるので、SPR も空間的に伝搬する中で減衰する。減衰長程度の長い距離を SPR が伝搬すると、非共鳴条件の表面プラズモンが打ち消し合い、結果的に波長変化・入射角変化に対して鋭い光吸収のピークを生じるが、伝搬長が短ければ共鳴のピークが鈍ることになる。



表面プラズモン共鳴の伝搬長  $L$  は、表面プラズモンの波数  $k_x$  を複素数に拡張することで計算できる。金属の誘電率  $\epsilon_m$  の実部を  $\epsilon'_m$ 、虚部を  $\epsilon''_m$  とすると、表面プラズモンの分散関係より [67]

$$k_x = k'_x + ik''_x = \frac{\omega}{c} \left[ \frac{(\epsilon'_m + i\epsilon''_m) \epsilon_d}{\epsilon'_m + i\epsilon''_m + \epsilon_d} \right]^{1/2} \quad (2.51)$$

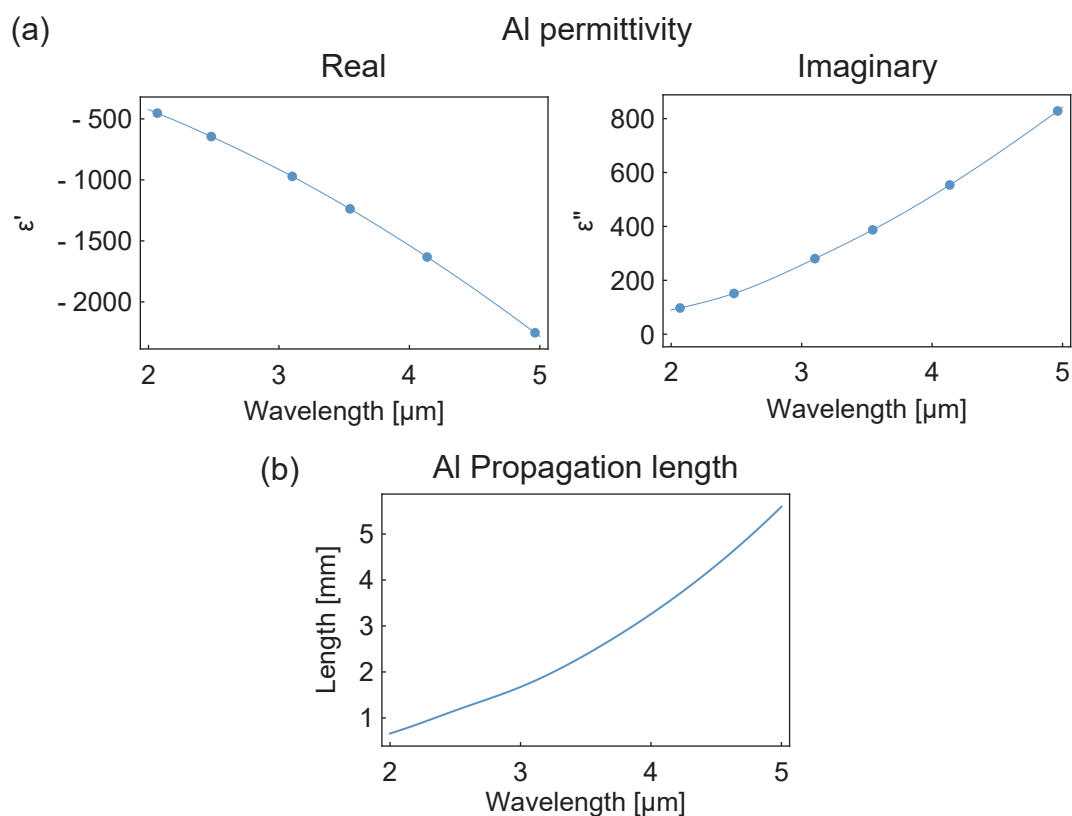
表面プラズモンの伝搬長は強度が  $1/e$  になる距離であると定義され、

$$L = (2k''_x)^{-1} \quad (2.52)$$

である。中赤外領域のアルミニウム/空気界面について伝搬長を計算した結果を **Fig. 2.10** に示す。中赤外領域では数 mm の伝搬長を有することがわかる。

### 2.2.5 局在表面プラズモン共鳴

これまで、平面的な金属・誘電体界面において生じる、入射光と結合し空間的に伝搬する SPR について述べた。これを伝搬型表面プラズモン共鳴という。それに対して、入射光の波長より小さな構造では局在表面プラズモン共鳴 (Localized SPR, LSPR) が生じる。波長より小さな構造に光が入射した時、構造内部の自



**Fig. 2.10** SPR 伝搬長の計算結果. (a) アルミニウムの中赤外領域における誘電率の実部と虚部. データポイントは文献 [88] により、それを 3 次曲線で補完. (b) 空気とアルミニウムの界面の SPR 伝搬長.

由キャリアはある程度均一な電場を感じることであり、全体として入射光の電場にゆすられることになる。この状態が LSPR である。結合の強弱をのぞけば光の入射角によらず光エネルギーを自由キャリアの運動エネルギーに変換して吸収することが可能となる。

## 2.3 デバイスの動作原理

### 2.3.1 熱発生と Free Carrier Absorption

本研究の対象である中赤外ディテクタは、p 型シリコン上にアルミニウム回折格子を設ける構成であり、これは Cerjan ら<sup>[81]</sup>の構成と同様である。Cerjan らのデバイスでは受光面の面積が  $10\ \mu\text{m}$  角程度と SPR 伝搬長よりかなり小さいこと、回折格子がトレンチ型ではなく平面のシリコン基板にアルミニウムのバーを載せた形状であること、電流の取り出し方がオーミック電極間ではなくアルミニウム-p 型シリコン間の Schottky 接合を利用していることが異なるが、これらは基本的にディテクタの検出原理には影響を与えないと考えられる。

本研究では中赤外線をプラズモニック構造により熱に変換し、温度変化を捉えるデバイスを企図しているが、この p 型シリコン上のアルミニウム回折格子を用いた中赤外ディテクタの検出原理を Free Carrier Absorption (FCA), すなわちシリコン中の自由キャリアによる光吸収であるとする研究もある<sup>[8,74]</sup>。シリコンの FCA にはバンド内遷移 (Intravalley transition) と、バンド間遷移 (Intervalence Band Transition) の 2 通りのパスがある<sup>[89]</sup>。前者は光子によって励起されたキャリアがフォノンと運動量・エネルギーのやりとりをすることによって同じバンドに戻ってくるというパスであり、吸収された光エネルギーはもっぱら熱に変換される。後者はシリコンの重い正孔 (Heavy Hole), 軽い正孔 (Light Hole), スプリットオフバンド (Split-off band) の近接したバンド間に相当するエネルギーを光から吸収し、ほとんど運動量変化なく異なるバンドに励起されるというパスである (Fig. 2.11)。価電子帯における近接した 3 つのバンド間の遷移であり、電子をキャリアとする n 型シリコンでは生じない<sup>[89]</sup>。Cerjan らの主張する FCA は後者のバンド間遷移であり、それぞれのバンド内の正孔の有効質量が異なるため、光によって励起された正孔の有効質量が変化し、移動度が変わるので抵抗率が変わるので、バイアス電圧を印加しておくことで電流変化として中赤外光を検

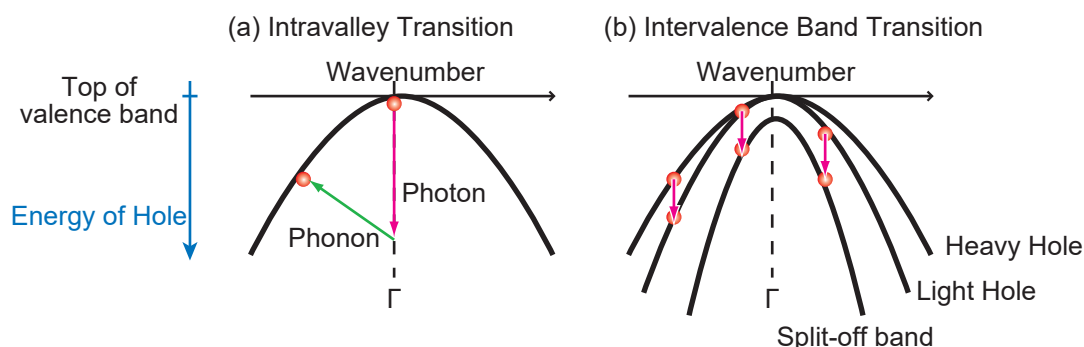


Fig. 2.11 Free Carrier Absorption による光吸収の原理. (a) Intravalley transition, (b) Intervalence Band Transition.

出することができる」と主張している。SPRの強力な近接場は、正孔の励起を促進するということである。

しかし、表面プラズモンやシリコン基板内のバンド内遷移による光エネルギー吸収によりデバイスの温度が変化するとすれば、Schottky接合の温度依存性から電流変化を引き起こすことが可能である。Schottky接合を流れる電流は次のように書くことができることが知られている。

$$I = A_{\text{eff}} A^{**} T^2 \exp\left[\frac{q\phi_B}{kT}\right] \left( \exp\left[\frac{q(V_{\text{bias}} - IR)}{nkT}\right] - 1 \right) \quad (2.53)$$

ここで  $A_{\text{eff}}$  は Schottky 接合の有効面積、 $A^{**}$  は修正実効リチャードソン定数 (Reduced effective Richardson's constant, p 型 Si では  $30 \text{ A/cm}^2\text{K}^2$  である<sup>[90]</sup>)、 $T$  は絶対温度、 $q$  は素電荷、 $\phi_B$  は Schottky 障壁高さ、 $k$  はボルツマン定数、 $V_{\text{bias}}$  は回路に印加した電圧、 $R$  は回路の直列抵抗、 $n$  は Schottky 接合の理想係数である。この式からわかるように、Schottky 接合を流れる電流は温度依存であり、基板温度が変化したときに Schottky 接合を流れる電流の変化を捉えることで光応答を計測することは可能であると考えられる。

もし本研究における光応答が FCA であるとするならば、本研究で提案する回折格子はシリコンか、同様の中赤外線に対応したバンド間遷移を有するゲルマニウムなどを基板として使用する必要があり、本ディテクタの適用範囲を限定することになる。

正孔のバンド間遷移は光入射から 100 fs オーダと応答が早く、励起された正孔の寿命は 10 fs 程度と短い<sup>[91, 92, 93]</sup>。また、p 型シリコンにおいては、バンド間遷移に由来する FCA の発生波長は  $19 \mu\text{m}$  程度で、かつ高ドープ p 型シリコンにのみ見られることが報告されている<sup>[94]</sup>。一方で、Cerjan らの報告は波長  $3 \mu\text{m}$  程度の比較的波長の短い中赤外線であり、また同研究グループにおいて同様の構成のデバイスの報告における時間応答は、近赤外領域では速い<sup>[95]</sup>ものの、中赤外領域では数十秒オーダと非常に遅い<sup>[74]</sup> (Cerjan らは応答時間について言及していない)。したがって、本研究のデバイス応答原理が FCA であることに疑念がある。

Intervallence Band Transition に関連する研究としては、Ahmadivand ら<sup>[96]</sup>は、プラズモニック構造を用いて強力な電場を形成し、FCA によって正孔の移動度が変化した結果電場が増強されたとする実験結果を報告している。n 型シリコンと p 型シリコン基板上に同様のメタマテリアルを形成した結果、中赤外領域において Schottky 接合を超えるエミッション電流が増加したと主張している。しかしこちらにも原理に関しては詳細な検討を行っておらず、FCA の根拠として引用している文献<sup>[97]</sup>で述べられている FCA は、フォノンを介在したバンド内遷移の方である。また、Schottky 障壁高さが  $1.34 \text{ eV}$  としており、中赤外線の検出には高すぎる値である。したがって、Intervallence Band Transition が実験事実を説明しているとするには疑念が残る。

本研究で提案のディテクタの動作原理に関する考察を深めるため、p 型シリコン基板上につくったアルミニウム回折格子に中赤外線を照射した際の受光面直下の正孔の移動度を計測するデバイスの製作及び実験を行った。移動度の計測方法としては、半導体の移動度の計測方法として一般的なホール効果 (Hall Effect) を利用した。

2.3.2 ホール効果の測定

ホール効果は、静磁場中に測定対象をおき、磁場に直行する向きに電流を流して、流れるキャリアにかかるローレンツ力により磁場・電流の両者に直行する向きに電圧(ホール電圧)が生じることである。

図のように  $z$  方向に静磁場がかかっている半導体に、 $x$  方向に電流  $I$  が流れるとき、 $y$  方向に生じるホール電圧は

$$V_H = R_H J_x B_z W \tag{2.54}$$

で表される<sup>[98]</sup>。ここで  $R_H$  はホール係数で、 $p$  型半導体の場合にはホール因子  $r_H$ 、素電荷  $q$ 、キャリア濃度  $p$  を用いて

$$R_H = \frac{r_H}{qp} \tag{2.55}$$

と表される。また、 $J_x$  は  $x$  方向の電流密度、 $B_z$  は  $z$  方向の磁束密度、 $W$  は半導体の  $y$  方向の厚さである。ホール因子  $r_H$  は常温で  $p$  型シリコンの場合約 0.9 でキャリア濃度によらず一定である<sup>[99]</sup>。

ホール係数  $R_H$  と移動度  $\mu$  は、電気伝導率  $\sigma$  を用いて

$$\mu = \frac{R_H \sigma}{r_H} \tag{2.56}$$

で表され、電気伝導率は抵抗に反比例するから比例定数  $c_\sigma$  を用いて

$$\sigma = c_\sigma \frac{I_{\text{impose}}}{V_{\text{impose}}} \tag{2.57}$$

と書き表せる。したがって、式(2.54)から式(2.57)までを合わせると

$$\begin{aligned} \mu &= \frac{1}{r_H} \frac{V_H}{J_x B_z W} \cdot c_\sigma \frac{I_{\text{impose}}}{V_{\text{impose}}} \\ &= \frac{c_\sigma d V_H}{r_H B_z V_{\text{impose}}} \\ &\propto \frac{V_H}{V_{\text{impose}}} \end{aligned} \tag{2.58}$$

となる。ここで  $d$  は半導体の  $z$  方向の厚さであり、 $J_x = I_{\text{impose}}/Wd$  の関係を使った。したがって、ホール電圧と印加電圧の比をとることにより、移動度の変化を計測することができる。

実験結果および考察は第3章に述べる。

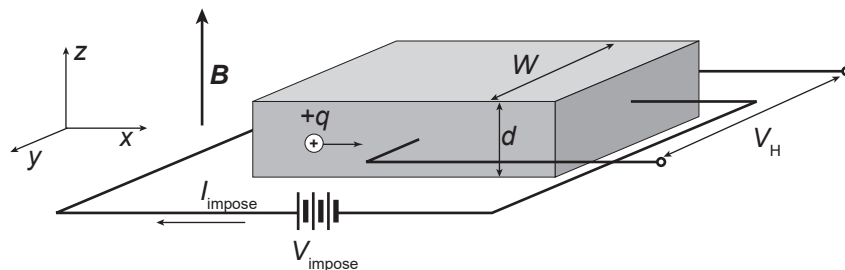


Fig. 2.12 ホール効果を測定する実験系の概略図.

Table 2.1 シリコンウェハ諸元

	ドーパント	抵抗率 ( $\Omega\text{cm}$ )	ドーパ濃度 ( $\text{cm}^{-3}$ ) <sup>[98]</sup>	厚さ ( $\mu\text{m}$ )
p 型高ドーパ	B	0.17	$1 \times 10^{17}$	600
p 型低ドーパ	B	14	$7 \times 10^{14}$	600
n 型	P	1-10	$10^{14}$	625

## 2.4 デバイス設計・製作

本節では、第3章での実験に使用した2種類のデバイスの設計および製作方法について述べる。いずれも中赤外領域において、空気と接する受光面に対して光を垂直に入射してSPRを起こすことを企図したデバイスである。

SPRが生じる条件は、SPRの条件式である式(2.50)に $\theta = 0$ を代入した

$$\frac{2m\pi}{p} = \frac{\omega}{c} \text{Re} \left[ \sqrt{\frac{\epsilon_m \epsilon_{\text{air}}}{\epsilon_m + \epsilon_{\text{air}}}} \right] \quad (2.59)$$

である。一般に中赤外領域における金属の誘電率は、実部・虚部ともに誘電体よりも非常に大きな絶対値を持つため、右辺の根号の中は $\sqrt{\epsilon_{\text{air}}} \approx 1$ である。また、空気中では $\omega/c \approx 2\pi/\lambda$ である。したがって、TM偏光を入射すれば、 $\lambda \approx p$ において $m = 1$ の1次回折光と結合させることができる。

SPRによってディテクタに光エネルギーが吸収され、熱エネルギーに変換される。シリコン基板は温度によりその抵抗率を変化させるため、シリコン基板内部を通過するように回路を形成すれば、光吸収の度合いを抵抗値として電気信号に変換することができる。したがって、回折格子の受光面を挟み込むようにシリコン基板にオーミック接触を2点とり、回折格子の受光面の直下を電流が流れるようにするという基本設計をもとにする。

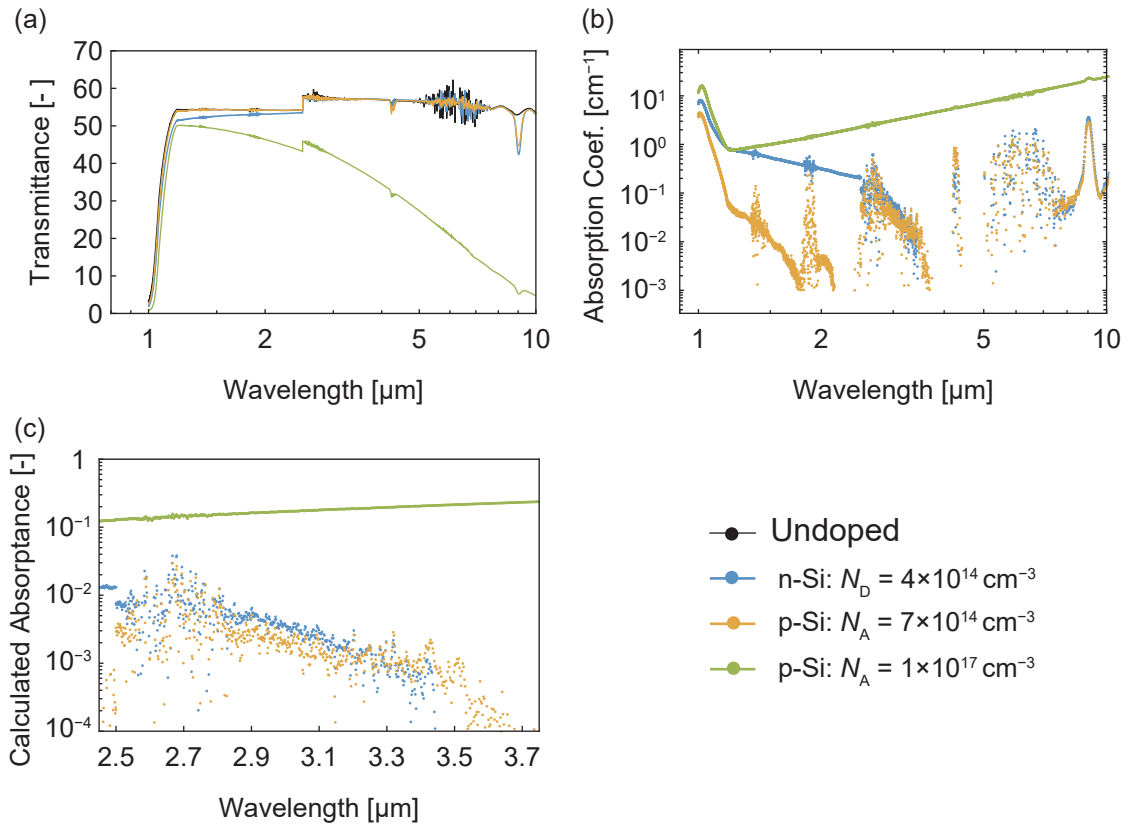
ベースは第1章で述べた回折格子形状と同様に、p型シリコン上にトレンチを刻み、アルミニウムの連続膜でコーティングした回折格子を受光面とするものである。オーミック接触には金を使用する。デバイス製作に先立って、p型シリコン基板の光透過特性および、p型シリコン基板上にアルミニウムおよび金を製膜した際の電流-電圧特性を調べた。

### 2.4.1 p型シリコンの光透過特性

実験に使用するウェハの諸元をTable 2.1に示す。低ドーパp型シリコンおよびn型シリコンは、デバイスタイプ2でデバイスのパラメータを振った際に使用した。

これらのウェハの光透過率をフーリエ変換赤外分光光度計 (FTIR) を用いて計測した結果がFig. 2.13(a)である。この計測においてのみ、p型高ドーパウェハの厚さは $1000 \mu\text{m}$ である。シリコン表面における反射などの補正のため、ドーパなしの $500 \mu\text{m}$ 厚シリコンウェハについても計測した。

ドーパなしシリコンウェハを基準としての光吸収率 $A$ を計算するため、各透過スペクトルからドーパなしシリコンウェハの透過率を引き、さらにドーパなしシリコンウェハの透過率で除した。これにより、シリ



**Fig. 2.13** 本研究で使用したシリコンウェハの光吸収特性. (a) FTIR を用いて計測した光透過率. (b) 光透過率およびウェハ厚さから求めた吸光係数. (c) Table 2.1 に示したウェハ厚さのときの光吸収率を計算した結果.

コンウェハ内部での吸収がない場合にシリコンウェハを通過する光のうち、ドーピングによって吸収された光の割合を得ることができる.

吸光係数  $\alpha$  [ $\text{cm}^{-1}$ ] は

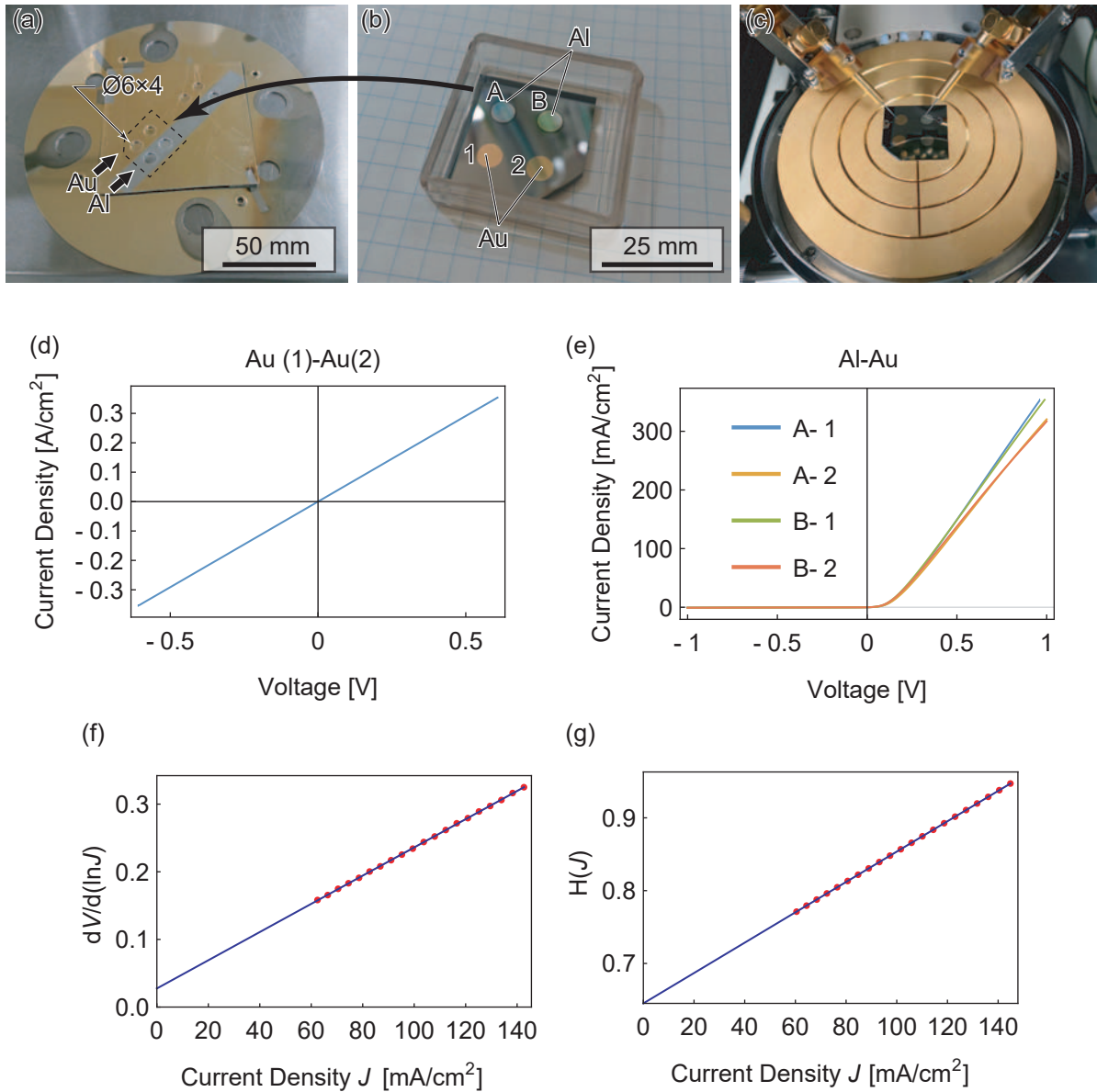
$$\frac{S}{S_0} = \exp(-\alpha x) \quad (2.60)$$

で定義される. ここで  $x$  は基準点からの距離 (cm),  $S_0$  および  $S$  はそれぞれ基準点および基準点から  $x$  の位置での光強度である. シリコンと空気の界面の反射率はすでに補償したので, 吸収率は  $A = 1 - S/S_0$  となるから,

$$\alpha = -\frac{1}{x} \ln(1 - A) \quad (2.61)$$

によって吸光係数を求めた. この結果を Fig. 2.13(b) に示す. 計測誤差により, ドーピングが低く光吸収が小さいものについては負の吸光係数となったため除外し,  $10^{-3}$  以上の値についてプロットしてある.

本研究においては後述するように波長 2.5 - 3.7  $\mu\text{m}$  の領域で計測を行うため, 用意したシリコンウェハの厚みにおいて吸収される光の割合は Fig. 2.13(c) に示すようになり, 高ドーピング p 型シリコンで 10-20%, ドー



**Fig. 2.14** p型シリコン基板上的アルミニウムおよび金の電流-電圧特性計測とその結果. (a) 蒸着に使用した治具と (b) 蒸着の結果. (c) 電流-電圧特性計測のセットアップ. (d) 金-金電極間および (e) アルミニウム-金電極間の電流-電圧特性. (f,g) アルミニウム-p型シリコン間の Schottky 障壁を分析する2プロット.

プの低い p 型および n 型シリコンウェハで 0.1 - 1% の光吸収率となる. 高ドーピングでは直接光をウェハに照射した際の光吸収による発熱が考えられるが, 低ドーピングではほとんど抑えられる.

**Table 2.2** アルミニウム-p 型シリコン間の Schottky 接合のパラメータ推定値

電極 (Al-Au)	$\phi_B$ (eV)	$n$	$R$ ( $\Omega$ ) (式 (2.62))	$R$ ( $\Omega$ ) (式 (2.63))
A-1	0.58	1.11	7.4	7.4
A-2	0.59	0.98	8.4	8.4
A-3	0.58	1.02	7.8	7.8
A-4	0.63	0.72	8.7	8.7

### 2.4.2 p 型シリコン上のアルミニウムおよび金の電流-電圧特性

抵抗率  $0.17 \Omega\text{cm}$ , 厚さ  $600 \mu\text{m}$  の B ドープ p 型シリコン基板を  $25 \text{ mm}$  角のチップに裁断し, 46%フッ化水素酸に 30 秒浸漬して自然酸化膜を除去した. その後ウェハを Fig. 2.14(a) に示す治具に貼り付け, 穴が蒸着源を向くように蒸着板に取り付けた. 治具はチップ上に径  $6 \text{ mm}$  の穴が 4 個開口しており, 蒸着によって金属が開口部に堆積する. チップ上に 2 面のアルミニウム電極と 2 面の金電極を製作するべく, まず金を蒸着する箇所をテープで保護し, 真空蒸着器内にてアルミニウムを蒸着した. その後一度大気に開放し, 保護用テープを剥がして, 新たにアルミニウムで蒸着した箇所に保護を施し真空蒸着器内で今度は金を蒸着した. どちらも  $100 \text{ nm}$  程度の膜厚である. 蒸着後のチップを Fig. 2.14(b) に示す. 完成したデバイスに Fig. 2.14(c) のようにプローブをあて, 温度  $T = 10.9^\circ\text{C}$  で電流・電圧特性を計測した. その結果を Fig. 2.14 の (d) および (e) に示す. (d) は金電極間の電流-電圧特性であるが, 整流特性は見られずオーミック接触が実現されている. 一方で (e) に示す金-アルミニウムの結果では, 整流特性が見られる. 電圧は, アルミニウム側からみた金側の電極の向きが正である. したがって, p 型シリコン上にアルミニウム層があってもアルミニウムを短絡して流れる電流は限られ, シリコン基板中を電流が通過することになる.

この整流特性を Cheung ら<sup>[100]</sup>の方法に従って分析し, ショットキー障壁の高さ  $\phi_B$  (eV) を求めた. この方法では電流  $I$  と電圧  $V$  の間に

$$\frac{dV}{d(\ln J)} = RI + \frac{n}{\beta} \quad (2.62)$$

$$H(J) \equiv V - \frac{n}{\beta} \ln \left[ \frac{J}{A^{**}T^2} \right] = RI + n\phi_B \quad (2.63)$$

の関係が成り立つことを用いる. ただし  $J$  はショットキー接合を通過する電流密度,  $R$  は回路の直列抵抗,  $\beta$  は素電荷  $q$  をボルツマン定数  $k$  と絶対温度  $T$  で割った  $\beta = q/kT$  である. この 2 式の左辺についてプロットし, 直線を最小二乗法でフィッティングして, 傾きおよび切片から右辺と係数比較を行い, パラメータを求める. アルミニウム電極 A と金電極 1 間についてこのフィッティングを行った結果を Fig. 2.14 (f) および (g) に, 求められたパラメータを Table 2.2 に示す. アルミニウム電極と金電極間の Schottky 障壁は  $0.60 \text{ eV}$  程度となり, これは波長  $2.1 \mu\text{m}$  の光子エネルギーに相当する. 光子のエネルギーは波長に反比例するので, 中赤外領域の光ではアルミニウム・p 型シリコン間に生成された Schottky 障壁を超えることがなく, 光電流を生じない.



## 2.4.3 デバイスタイプ1

## デバイス設計

1面のチップ上に2ないし3面の受光面を有するデバイスで、3個のディテクタA, B, Cからなる。Fig. 2.15にチップ上デザインを示す。

デバイスAは回折格子の形状は一定に、回折格子の方向をTMおよびTE偏光の2通り用意したデバイスである。回折格子形状はピッチ  $p = 3.2 \mu\text{m}$ 、トレンチ幅  $w = 0.1 \times p = 320\text{nm}$ 、トレンチ深さ  $d = 500\text{nm}$ で、アルミニウム膜の厚さ  $t = 50\text{nm}$  である。回折格子受光部の大きさは  $3\text{mm}$  角であり、波長  $3\mu\text{m}$  程度の中赤外領域におけるSPRの伝搬長を確保した。回折格子部はアルミニウムの連続膜で覆われているが、連続膜をさらに伸ばして外部に取り出すための電極を回折格子部の両端に配置した。

デバイスBはピッチの間隔をパラメータとしたデバイスである。3箇所の受光部はそれぞれピッチ  $p = 3.0, 3.2, 3.4 \mu\text{m}$  であり、それぞれトレンチ幅はピッチの10%である。それ以外のパラメータはNo.1のデバイスのトレンチと同様とした。

デバイスCは回折格子のないデバイスで、回折格子がない以外はデバイスAのデバイスと同様である。

ウェハの性質や製膜などのずれを防ぐため、すべてのデバイスは1枚のチップ上で作製し、最後に切り離した。すべてのデバイスは長軸方向の偏光入射を想定している。

これ以降、デバイスタイプ1A, B, Cをデバイス(1-A), (1-B), (1-C)と表記する。Table 2.3にデバイスタイプ1の受光面の諸元をまとめる。

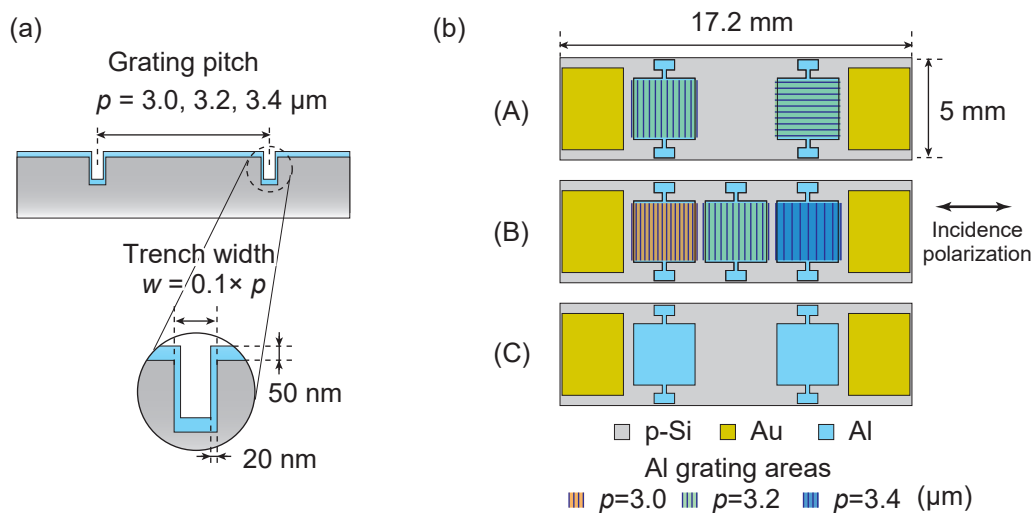


Fig. 2.15 デバイスタイプ1の設計。(a)回折格子部の断面図。(b)チップ上の電極等配置図。<sup>[75]</sup>(©2021 IEEE, 一部改変)

Table 2.3 デバイスタイプ1 受光面諸元

デバイス	左受光面ピッチ [ $\mu\text{m}$ ] (偏光)	中央受光面ピッチ [ $\mu\text{m}$ ] (偏光)	右受光面ピッチ [ $\mu\text{m}$ ] (偏光)
1-A	3.2 (TM)	-	3.2 (TE)
1-B	3.0 (TM)	3.2 (TM)	3.4 (TM)
1-C	Flat	-	Flat

デバイス製作

デバイス製作手順を以下に記述する。

本デバイスは電子線ビーム (EB) リソグラフィによるレジストマスク作製, シリコンのドライエッチング, 回折格子部アルミニウム製膜, 電流取り出し部電極製膜の順で製作した ( Fig. 2.16 ).

デバイスのプロセスに先立って, 設計した寸法通りにフォトリソグラフィ用クロムマスクを作製した。

デバイスプロセスの最初の EB リソグラフィは, 続くシリコンエッチングでマスクとなる EB レジストのパターニングを行う工程である。使用した EB レジスト ZEP520A-7 (日本ゼオン) は, ドライエッチングにおいてエッチングされる物質との選択比が高いポジレジストで, そのままシリコンエッチングのマスクとして使用できる。本レジストを 200 nm の膜厚で製膜し, そこへ  $120\mu\text{C}/\text{cm}^2$  で EB をパターン通りに照射した。現像は現像液 ZED-N50 (日本ゼオン) に 4 分浸漬し, 続いてメチルイソブチルケトン (MIBK) で 30 秒リンスを 2 回行い, 窒素ガスブローにより乾燥させた。

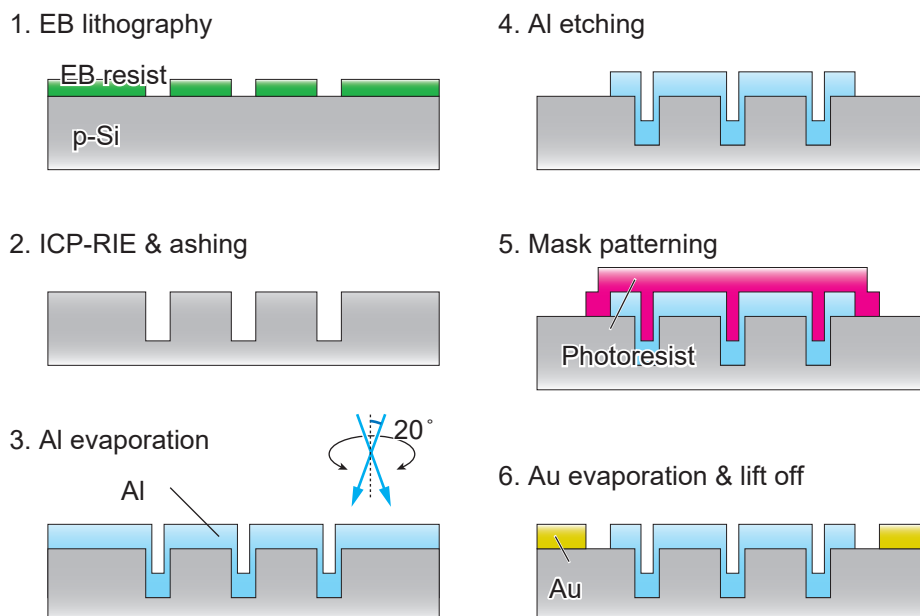


Fig. 2.16 デバイスタイプ1 の作製手順概略.

**Table 2.4** グレーティング部トレンチ作製用シリコンエッチングレシピ

設定	Etching	Passivation
時間 (sec)	1.0	1.0
ガス流量 SF <sub>6</sub> (sccm)	60	0
C <sub>4</sub> F <sub>8</sub>	50	0
Platen LF (W)	60	0
Coil RF (W)	500	400

次のシリコンのドライエッチングは、シリコンのエッチングガス SF<sub>6</sub> と保護ガス C<sub>4</sub>F<sub>8</sub> を交互にプラズマ化させてシリコンに作用させる反応性イオンエッチング (Reactive Ion Etching, RIE) である。本プロセスは Bosch プロセスとして知られる。エッチングと保護を交互に行うため、スキヤロッピング (Scalloping) とよばれる壁面の波立ちが生じる特徴があるプロセスだが、今回はトレンチ部の開口部が狭い上、できるだけ平坦な壁面となることが望ましいので、ガスの流量を抑え、サイクルあたりのエッチング量を抑えたプロセス条件を採用した。本プロセス条件を **Table 2.4** に示す。プロセス時には、冷却用にメチルフェニルシリコンオイル HIVAC-4 (信越化学工業) を塗布したアルミ皿上にチップを接着し、四辺をポリイミドテープで封止したうえで、サイクル数を変化させることでトレンチ深さを変化させた。エッチングプロセスの後に、表面の EB レジストとともに、壁面の保護層を除去することを意図して、O<sub>2</sub> プラズマでアッシングした。

アルミ皿上にシリコンオイルで接着しているチップは、隙間にヘキサンを染み込ませて剥がし、シリコンオイルを除去するためにヘキサンに 30 秒浸漬させた。N<sub>2</sub> ガスをブローして液滴を飛ばし、チップ上から極力シリコンオイルの残渣がなくなるようにした上でアセトンで 3 回リンスし、O<sub>2</sub> プラズマによるアッシングを行って表面の洗浄を完了した。

続いてアルミニウム連続膜をチップ上に均一に製膜するため、チップを回転させながら斜上よりアルミニウムを蒸着した。真空蒸着器中のチップ、蒸着源の配置図を **Fig. 2.17** に示す。蒸着源直上に回転ステージの中央がくるようにし、回転軸は鉛直から 20° 傾いている。蒸着装置のセッティングを行った後にチップをフッ化水素酸 1% 溶液に 30 秒浸漬して自然酸化膜を除去し、すぐに回転ステージ上にチップを接着し蒸着用チャンバの真空引きを開始した。回転ステージ上に 2 枚一度に配置したチップは中央が回転中心から約 13 mm の位置にあり、両面テープを用いてステージに直接接触しないよう浮かせて接着してある。これは熱的にチップを隔離するためで、これを行うことにより膜質を向上させることができる。蒸着時にはチャンバ内が  $1.00 \times 10^{-2}$  Pa 以下の真空となるようにすることで、アルミニウム蒸気の直進性を確保した<sup>[101]</sup>。製膜レートは 6–9 Å/s となるよう膜厚計により常にモニタし、設計した膜厚を製膜した。

受光部以外のアルミニウムはデバイスに不要なので取り除く必要がある。そこで、全面にアルミニウムを製膜したチップ上にネガフォトレジスト ZPN1150 (日本ゼオン) を製膜し、露光・ポストバークの後、水酸化テトラメチルアンモニウム (TMAH) 水溶液 NMD-3 で現像した。現像は 45 秒程度で完了するが、そのまま溶液にひたしておくことで、アルカリ性水溶液である NMD-3 はアルミニウムを溶解する。アルミニウムが 50 nm の膜厚である場合には、現像開始から 2 分 10 秒程度でアルミニウムが目視できない程度まで溶

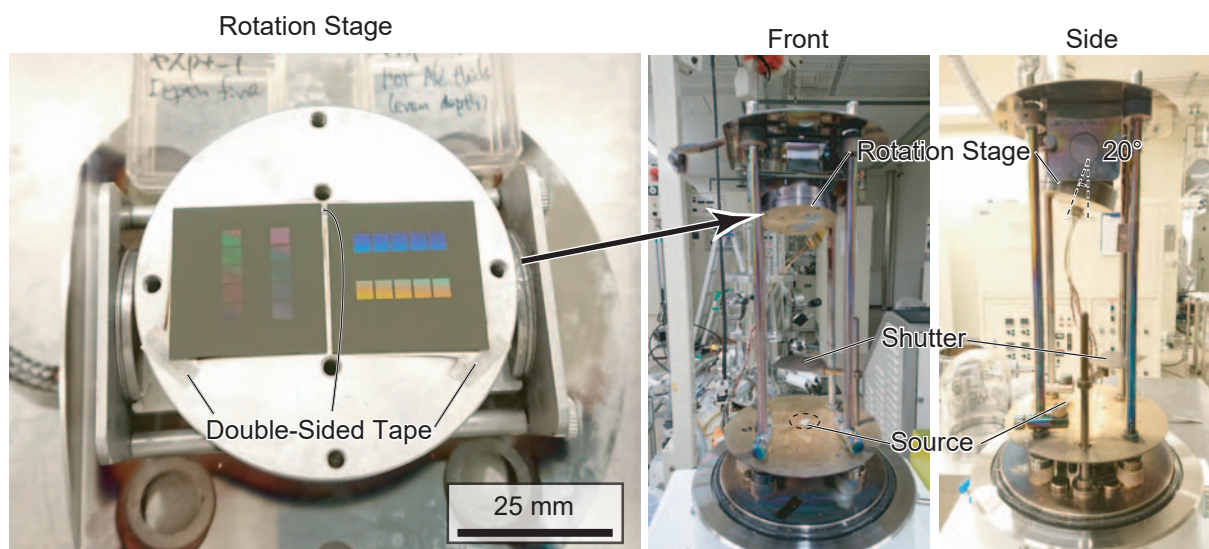


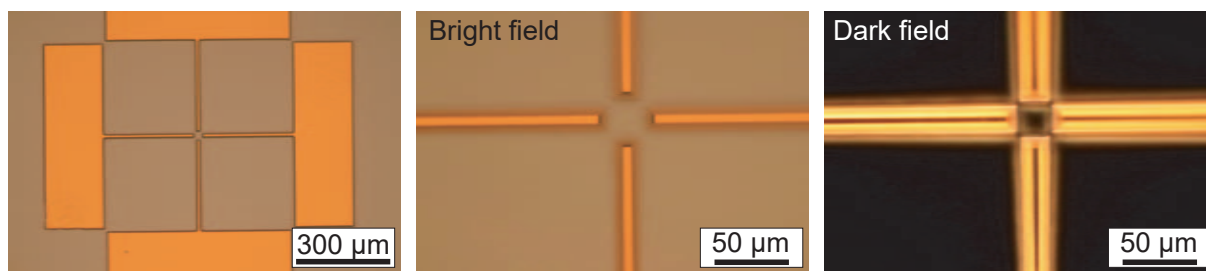
Fig. 2.17 アルミニウム回転蒸着のセットアップ.

解した. さらに, TMAH はシリコンも溶解する作用があるため, さらに 20 秒程度溶液にチップを浸してから純水でリンスすることで, アルミニウムの残渣のないシリコンの清浄な表面を得た. この一連のプロセスの後のチップの様子を Fig. 2.18 に示す. ここでは細かなパターンのあるアラインメントマークの観察結果を示し, 比較のため, アルミニウムエッチャントによりエッチングした場合の様子も載せる. TMAH はシリコンを異方的にエッチングし, [111] 面を露出させるため, レジスト下部に入った TMAH 溶液がシリコンをエッチングした結果, 斜面を生じていることがわかる. しかし, エッチングにより削られる量は  $10\ \mu\text{m}$  以下であり, 受光部の面積はほぼ変わらず清浄な表面が得られたと考えられる.

続いてデバイスへの電流取り出し部となる金のオーミックコンタクトをリフトオフにより作製した. 手順としては, まず前の工程と同様にネガフォトリソ ZPN1150 を製膜し, 露光・ポストバークの後 60 秒の現像の後純水でリンスしパターンニングした. 続けてアッシングによりレジスト開口部にレジスト残渣がないようにした. 真空蒸着器で金を蒸着する準備を整えた後, チップを 1%フッ化水素酸に浸して自然酸化膜を除去し, すぐに蒸着板にセットした. この際, フッ化水素酸は濃度が十分低いため, フォトリソをほとんどアタックしない<sup>[102]</sup>. 金の蒸着はタングステンワイヤに純金線を巻きつけたものを蒸着源として使用し, 蒸着源の直上にチップが来るように蒸着板を配置して行った. この蒸着によって, 100-200 nm 程度の膜厚の金を得た. 金を蒸着したデバイスはアセトンに一晩ひたしてレジストを溶解させ, ピペットからアセトンを勢いよく噴射することで浮いた金膜を剥がした後, アセトンで 2 回リンスした.

最後に, チップ上に同時に作製したデバイスをダイシングした. チップ表面を汚さないよう, 赤外線レーザーにより亀裂をチップ内に生じさせるステルスダイシングによりチップを切り分けた. 切り分けたデバイスは, 予めエッチングにより作製しておいたプリント基板上にエポキシ接着剤を用いて 2 箇所接着し, アルミニウムワイヤでワイヤボンディングした. 完成したデバイスを Fig. 2.19 に示す.

■ WITH Si etch



■ WITHOUT Si etch

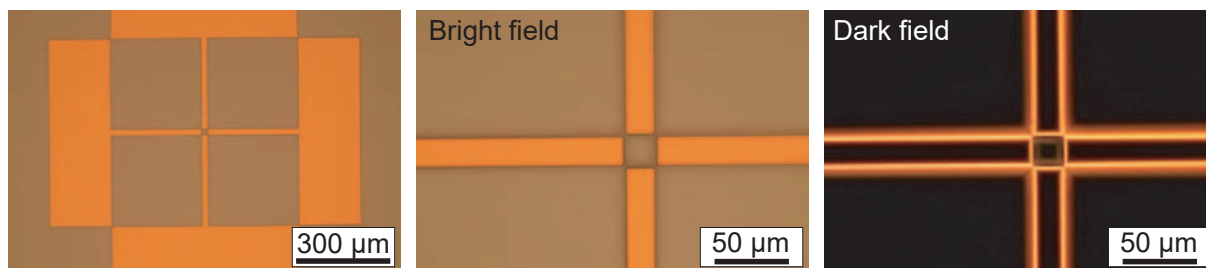


Fig. 2.18 アルミニウムのエッチングの結果.

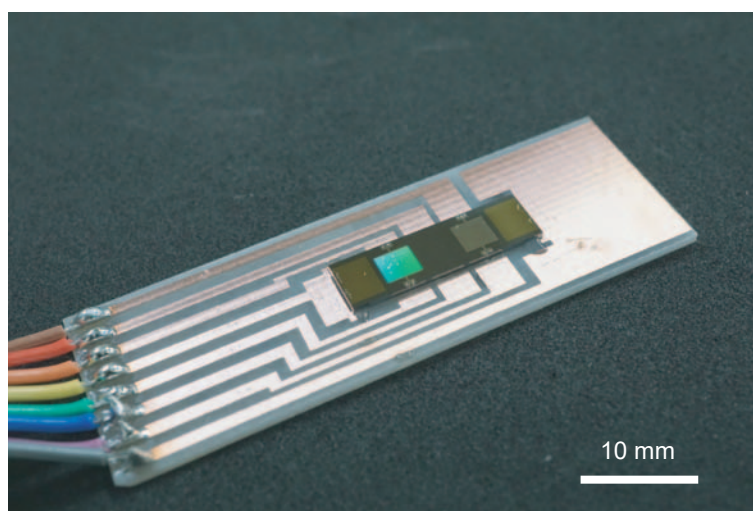


Fig. 2.19 製作したデバイスタイプ 1. 写真は (1-B) である.

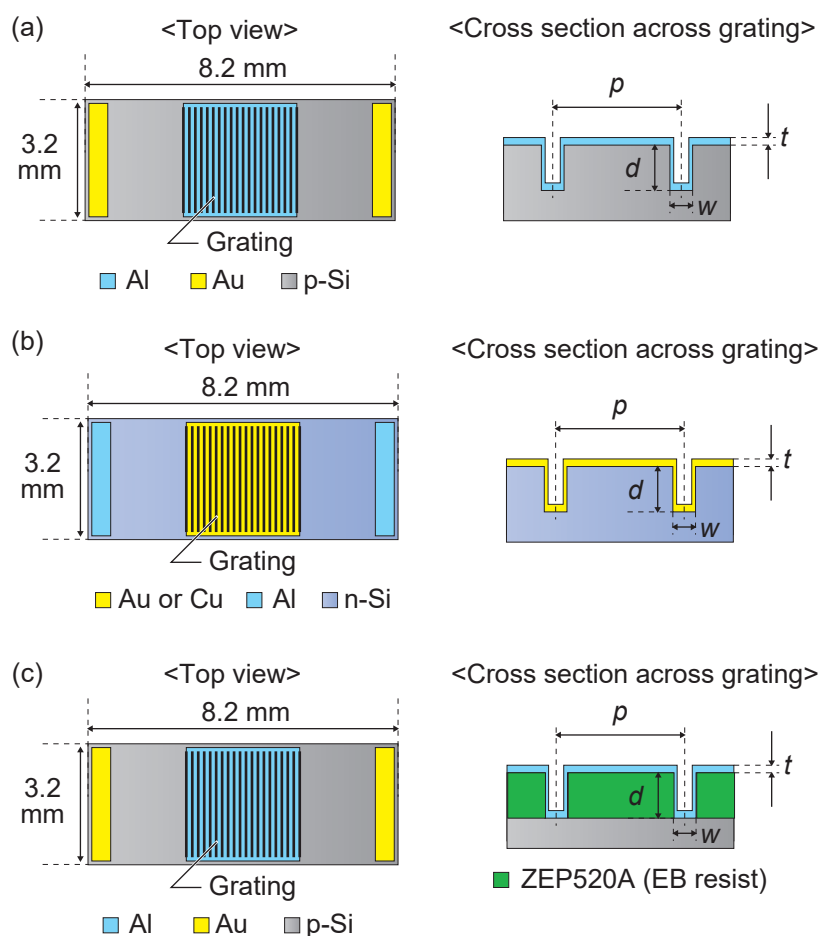
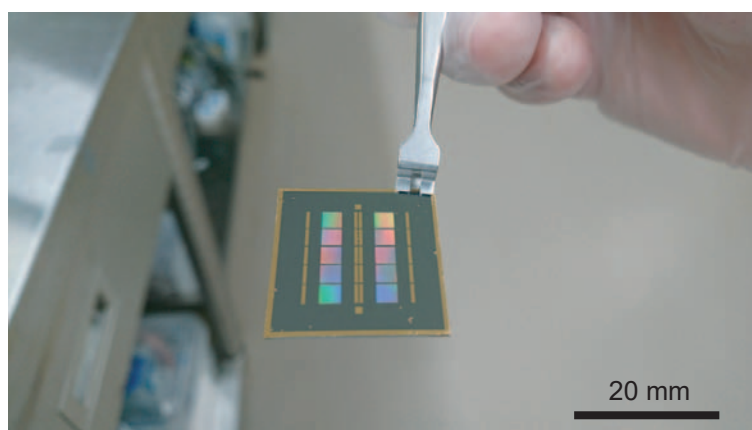


Fig. 2.20 デバイスタイプ 2 の設計.

#### 2.4.4 デバイスタイプ 2

##### デバイス設計

受光面を 1 個としたデバイスである。使用した素材や回折格子の形状については様々なパラメータを振ったため後述するが、チップ上のデザインは Fig. 2.20 に示すように、すべて 8.2 mm × 3.2 mm で、中央に 3 mm 角の受光部である回折格子を配置した形状である。Fig. 2.20(a) はデバイスタイプ 1 と同様、p 型シリコン基板を使用し、金属薄膜にはアルミニウムを使用したものである。Fig. 2.20(b) は、基板に n 型シリコンを使用し、金属薄膜には n 型シリコンと Schottky 接合を形成する銅ないし金を使用したものである。Fig. 2.20(c) は、(a) とアルミニウムの形状は同一であるが、トレンチ間をシリコンでない誘電体に置き換えたものである。ここでは、誘電体として EB レジスト ZEP520A を使用することにする。



**Fig. 2.21** 製作したデバイスタイプ 2. 10 個のデバイスを 1 枚のチップ状に同時に作製し、このあとステルスダイシングにより切り分ける.

### デバイス製作

主な製作方法はデバイスタイプ 1 と同様であるので、異なる部分について述べる.

p 型シリコン上のアルミニウム薄膜については、基本的にはデバイスタイプ 1 と同様に TMAH でエッチングを行ったが、アルミニウムの膜厚をパラメータとするデバイスの製作に際しては、リン酸 40%、硝酸 40%、酢酸 10%、純水 10% を混合したアルミニウムエッチャントを使用した. 常温で約 20 nm/分のエッチレートであり、アルミニウムがとけて目視できなくなってから 20 秒浸漬してエッチング終了とした.

n 型シリコン上の金、銅のエッチングには、ヨウ素ヨウ化カリウム水溶液を使用した.

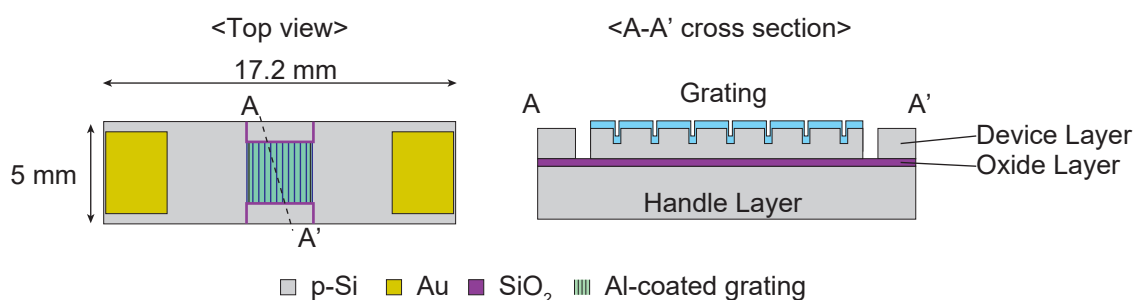
トレンチ間を誘電体で置き換えるデバイスでは、まず EB レジスト ZEP520A を 500 nm 厚に製膜し、回折格子部のトレンチ部を  $120 \mu\text{C}/\text{cm}^2$  の電子線で描画し、ZED-N50 で 4 分間現像、MIBK で 30 秒のリンスを 2 回行って 500 nm のトレンチを製作した.

1%フッ化水素酸に 30 秒浸して露出したシリコン基板表面の自然酸化層を除去した後、アルミニウムを回転蒸着した. フォトリソグラフィでフォトレジスト ZPN1150 でマスクした後、アルミニウムエッチャントで受光面以外のアルミニウムをエッチングし、露出した EB レジストをアッシングにて除去した. 続いて、金の電極をリフトオフで作製するために再度 ZPN1150 をパターンニングし、露出したシリコン表面の自然酸化膜を 1%フッ化水素酸で処理し、金を蒸着した. リフトオフに際しては、電子線レジスト ZEP520A はアセトンに溶けにくい全く溶けないわけではないので、より溶解性の低いイソプロピルアルコールでフォトレジストを溶かし、リフトオフした.

ダイシング直前までの工程が終了したときのデバイスの様子を **Fig. 2.21** に示す.

**Table 2.5** デバイスタイプ 3 に用いる SOI ウェハ諸元

Type	ハンドル層		酸化層		デバイス層		
	抵抗率 ( $\Omega\text{cm}$ )	厚さ ( $\mu\text{m}$ )	厚さ ( $\mu\text{m}$ )	Type	抵抗率 ( $\Omega\text{cm}$ )	ドーピング濃度 ( $\text{cm}^{-3}$ ) <sup>[98]</sup>	厚さ ( $\mu\text{m}$ )
P (B)	1-100	600	1	P(B)	0.01-0.02	$10^{19}$	5
P (B)	1-30	550	0.5	P(B)	1-30	$10^{16}$	9



**Fig. 2.22** デバイスタイプ 3 の設計.

### 2.4.5 デバイスタイプ 3

Silicon-on-Insulator (SOI) ウェハをもちいたデバイスで、シリコン層が薄膜であった場合の応答を見ることを目的とする。Table 2.5 に使用した SOI ウェハの諸元を示す。

SPR 由来の強力なエバネッセント波は、第 2.2.2 節で述べたように、その波長と同程度の侵入長を有する。したがって、シリコン層が薄膜であった場合、電流が通過する領域に対してエバネッセント波が影響を与える割合がバルクシリコンの場合に比べて増加する。これにより、SPR が熱発生以外にデバイス動作に与える影響があった場合に、バルクシリコンに比べて検出しやすくなる。

デバイスのデザインを Fig. 2.22 に示す。デバイス上の金電極の配置と回折格子の寸法はデバイスタイプ 1 と同様であるが、受光面は中央に 3 mm 角のものが一つである。回折格子下部に電流を集中させるため、回折格子とデバイス上下端の間のむき出しのシリコンは、デバイス層をエッチングすることにより回路から絶縁してある。

### 2.4.6 ホール効果計測用デバイス

Fig. 2.23 に示すような平坦な p 型シリコン基板上に、アルミニウムのバーを配列した回折格子を作製した。このアルミニウム回折格子により SPR が生じ、シリコン基板内に強い電場を生じるので、シリコンと光の相互作用を強化することができる。アルミニウム連続膜ではなくバーを配列した構造としたのは、先行研究<sup>[8]</sup>に合わせる意味の他に、ホール電圧が生じる方向にアルミニウムの連続膜があるとアルミニウム



でつながった箇所がすべて同電位になってしまうので、ホール電圧が生じる方向に切り離された構造とすることで段階的に電圧を変化させる意味がある。回折格子のピッチは $3.2\ \mu\text{m}$ で、うち50%が空隙である。アルミニウム膜の厚さは $50\ \text{nm}$ である。

ホール効果を適切に測定するためには、電流をながす長辺が電圧を測定する短辺の4倍以上であることが望ましい<sup>[90]</sup>。したがってデバイス設計においても長辺が短辺の4倍となるよう設計した。受光面は $3\ \text{mm}$ 角で、その上下にホール電圧を測定するための $50\ \mu\text{m} \times 100\ \mu\text{m}$ の電極を2箇所配置した。紙面に垂直な方向に磁場をかけ、長辺方向に電流を流して、ホール電圧測定用の電極間の電圧を高インピーダンス条件で計測する。

デバイスの製作方法を Fig. 2.24 に示す。基板には、デバイス層が厚さ $5\ \mu\text{m}$ 、抵抗率 $0.01\text{-}0.02\ \Omega\text{cm}$ のホウ素ドーパ p 型シリコンである Silicon on Insulator (SOI) ウェハを使用した。まずウェハをピラニア洗浄5分間および1%フッ化水素酸浸漬30秒間で洗浄した後、EBレジスト ZEP520A-7 を塗布し、 $120\ \mu\text{C}/\text{cm}^2$  で電子線直描した。現像液 ZED-N50 で4分間静置して現像し、メチルイソブチルケトン (MIBK) に30秒 $\times$ 2回静置してリンスした。その後、再度1%フッ化水素酸で自然酸化膜を除去した後、アルミニウムを垂直に蒸着し、剥離液 104 (東京応化) および ZEP520A-7 のリムーバである ZDMAC で EB レジストを溶かしてリフトオフによりアルミニウムの回折格子を作製した。

回折格子の上からフォトリソ ZPN1150 を製膜・露光・現像してパターニングした後、金を垂直に蒸着、アセトンに1晩つけ置くことでリフトオフして金電極を作製した。

## 2.5 実験方法

### 2.5.1 抵抗変化としての光応答計測

作製したデバイスは、計測に際してワイヤボンディングや受光面の保護と位置合わせを兼ねて Fig. 2.25 に示す治具を装着した。治具は3Dプリンタで作製した上部・下部の2パーツからなり、3箇所をボルトとナットで固定する。治具はさらに光学系に組み込むためクリップ付きのポストに固定した。

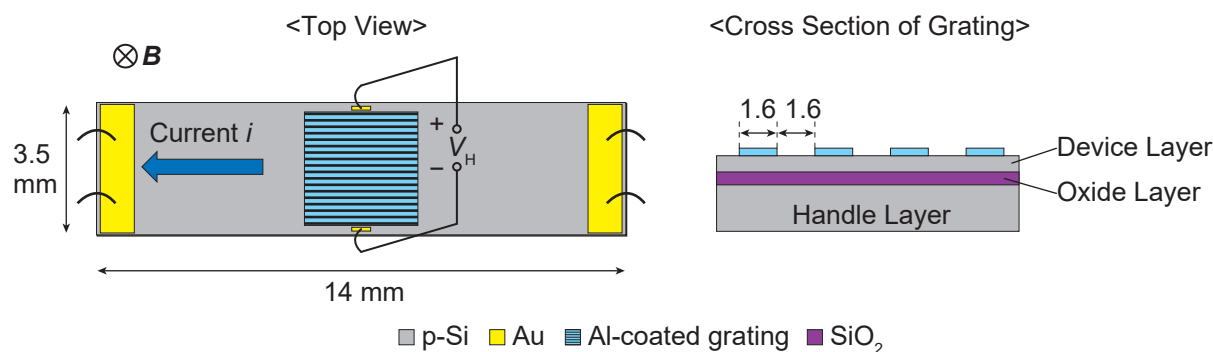


Fig. 2.23 ホール効果を利用して移動度を計測するためのデバイスデザイン。

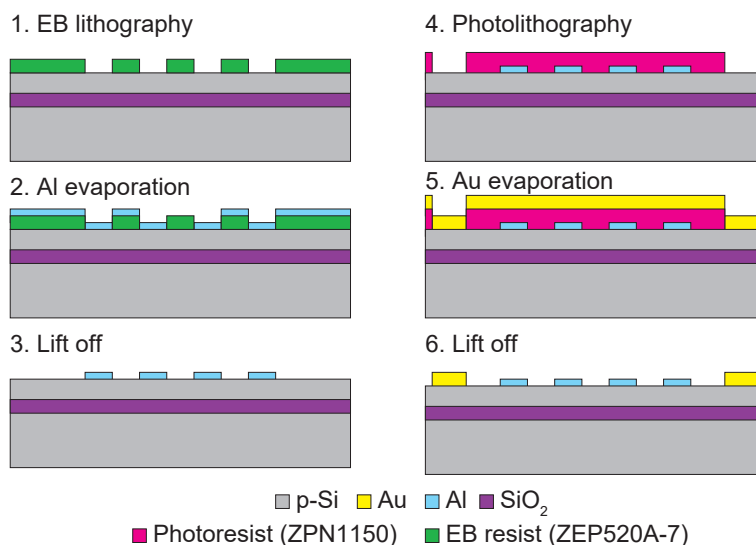


Fig. 2.24 ホール電圧測定用のデバイスの製作方法.

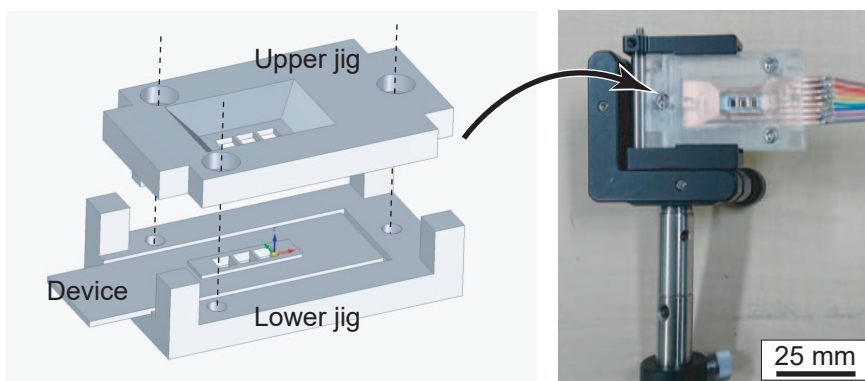


Fig. 2.25 デバイス保護および位置合わせのための治具.

デバイスに光を照射するための実験セットアップを Fig. 2.26(a) に示す. 実験に使用する光源は波長可変レーザの Firefly-IR-LP-A (MSquared) である. 10 ns のパルスで 150 kHz で放射するパルスレーザで, 波長  $2.5 \mu\text{m}$  から  $3.7 \mu\text{m}$  までの単色光を出力可能である. 入射光は鉛直方向に偏光されて出力されるため, ミラーを 2 回使用して水平偏光にした. 可視を含む単波長の励起光が同時に照射されるので, 波長  $2.4 \mu\text{m}$  以下の光をカットするロングパスフィルタを通して使用した. 光はシャッタを通過させた後, アイリスで受光面内に収まる径まで絞り, ビームスプリッタ (BSW511, Thorlabs) で光を分割した. 入射光の一部は熱型パワーメータ 1 (S405C, Thorlabs) に入射し, 残りはデバイスに垂直に照射される. デバイスで反射した光は再度ビームスプリッタに向かい, ビームスプリッタの裏面で反射されてもう一つの熱型パワーメータ 2 に入射する. パワーメータの前には迷光を遮るためにアイリスを設置した. セットアップ全体は防振台の上に

構築した上で、人体や機械装置からの放射熱を遮るためにアルマイト加工したアルミニウム板で覆いを設置した。配線を外部に取り出すための穴を除いて外部から放射熱の入る場所はなく、穴もアルミニウム箔を用いてできる限り塞いだ。デバイスは電流の出入りに使用する電極はソースメータ (2418B, Keithley) に直接つなぎ、固定電圧を印加して電流量を計測した。パワーメータおよびソースメータの計測頻度は約 0.15 秒間隔である。

2 個のパワーメータの計測値と、デバイスに入射する光量とデバイスの垂直反射率の関係を事前に求めておくことで、常にこれらの値を計測することが可能である。ビームスプリッタにレーザ側から入射した光の強度を  $S_0$ 、パワーメータ 1 および 2 に入射する光強度を  $S_{d1}, S_{d2}$  とし、レーザ側からビームスプリッタに入射した光の反射率を  $r_1$ 、透過率を  $t$ 、デバイス側から入射した光の反射率を  $r_2$  とすると、デバイスへの入射強度  $S_i$  およびデバイス表面での反射率  $S_r/S_i$  には次のような関係がある。

$$S_i = tS_0 = \frac{t}{r_1} S_{d1} \quad (2.64)$$

$$\frac{S_r}{S_i} = \frac{S_{d2}/r_2}{tS_{d1}/r_1} = \frac{r_1}{tr_2} \frac{S_{d2}}{S_{d1}} \quad (2.65)$$

したがって、波長ごとに係数  $t/r_1$  および  $r_1/tr_2$  を求めておけば、パワーメータの計測値から入射強度およびデバイスでの反射率をモニタすることができる。

係数は **Fig. 2.26(b)** の (1) および (2) に示す実験セットアップによりそれぞれ求めることができる。(b-1) ではデバイスの位置にパワーメータ 2 を置き、パワーメータ 2 の計測値をパワーメータ 1 の計測値で割ることで  $t/r_1$  が求まる。(b-2) ではデバイスの位置に、中赤外領域で反射率がほぼ 1 であるアルミニウムを用いて、パワーメータ 1 の計測値をパワーメータ 2 の計測値で割ることで  $r_1/tr_2$  を求めることができる。今回の実験セットアップにおける両パラメータを **Fig. 2.26 (b-3)** に示す。また、デバイスへの典型的な入射光量  $S_i$  を **Fig. 2.26(c)** に示す。

**Fig. 2.26(d)** は、ビームスプリッタを通したあとの、デバイスに入射する光のスペクトルを市販のスペクトラムアナライザ (Wavescan, APE) を用いて計測したものである。レーザへの出力指令値を波長  $2.5 \mu\text{m}$  から  $3.7 \mu\text{m}$  まで  $0.1 \mu\text{m}$  ごとに変化させて計測した。計測結果にガウス関数をフィットさせた結果、全幅半値幅 (FWHM) は  $7.00 \text{ nm}$  から  $11.2 \text{ nm}$  の間であった。

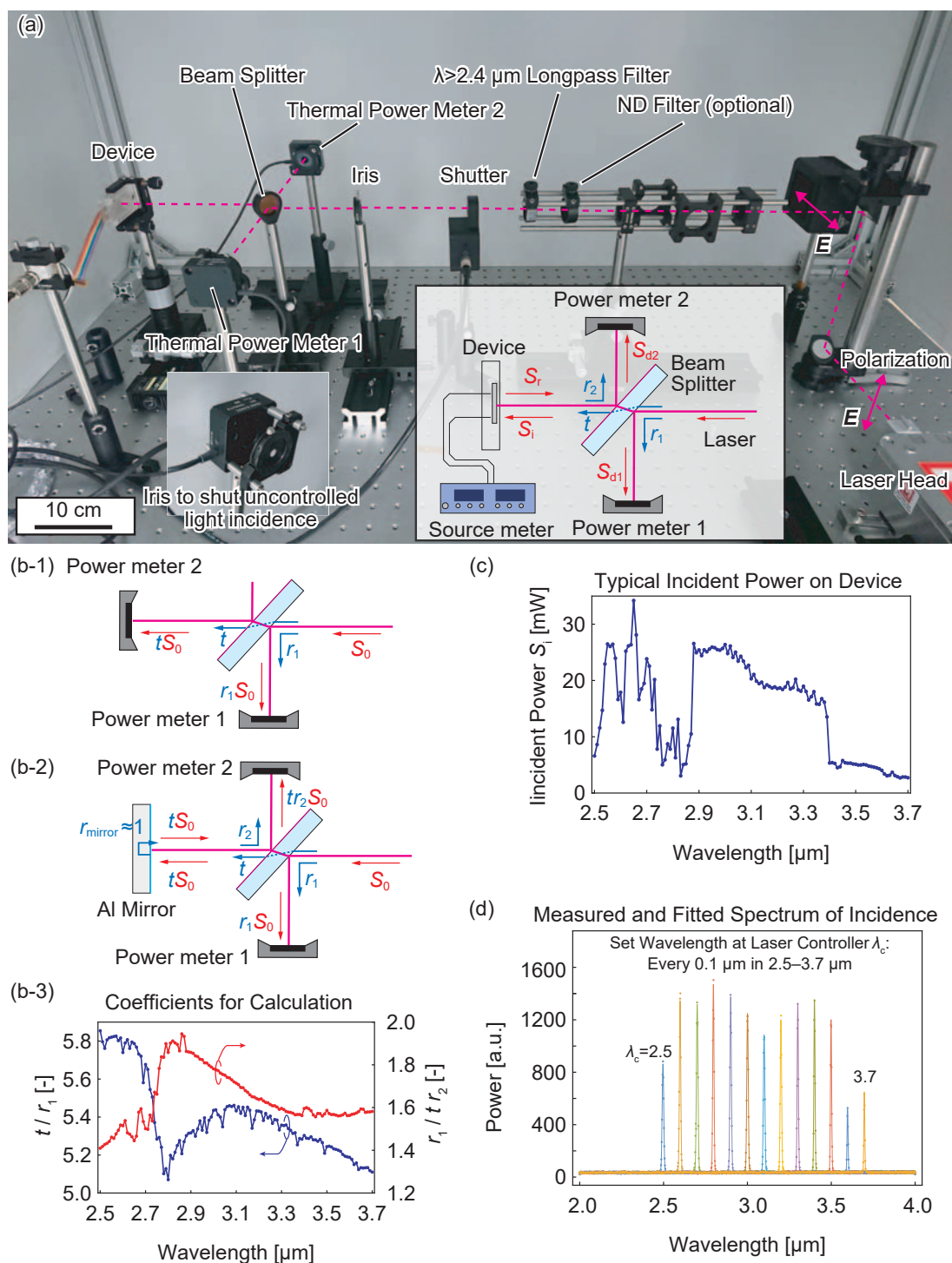
デバイスの感度は、シャッタを開閉してレーザ照射をオン・オフした際のデバイスの抵抗変化率を入射強度  $S_i$  で割って求めた Responsivity である。

$$\text{Responsivity} [\text{W}^{-1}] = \frac{\Delta R/R [-]}{S_i [\text{W}]} \quad (2.66)$$

抵抗変化率は、印加した電圧を計測した電流で除することで求めた抵抗値から光照射前の抵抗値を差し引き、さらに光照射前の抵抗値で除したものである。

$$\frac{\Delta R}{R} = \frac{V/I - V_0/I_0}{V_0/I_0} \quad (2.67)$$

本研究のデバイスは温度変化を捉えるデバイスであり、回折格子の形状を検討する段階ではデバイスの熱容量を下げるための光速応答性の検討等は行っていない。また、最大室温は変化しないよう努めたが、環境温度変化などの影響をうけて信号全体がドリフトする場合がある。したがって、デバイスに光を入射した際の典型的な応答は **Fig. 2.27** 左に示すようなものとなる。



**Fig. 2.26** 実験セットアップ。(a)セットアップ全景。インセットにビームスプリッタまわりの計測値から入射光強度および反射率を導出する際の概略図を示す。(b)入射光強度および反射率を導出する際に必要となる係数の計測セットアップ(1,2)と計測結果(3)。(c)典型的な入射光強度。(d)レーザへの指令値ごとにデバイスに照射される光のスペクトル。

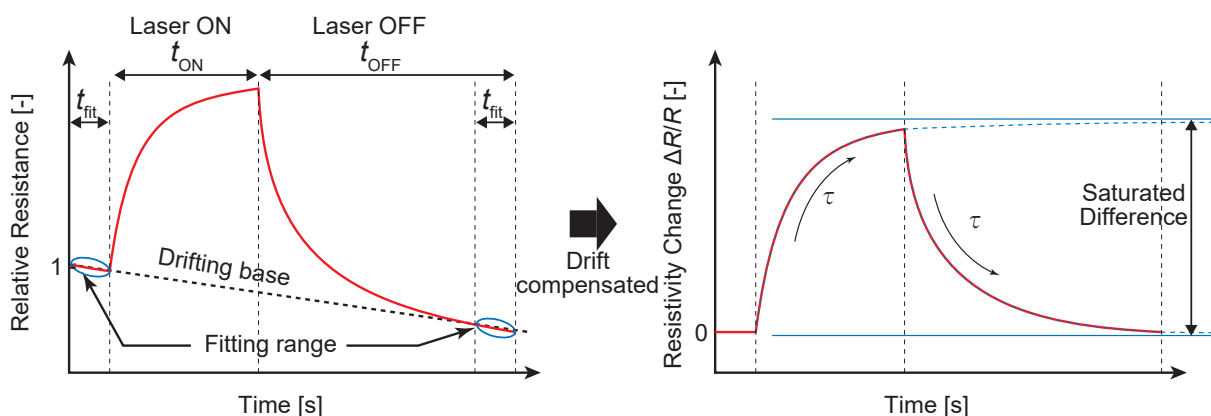


Fig. 2.27 典型的な計測値の例と処理方法.

そこで本研究では次のようにしてレーザ照射オン・オフ時の抵抗値の応答変化を求めた。まず、レーザを当てていない状態から計測を開始し、シャッターをあけてレーザを  $t_{ON}$  秒間デバイスに照射する。その後シャッターを閉じ、さらに  $t_{OFF}$  秒間待機してデバイス温度がある程度もとの温度に戻す。そして、レーザ照射前  $t_{fit}$  と、レーザ照射後  $t_{OFF} - t_{fit}$  秒がたったあとの計測値を直線近似し、ドリフト成分として除去する。残ったデータは立ち上がり・立ち下がりを含むデータとなる。それぞれに指数関数  $a + b \exp[-t/\tau]$  をフィットさせ、終端値  $a$  を求める。立ち上がりとしち下がり両方の終端値の差を、レーザ照射オン・オフ時の抵抗値変化とする。以上を Fig. 2.27 に示す。

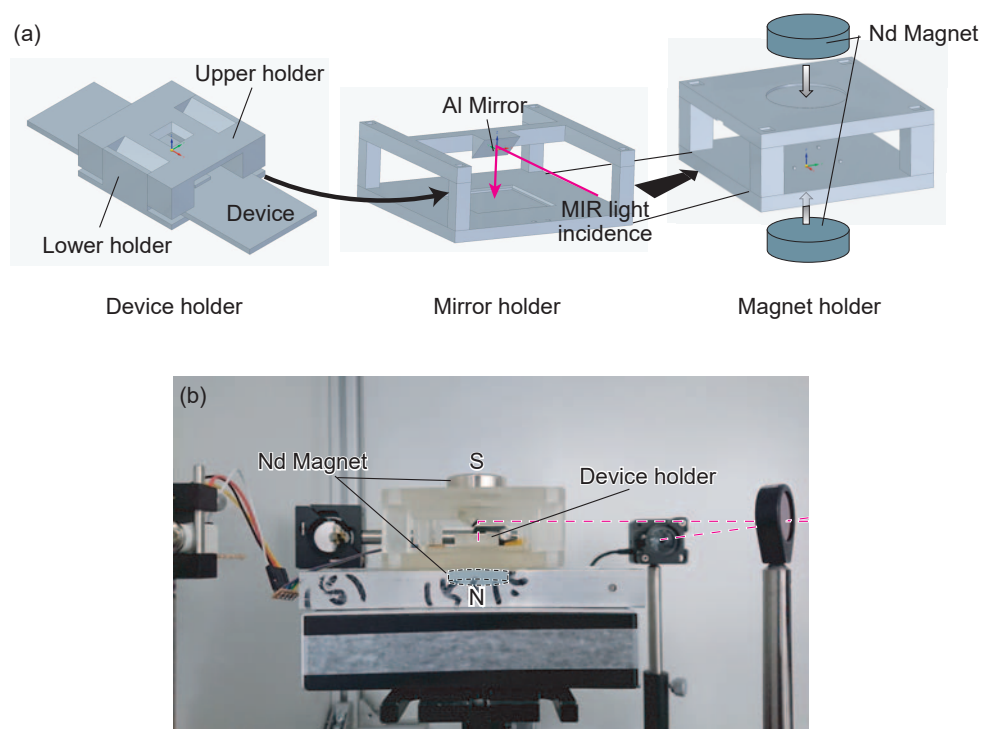
レーザ照射の時間  $t_{ON}$  とその後の待機時間  $t_{OFF}$  は、デバイスタイプ 1 ではともに 50 秒、デバイスタイプ 2 では 10 秒および 30 秒とし、デバイスタイプ 2 ではレーザオン・オフ時の時定数  $\tau$  が等しいと考えてレーザオフ時の時定数を先に求めてオン時のフィッティングに使用した。ドリフト成分を計算するのに使用する範囲  $t_{fit}$  は、デバイスタイプ 1 では 10 秒、デバイスタイプ 2 では 5 秒間とした。

すべての計測は室温 22 °C から 25 °C の間で計測を行った。

### 2.5.2 ホール効果計測

静磁場をデバイスに垂直方向にかけた上でデバイスに SPR が立つ向きに光を入射し、電流を計測するために Fig. 2.28 に示すような治具を作製した。位置合わせのためのデバイスホルダ、入射光がデバイスに垂直に入射するよう、45 度の向きにミラーを設置できるようにするミラーホルダ、2 個のネオジウム磁石を引き合う向きに配置して静磁場を作り出すためのマグネットホルダの 3 個のホルダからなり、それぞれ位置決めのための凹凸が下部についている。ミラーはシリコンウェハにアルミニウムを蒸着することで自作し、ネオジウム磁石は (NE038, 二六製作所, 表面磁束密度 555 mT) を引き合う向きに 30 mm 離して配置して強度的に問題ないよう、マグネットホルダの剛性を高めた。

デバイスは印加電流の出入、ホール電圧の取り出しがそれぞれできるよう、4 つの電極を造り付けたプリント基板にエポキシ樹脂で固定し、ホルダから導線で引き出してソースメータにつなげた。定電流をソー



**Fig. 2.28** ホール効果計測用の治具. (a) 設計および (b) 実際に作製して光学系に組み込んだ様子

スし、高インピーダンス条件でホール電圧を測定する。光は、抵抗の光応答計測と同様にビームスプリッタを使用して入射強度、反射率の測定ができるようにした。自作のアルミニウムミラーの反射率は100%であるとした。

## 第3章 デバイス評価

### 3.1 デバイス基礎特性評価

本節では、回折格子パラメータを振った評価の前に、共通する基礎的な特性を評価する。

#### 3.1.1 電気特性評価

**Fig. 3.1(a)**のように、デバイスタイプ1のデバイス(1-C)に熱電対を貼り付け、15-40°C程度の温度変化に対する電流-電圧特性を確認した。デバイス(1-C)は回折格子がないため、アルミニウム・p型シリコンの接触面積が既知である。表面積台座部分に加温装置がついており、加熱しながら実際のデバイスの温度は熱電対で計測した。台座部分にも温度計があるが、プリント基板を介して熱するため、熱電対の読みは台座部分より1-2°C低くなった。

**Fig. 3.1(b)**は金電極間の電流-電圧特性の計測結果である。計測した範囲内においては常に比例関係の電流-電圧特性が得られたが、傾きが温度によって変化した。原点を通る直線をフィットしたときの傾きとして抵抗を計算した結果が右であり、温度変化に対して減少する傾向が得られた。第2.5.1項で述べたように、今回の計測はすべて22°Cから25°Cで行ったが、この間、温度による抵抗変化の割合はほぼ線形とみなすことができる。

一方で金-アルミニウム電極間の電流-電圧特性は予備の金-アルミニウム電極間の電流-電圧特性計測で得られたのと同様に整流特性が確認でき、同様の分析方法によりアルミニウム-p型シリコン間のSchottky障壁高さは0.55 eVであると求められた。この障壁高さに相当する光の波長は2.3  $\mu\text{m}$ であり、2.5  $\mu\text{m}$ 以上の中赤外光ではSchottky障壁を上回る光電流が生じないことが確認できた。

#### 3.1.2 偏光方向について

デバイスタイプ1の金電極間に0.1 Vの電圧を印加した状態で電流変化を計測した結果を**Fig. 3.2**に示す。TM偏光条件はすべてデバイス(1-B)を使用し、TE偏光条件はデバイス(1-A)である。各測定前の光学系のアラインメントによって一部の光が正しくパワーメータに入射せず、全体に反射率スペクトルが上下することがあるため、この計測結果について互いのスペクトルの絶対値を直接比較することは必ずしも正しくないが、各スペクトル内の変化および大まかな絶対値は比較できる。計測の結果、TM偏光条件ではどの回折格子ピッチに対しても同様の特徴を持った反射率スペクトルが得られ、ピッチの広がりとともに長波長側へシフトする様子が見られた。一方TE偏光では波長変化に対してほとんど反射率が変化せず、TM偏光

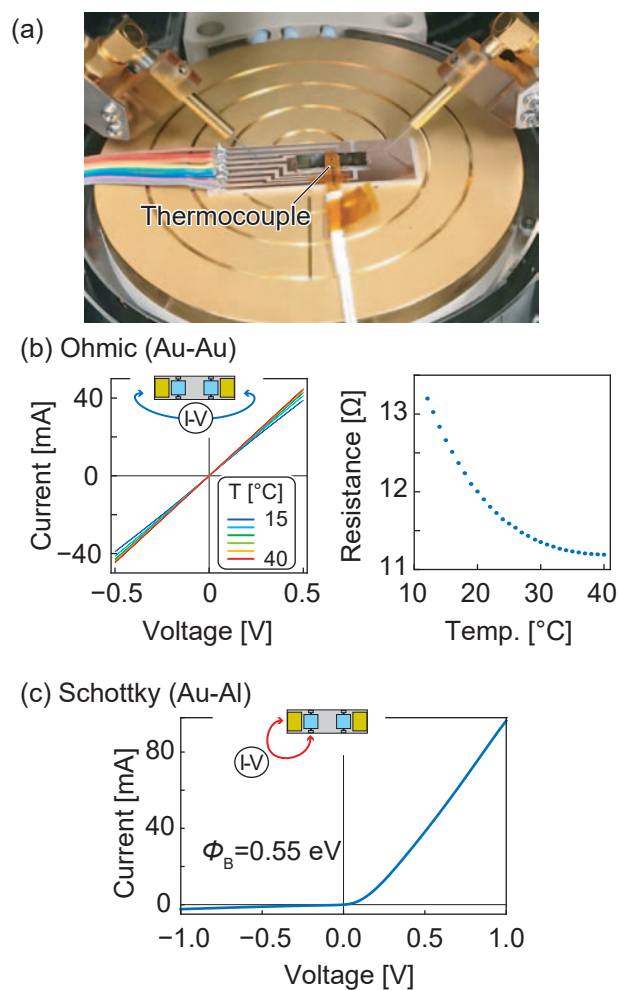


Fig. 3.1 デバイスタイプ 1 の電気特性 [75]. (©2021 IEEE, 一部改変)

条件の最大値よりも高い反射率でほぼ一定であった。

感度については基本的に反射率が低いほど高い感度という関係が成立し、TM 偏光では感度のピーク位置が反射率のディップ位置に一致したのに対して、TE 偏光ではどの波長においても感度が TM 偏光に比べて低い水準にとどまり、かつ一定であった。しかし、必ずしも反射率の減少分と感度の増加分は比例しなかった。例えばピッチ  $3.2 \mu\text{m}$  のオレンジ色のプロットでは、感度最大となるのは波長  $3.30 \mu\text{m}$  のときだが、反射率が最小となったのは波長が  $2.89 \mu\text{m}$  のときで、このとき感度は  $3.30 \mu\text{m}$  での最大感度の 48%にとどまった。ピッチ  $3.0, 3.4 \mu\text{m}$  ではそれぞれ、感度の最大ピーク位置は  $3.11 \mu\text{m}$  および  $3.49 \mu\text{m}$  となった。

Fig. 3.1(a) と同様にして、デバイス (1-A) の中央に熱電対式の温度計を貼付して、ピッチ  $3.2 \mu\text{m}$  の左側受光面に TM 条件で光を照射した際の基板の温度変化を調べたところ、波長  $3.30 \mu\text{m}$ 、 $39 \text{ mW}$  の光照射のもとで 50 秒間に  $0.8^\circ\text{C}$  の温度上昇が確認できた。

TM 条件の波長感度特性 3 プロットにおける最小・最大比はピッチ  $3.0, 3.2, 3.4 \mu\text{m}$  それぞれに対して 18, 21, 23 %であり、最大ピークから短波長側への片側半値幅 (Half-Width Half-Maximum; HWHM) は 57, 46, 43



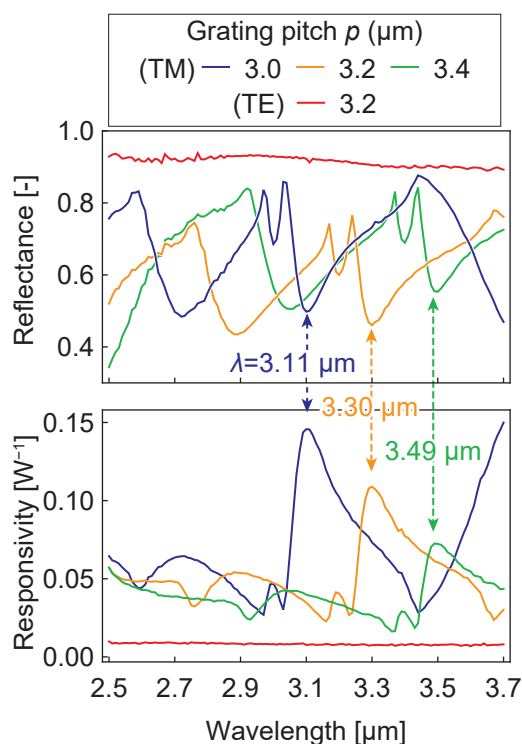


Fig. 3.2 デバイスタイプ 1 の波長感度特性および反射率<sup>[75]</sup>. (©2021 IEEE)

nm であった。一方で、ピッチが広くなるにつれて長波長側に特徴がシフトするだけでなく、全体に感度が小さくなる傾向が見られた。各ピーク位置において反射率スペクトルは同程度の落ち込みを示しており、波長感度特性のダイナミックレンジや HWHM も同程度であることから、ピッチにより感度のレンジが異なったという結果は、回折格子の形状の差によるものではなく、受光面のデバイス上の位置によるものであると考えられる。

同じピッチ  $3.2 \mu\text{m}$  を有する (1-A) の TE 条件 (右側受光面) と (1-B) の TM 条件 (中央受光面) を使用して求めた偏光方向による応答比は、最小でも 2.74 倍であり、これは TM 偏光に対する応答が最小となる  $\lambda = 3.16 \mu\text{m}$  における値である。最大は、感度が最大となる  $\lambda = 3.30 \mu\text{m}$  において 15.0 倍である。

感度最大となる波長の約 100 nm 短波長側において、反射率スペクトルおよび波長感度特性にそれぞれディップと小さなピークが見られるが、この波長は SPR の理論値と合致する。後の入射角依存性および考察で詳述するが、これはデバイスへの光入射が正確に垂直でなかったことに起因すると考えられる。

### 3.1.3 光強度について

このように得られた波長感度特性は、今回測定範囲において光強度に無依存であった。Fig. 3.3 に、10% Neutral Density (ND) フィルタを用いて光量を変化させた際の波長感度特性を示す。計測に使用したデバイスは (1-B) で、中央のピッチ  $3.2 \mu\text{m}$  の受光面に光を照射した。使用した ND フィルタは入射光強度を約

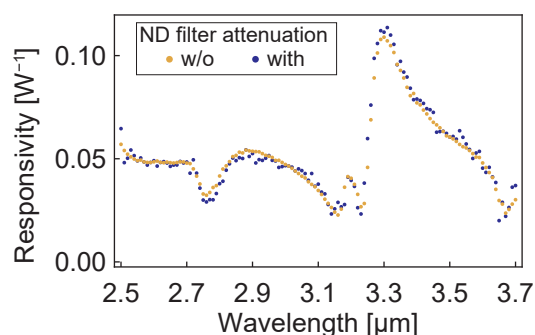


Fig. 3.3 ND フィルタを用いて光強度を変化させた場合の感度の変化<sup>[75]</sup>. (©2021 IEEE)

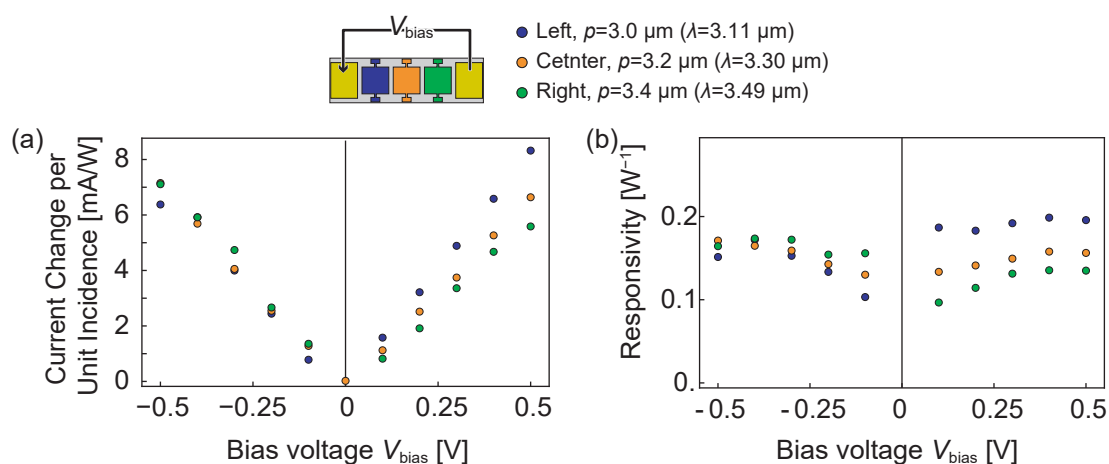


Fig. 3.4 バイアス電圧に対する応答の変化. (a) 電流変化<sup>[75]</sup>(©2021 IEEE, 一部改変) および (b) 感度変化.

10%まで減衰させる。入射強度が減少した分、ND フィルタありのデータは信号雑音比が減少し、ND フィルタなしの強い光を入射した場合のプロットよりばらつきが大きいですが、大小の一方に偏ることなくばらついており、感度は一定であるといえる。入射光強度を変えて感度を計測しても波長感度特性が変化しないということは、デバイスの光応答が入射光強度に対して線形であることを示す。今回の実験セットアップでは最大 50 mW 程度の強度の光を使用しており、本デバイスは 50 mW 程度までは光強度に線形に反応すると言える。

### 3.1.4 バイアス電圧について

印加するバイアス電圧を変化させた際の応答は Fig. 3.4 に示すとおりである。ここでは感度に加えて、電流応答を光強度で割った値を縦軸にとった図を示してある。使用したデバイスは (1-B) で、3 面の受光面に対してそれぞれの感度が最大となる波長で計測を行った。バイアス電圧が大きい時、デバイスにおいて生じ

るジュール熱が大きく、基板温度が完全な定常状態になるのに非常に時間を要したので、光を照射しないときのベースの電流量を他の実験では直線でフィッティングするところ、この実験でのみ指数関数でフィッティングした。電流応答については電流変化量の絶対値をとっているため、 $V_{\text{bias}} < 0$  については  $V_{\text{bias}}$  軸で折り返した形となっている。電流応答はバイアス電圧の絶対値に対して線形に増加している。バンドギャップや Schottky 障壁を利用した光電流が光応答のパスであれば、バイアス電圧に対して非線形に応答するはずであるから、この結果は光応答がデバイスの抵抗変化に変換されていることを裏付けているといえる。

一方で、デバイス形状に関して非対称になっている左、右の受光面の電流応答はバイアス電圧の方向によって傾きに差が出た。Fig. 3.4(b) はこの傾向をうけて、左右の受光面の感度の大小がバイアス電圧の方向によって入れ替わる結果となった。この結果は、Fig. 3.2 においてピッチによる感度レンジの差が現れたことと整合する。この差については第 3.2.7 項で詳述する。

### 3.1.5 計測の再現性について

Fig. 3.5 は、計測時の波長掃引方向による感度および反射率の計測結果およびそれらの差を示したものである。使用したデバイスはデバイスタイプ 2 で、高ドープ p 型シリコンウェハを用いた回折格子ピッチ  $p = 2.97 \mu\text{m}$ 、トレンチ幅  $w$  は  $p$  の 10%、トレンチ深さ  $d = 500 \text{ nm}$  のものである。アラインメントを固定し、100 nm 間隔の波長における計測を昇順および降順で行った。計測結果の差については、計測値の差の絶対値を 2 回の計測値の平均値で除してパーセンテージ表示した。

反射率の計測結果については、大きな差はなく、入射強度が弱くなる長波長側において差が大きくなったものの、全体に 2 回の計測の差は 0.5% を下回った。感度については、両端、すなわち計測開始および終了となる波長において差が大きくなったが、それ以外での差は両端ほど大きくなかった。両端における大きな差は、バイアス電圧を印加してからジュール熱によるデバイスの発熱が定常状態に落ち着く前に計測が開始されたことに由来すると考えられる。計測時のバイアス電圧は 0.1 V で、電流量は 6 mA 程度であり、計測回路において生じるジュール熱は 0.6 mW 程度あったことになる。実験時の入射光強度は、Fig. 2.26(c) に示したように、波長  $2.5 \mu\text{m}$  および  $3.7 \mu\text{m}$  においては 10 mW を下回った。したがって、ジュール熱による基板温度変化が完全に落ち着くまではジュール熱は無視できない量であり、2 点目以降の計測で時間が経過して基板温度が定常状態になったことで差が小さくなったと考えられる。一部の項目を除き本研究では  $2.5 \mu\text{m}$  から  $3.7 \mu\text{m}$  を 10 nm 間隔で 121 点、短波長側から計測しているため、 $2.50 \mu\text{m}$  の計測結果のみ比較的大きな計測誤差を含んでいるが、 $2.51 \mu\text{m}$  以上の値は平衡状態に近い状態で計測を行えているといえる。

本図は雑誌掲載の形での刊行 (5 年以内) に出版予定) が予定されるため、  
非公開とする

Fig. 3.5 波長走査方向を変えたときの計測結果.

本図は雑誌掲載の形での刊行(5年以内に出版予定)が予定されるため、  
非公開とする

**Fig. 3.6** ホール電圧計測用デバイスの計測結果. (a) 光非照射時の印加電流とホール電圧の関係. (b) 波長  $3.3 \mu\text{m}$  のときの印加電流あたりのホール電圧の時間応答. (c) デバイスへの垂直反射率および (d) 光強度あたり、印加電流あたりのホール電圧.

### 3.2 回折格子パラメータによる評価

本項は雑誌掲載の形での刊行(5年以内に出版予定)が予定されるため、  
非公開とする

### 3.3 ホール効果を用いた移動度計測

**Fig. 3.6** に長辺方向の印加電流とホール電圧の計測結果を示す. **Fig. 3.6(a)** は光を照射していない時の印加電流に対するホール電圧である.  $I_{\text{Impose}}$  がデバイスの長軸方向に一定して印加する電流であり、縦軸  $V_{\text{H}}$  がローレンツ力に従って生じるホール電圧である. 印加電流  $I_{\text{Impose}}$  に比例してホール電圧  $V_{\text{H}}$  が増加する関係は、理論から導かれる関係と一致しており、この実験セットアップによりホール効果を捉えることができることを示している.

長辺方向に  $5 \text{ mA}$  の定電流を流した状態で、光を ON/OFF させると、**Fig. 3.6(b)** のように応答した. このとき縦軸はホール電圧と印加電流の比  $V_{\text{H}}/I_{\text{Impose}}$  であり、式 (2.58) で示したように、正孔の移動度に比例する量である. 計測中  $I_{\text{Impose}}$  の値は安定しており、主にホール電圧が変化した. 光を照射すると、 $V_{\text{H}}/I_{\text{Impose}}$  は  $10$  秒程度の時定数で徐々に減少し、光の照射をやめると同程度の時定数で上昇に転じた. このことは、光を照射したときにキャリアの移動度が低下していることを示している. また、**Intervalence Band Transition** に対応するような早い応答は、計測範囲内では観察することができなかった.

この計測においては光の照射 ON/OFF のインターバルを  $10$  秒としたため、信号は定常状態には全く届かない状態で推移することになった. ON/OFF 状態が切り替わる直前  $1$  秒間の値を ON 時・OFF 時それぞれで平均をとって差分を光応答とすると、**Fig. 3.6 (c,d)** に示すような結果となった. ピッチ  $3.2 \mu\text{m}$  の回折格子であり、回折格子パラメータ評価実験において同じピッチの回折格子のデバイスで  $3.3 \mu\text{m}$  付近に感度のピークが現れたことを考えると、波長  $3.3 \mu\text{m}$  において反射率が増加し、かつ感度が低下したことは **SPR** に関係していると考えられる.

p 型シリコンの温度変化に対する抵抗率変化はどのドーピング濃度に対しても正の関係である<sup>[103]</sup>. 温度が上昇すると抵抗率が上昇する. 抵抗とキャリアの移動度は反比例するから、キャリアの有効質量が変化しない状況において温度が上昇したときには、キャリアの移動度は低下することになる.

**Intervalence Band Transition** がもし起こっているとすれば、光照射によって正孔の移動度は増加するはずであるから、実験結果は **Intervalence Band Transition** がこのデバイス応答の主な経路ではないことを示して

本図は雑誌掲載の形での刊行(5年以内に出版予定)が予定されるため、  
非公開とする

**Fig. 3.7** 実測の波長感度特性を使用した再構成結果. (a) 再構成に使用する入射スペクトル, (b) 計測ノイズなしの場合の再構成結果および (c) 計測ノイズレベル  $\sigma_r = 0.01$  の場合の再構成結果. (d) 入射スペクトル幅ごとの計測ノイズが 0.1% のときの再構成誤差  $\hat{E}$  および (e) 計測ノイズに対する脆弱さ  $\Delta\hat{E}$ .

おり、かつ、デバイスの温度変化が主な応答の経路であることを強く示唆している。

### 3.4 計測結果と理論の比較

第 3.2.1 項で得られた、 $N = 20$  の実測の波長感度特性を用いて、数値的にスペクトルの再構成を行い、第 2 章で述べたディテクタの適切性について検証する。

#### 3.4.1 再構成結果

入射スペクトルとして使用する波形を **Fig. 3.7(a)** に示す。スペクトルのパラメータは第 2.1.7 項で考慮したものと同様である。

この入射スペクトルおよび実測の波長感度特性から、デバイスの出力を計算し、その値をもとに再構成を行った結果が **Fig. 3.7(b)** である。入射スペクトルの幅ごとに再現性に関してばらつきはあるものの、実際に計測した波長感度特性を使用して入射スペクトルの再構成が行えていることが確認できた。**Fig. 3.7(c)** はノイズレベル  $\sigma_r = 0.01$  のときのもので、緩やかな入射スペクトルに対しては上下へのばらつきが多くなったが、半値幅が 200 nm 程度の波形の場合にはノイズのもとでも再構成が行えている。

入射スペクトルの幅ごとの再構成の精度およびノイズへの耐性を **Fig. 3.7 (d,e)** に示す。第 2.1.7 項での議論と同様の指標で表示しているが、まったく計測誤差のない状況での比較には意味がないので、精度の指標としてノイズレベルが 0.1% のときの再構成誤差を用いている。第 2.1.7 項での議論と同様に、幅の狭いスペクトルにおいて再構成の精度が低下したが、これはディテクタの数に対して入射スペクトルの幅が狭いことにより高周波成分が生じ、その再現が行えなかったことに由来する。ノイズへの脆弱性の観点では、狭いスペクトルほど再構成結果に差が小さく、0.1% と 1% の計測誤差のほとんど差が出なかったが、スペクトルが広がるにつれて計測誤差の影響を強く受ける傾向が得られた。

同じ図中には、同様のセンサ構成を用いた先行研究<sup>[8]</sup>の図から読み取った波長感度特性を用いて再構成した結果を比較として表示している。本研究と先行研究を比較すると、再構成の精度を失わずに、ノイズ耐性が高まっている。今回定義したノイズ耐性の指標では、4 種のスペクトル幅の平均で 9.4 倍のノイズ耐性となった。序論に述べたとおり、外部フィルタなしでの中赤外領域における再構成分光デバイスの研究はいまだ黎明期で数が少なく、比較が難しい。そのなかでこの先行研究は比較的新しく、同様のデバイス構成を用いており、波長帯域についても比較が可能である。この結果は、本研究において波長感度特性の周波数特

本図は雑誌掲載の形での刊行(5年以内に出版予定)が予定されるため、  
非公開とする

**Fig. 3.8** 実測の波長感度特性に DC 成分を加えた波長感度特性を使用した再構成結果. (a) 再構成に使用する入射スペクトル, (b) 波長周波数成分を表す  $\mathbf{K}$  行列の各行の成分. (c) DC 成分の割合ごとの条件数の変化. (d) 計測誤差 0.1% のときの再構成の誤差  $\hat{E}$  および (e) ノイズへの脆弱性  $\Delta\hat{E}$  の評価結果.

性を分析し適切な構造を選ぶことによって, 不要な高周波成分を含まず, 必要な範囲で急峻かつ高ダイナミックレンジなディテクタが構成できたことを示している.

以上の結果から, 本研究で得られた波長感度特性を用いて再構成分光を行うことが可能であることが示された.

### 3.4.2 波長感度特性の最大・最小比および傾きによる再構成結果への影響

実測の波長感度特性を用いて, 波長感度特性の最大・最小比および最大傾斜が再構成結果へ与える影響について, 実測値をもとに新たな波長感度特性を作製して評価した.

#### 最大・最小比に関して

実測の波長感度特性を用いて, 最大・最小比のみをパラメータとした検証を行うために, 得られた波長感度特性にオフセットをはかせた後に最大値がもとの波長感度特性と一致するよう圧縮し, 新たな波長感度特性を作製した (**Fig. 3.8(a)**). もとの波長感度特性のすべてのディテクタの中での最大値に対して, オフセットが占める割合をパラメータとする. オフセットをよとの波長周波数成分を **Fig. 3.8(b)** に示す. DC 成分に対応する  $j = 1$  の値は全てでほぼ等しく, AC 成分に相当するそれ以降の値が, 振幅の減少とともに小さくなっている. AC 成分が小さくなった結果, 各ディテクタの相関が大きくなり, **Fig. 3.8(c)** に示すように, 最大固有値と最小固有値の比で表される条件数はオフセットが大きくなるにつれて増大し, 劣決定の悪問題性が高まった. その結果, 計測ノイズが 0.1% と小さい場合には, 90% のオフセットを課した場合を除いてほとんど再構成精度 (**Fig. 3.8(d)**) には変化がないものの, ノイズ脆弱性 (**Fig. 3.8 (e)**) はオフセットが大きくなるにつれて急激に悪化した. この結果は, 波長感度特性において DC 成分が少なく, ダイナミックレンジが大きいことがノイズに強い再構成を行う上で必要であることを示している.

#### 最大傾斜に関して

波長感度特性の最大・最小比を変化させず, 傾斜のみを変化させるために, 実測の波長感度特性の  $3.7 \mu\text{m}$  端を起点にして波長感度特性を横に拡大し, Hermite 補完によって再サンプリングして新たな波長感度特性を作製した (**Fig. 3.9(a)**). 拡大によって, **Fig. 3.9(b)** に示すように波長周波数成分は波長周波数に対し

本図は雑誌掲載の形での刊行(5年以内に出版予定)が予定されるため、  
非公開とする

**Fig. 3.9** 実測の波長感度特性を波長方向に引き伸ばして作製した波長感度特性を使用した再構成結果. (a) 再構成に使用する入射スペクトル, (b) 波長周波数成分を表す  $\mathbf{K}$  行列の各行の成分. (c) DC 成分の割合ごとの条件数の変化. (d) 再構成の誤差  $\hat{E}$  および (e) ノイズ脆弱性  $\Delta\hat{E}$  の評価結果.

てより強く減少するようになり,  $(N-1)/2$  倍振動を表す  $j=20$  の値でみると, もとのスペクトルでは  $j=1$  のときの約  $1/100$  であるのに対し, オフセットが  $90\%$  のときには約  $1/1000$  となった. 拡大による条件数への影響は顕著で,  $1.5$  倍の拡大で条件数が  $10$  倍になって悪問題性が増加した (**Fig. 3.9(c)**). **Fig. 3.9(d)** に示す再構成の精度の観点では, 拡大なしの場合でも  $\sigma_{in} = 50$  nm 以上の幅のスペクトルの再現は  $80\%$  程度まで可能であるが, 拡大によって不要な高周波成分が減少したこともあり,  $1.5$  倍以上の拡大のときに幅の広い  $\sigma_{in} = 200, 500$  nm のスペクトルの再現はほぼ完全であった. 一方, **Fig. 3.9(e)** のノイズ脆弱性の観点では,  $1.5$  倍の拡大でも  $1\%$  のノイズに対してほとんど再構成ができなくなるなど, 急激にノイズ耐性が減少した. 以上の結果は, ダイナミックレンジが一定であった場合においても最大傾斜が大きいことが必要であることを示す結果であり, 急激な傾斜の波長感度特性を重ね合わせるといった分光器の構成指針が正しいことを示している.

## 3.5 考察

### 3.5.1 デバイス動作原理

実験結果は, 電流変化の原因はデバイスの温度変化であると示唆していると考えられる.

第 3.1.2 項で述べたように, 受光面に光を照射した際, 実際に基板の温度変化が生じていることが確認できた. **Fig. 3.10** は, デバイス (1-A) 左受光面に光を照射した際, オーミック接触の金電極同士で回路を形成した場合と, 一方を Schottky 接合のアルミニウム電極にした際の電流の時間応答である. このように, デバイスタイプ 1 において金およびアルミニウムを電極に使用した場合にも同程度の時定数で光応答することが確認できる.

Hall 電圧の計測においては, Intersubband Transition から予測される結果とは逆の, 光照射時のキャリアの移動度低下が観測された. そして, デバイスの温度変化により抵抗が変化することによって移動度低下が説明できることも示した.

以上の結果から, 本研究で行った実験結果は, 光応答は主にデバイスの温度変化に由来すると考えることが妥当である. ただし, 第 3.2.7 項で触れた, 温度変化とは異なる速い応答に関しては, Intersubband Transition との関係を否定することは難しい. ここで見られた速い応答は, バイアス電圧に関わらず一定の電流値となって現れたので, 十分なバイアス電圧のもとで計測をすることで影響をおさえ, 温度変化による光応答の寄与を高めることで無視することができると考えられる.

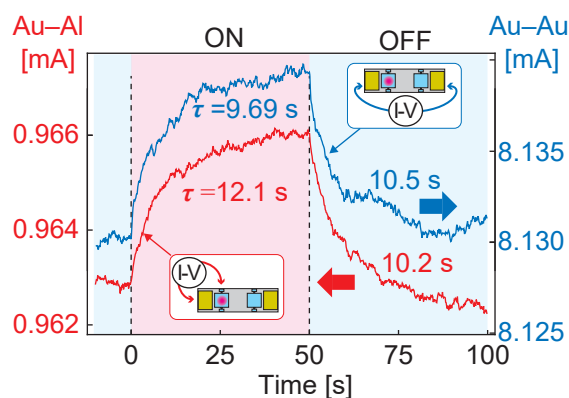


Fig. 3.10 回路を金-金電極間で行った場合と、金-アルミニウムで行った場合の信号.

本図は雑誌掲載の形での刊行 (5 年以内に出版予定) が予定されるため、  
非公開とする

Fig. 3.11 単色光を入射した際の再構成時の波形の広がり. (a,b) 波長 2.8, 3.1, 3.3  $\mu\text{m}$  の単色光をノイズレベル  $\sigma_r = 0\%$  および 1% で再構成した結果. (c) 入射光波長による全幅半値幅 (FWHM) の変化, (d) ノイズレベルごとの全幅半値幅の平均.

### 3.5.2 入射角度依存性と急峻な波長感度特性発生について

本項は雑誌掲載の形での刊行 (5 年以内に出版予定) が予定されるため、  
非公開とする

### 3.5.3 波長分解能に関して

数学的検討において示されたように、もとのスペクトルをフーリエ変換した際の  $N/2$  倍振動以上の成分は再構成することができない。したがって、非常に波長幅が狭い入射光が入射した際には、ある程度の広がりをもって再構成される。Fig. 3.11 (a,b) に、単色光の入射を想定してノイズレベル  $\sigma_r = 0\%$  および 1% で数値的に再構成した結果を示す。点線は 3 通りの入射光の波長を示す。単色光をのスペクトルをフーリエ変換するとすべての成分が等しく現れるので、その中の  $N/2$  倍振動以上の成分が再現されず、この分スペクトルが広がる。ノイズレベルは幅の広がりにはほとんど影響せず、再構成した結果の全幅半値幅 (Full-Width Half-Maximum, FWHM) はノイズレベルに依らずほとんど同じ値となった (Fig. 3.11 (c,d)). Fig. 3.11(c) 中の振動は波長感度特性の重なり具合に対応しており、最も広い半値幅となる波長は、各ディテクタの最大感度に対応した。このことは、各ディテクタの最大感度において傾きが小さくなり、波長方向の変化を捉えにくくなるのが原因であると考えられる。この凹凸を平均した結果、どのノイズレベルにおいても



本図は雑誌掲載の形での刊行(5年以内に出版予定)が予定されるため、  
非公開とする

**Fig. 3.12** 2波長の単色光を入射した際の再構成結果. 波長間隔は 60, 70, 80, 90 nm である.

FWHM は 67 – 68 nm となった. この値は, 2.5  $\mu\text{m}$  から 3.7  $\mu\text{m}$  の波長範囲を 20 個の計測点で計測するときの, Nyquist-Shannon のサンプリング定理から導かれる分解能<sup>[7]</sup> である 120 nm よりも小さい.

**Fig. 3.12** は, 異なる 2 波長の単色光が入射するときの数値再構成の結果である. 計測ノイズは 0% とした. 隣接する波長との間隔が 70 nm 以下の場合には区別することが出来ないが, 80 nm 以上ある場合には山を分離して再構成することが出来た. この結果は計測ノイズが増加しても変わらず, 80 nm の波長分解能を有するということができる.

### 3.5.4 条件を緩めた感度行列の周波数成分と精度の考察

第 2.1.6 項においては, 感度行列  $\mathbf{R}$  のフーリエ係数行列  $\mathbf{K}$  を, 低周波側の  $N$  列とそれより高周波の  $N+1$  列以降に分割し, それぞれ  $\mathbf{K}_N$  および  $\mathbf{\Delta}$  とおいた上で,  $\mathbf{\Omega} = \mathbf{K}_N^{-1}\mathbf{\Delta}$  が非常に小さく, 2 乗以上のべき乗の値を無視できるとした. しかし, 実際に得られる波長感度特性は, ある程度の高周波成分を含み, 無視できない場合もある. 本項では, ある程度高周波成分を含むフーリエ係数行列  $\mathbf{K}$  における再構成の精度に関して定性的な傾向を考察する. 具体的には, 低周波側の寄与が小さくなった場合 (そして同時に高周波側の寄与が大きくなった場合) の推定誤差の変化を考えることで, 波長感度特性の相対比較を行う. 推定誤差の上限を用いた絶対評価を考えた第 2.1.6 項とこの点で異なる. 後述するように, 本項の方法では, すべての入射スペクトルに対して再構成の精度が向上するということは示されず, 様々なスペクトルに対しての平均的な性能という観点で議論することで評価する.

本項では, 以下の 2 つの命題を使用する. それぞれの証明は付録 A に記す.

**命題 1.** 正則行列  $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{N \times N}$  と, 絶対値の小さな要素からなる正方行列  $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{N \times N}$  に対して  $(\mathbf{A} + \mathbf{X})^{-1}$  が存在し,  $\lim_{n \rightarrow \infty} (\mathbf{X}\mathbf{A}^{-1})^n = \mathbf{O}$  かつ  $\sum_{n=0}^{\infty} (\mathbf{X}\mathbf{A}^{-1})^n$  が収束するとき,

$$(\mathbf{A} + \mathbf{X})^{-1} = \mathbf{A}^{-1} \sum_{n=0}^{\infty} (-\mathbf{X}\mathbf{A}^{-1})^n \quad (3.1)$$

が成立する. ただし,  $(-\mathbf{X}\mathbf{A}^{-1})^0 = \mathbf{E}_N$  ( $N \times N$  の単位行列) である.

**命題 2.** 実行列  $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{N \times M}$  (ただし  $N < M$ ) に対し  $(\mathbf{E}_N + \mathbf{A}\mathbf{A}^T)^{-1}$  が存在するとき

$$(\mathbf{E}_N + \mathbf{A}\mathbf{A}^T)^{-1} - (\mathbf{E}_N + \mathbf{A}\mathbf{A}^T)^{-2} = \mathbf{A}(\mathbf{E}_M + \mathbf{A}^T\mathbf{A})^{-2}\mathbf{A}^T \quad (3.2)$$

が成立する. ただし行列の指数  $-2$  は逆行列の 2 乗を表す.

さらに，以下のような仮定をおく．

- 入射スペクトルも  $(N-1)/2$  倍振動以下のなめらかな成分を多く含み，高周波成分は支配的でない．
- 波長感度特性の高周波成分は低周波成分の値と同程度以下の絶対値である．フーリエ係数行列  $\mathbf{K}$  の  $N$  列目以下の低周波成分のみで構成した  $\mathbf{K}_N$  は正則で，逆行列を有する．

これらはともに妥当な想定であると考えられる．完全なランダムなスペクトルや波長感度特性であったとしても，低周波成分と高周波成分の値は同程度になる．さらに，現実的な波形では，シャープな特徴が含まれていたとしてもある程度の幅をもち，波形全体としても大局的に変化する成分が存在する．実際，第3.2節において得られた波長感度特性のフーリエ係数は，どれも高周波側が低周波側の振幅を上回ることにはなかった．このことを考えると，高周波成分が支配的になるようなスペクトルや波長感度特性は現実的でなく，上記の仮定は妥当といえる．

さて，低周波側の寄与をパラメータ化するために，第2.1.6項と同様に， $\mathbf{K} = \begin{bmatrix} \mathbf{K}_N & \Delta \end{bmatrix}$  と分割し，低周波側成分が

$$\mathbf{K}' = \begin{bmatrix} (1-\delta)\mathbf{K}_N & \Delta \end{bmatrix} \quad (3.3)$$

となったときと比較することを考える．ただし  $\delta$  は微小な実数で，2次以上の項は無視できるとする．推定誤差は第2.1.6項で示したように

$$e = \left\| \left( \mathbf{K}^T (\mathbf{K} \mathbf{K}^T)^{-1} \mathbf{K} - \mathbf{E}_M \right) \mathbf{W} \mathbf{P}^{\text{true}} \right\| \quad (3.4)$$

と書き表される． $\mathbf{W} \mathbf{P}^{\text{true}}$  は入射スペクトルの周波数成分を並べたベクトルである．この式中の  $\mathbf{K}$  が  $\mathbf{K}'$  となったときの推定誤差  $e'$  への変化を知るため，まず  $(\mathbf{K}' \mathbf{K}'^T)^{-1}$  から考えると，

$$\begin{aligned} (\mathbf{K}' \mathbf{K}'^T)^{-1} &= \left( (1-\delta)^2 \mathbf{K}_N \mathbf{K}_N^T + \Delta \Delta^T \right)^{-1} \\ &= \left( \mathbf{K}_N \mathbf{K}_N^T + \Delta \Delta^T - 2\delta \mathbf{K}_N \mathbf{K}_N^T \right)^{-1} \end{aligned} \quad (3.5)$$

と変化する．ここで  $\delta \mathbf{K}_N \mathbf{K}_N^T$  は  $\delta$  によってスカラー倍されているので，命題1における  $\mathbf{X}$  としての条件を満たす．したがって

$$(\mathbf{K}' \mathbf{K}'^T)^{-1} = \left( \mathbf{K}_N \mathbf{K}_N^T + \Delta \Delta^T \right)^{-1} \left( \mathbf{E}_N + 2\delta \mathbf{K}_N \mathbf{K}_N^T \left( \mathbf{K}_N \mathbf{K}_N^T + \Delta \Delta^T \right)^{-1} \right) \quad (3.6)$$

とかける．

いま  $\mathbf{B} = \mathbf{K}^T (\mathbf{K} \mathbf{K}^T)^{-1} \mathbf{K}$ ， $\mathbf{B}' = \mathbf{K}'^T (\mathbf{K}' \mathbf{K}'^T)^{-1} \mathbf{K}'$  とおき， $\mathbf{\Gamma} = \mathbf{B}' - \mathbf{B}$  を考える．

$$\mathbf{B} = \begin{bmatrix} \mathbf{K}_N^T \\ \Delta^T \end{bmatrix} \left( \mathbf{K}_N \mathbf{K}_N^T + \Delta \Delta^T \right)^{-1} \begin{bmatrix} \mathbf{K}_N & \Delta \end{bmatrix} \quad (3.7)$$

であることに注意すると,

$$\begin{aligned}
 \mathbf{\Gamma} &= \mathbf{K}'^T(\mathbf{K}'\mathbf{K}'^T)^{-1}\mathbf{K}' - \mathbf{K}^T(\mathbf{K}\mathbf{K}^T)^{-1}\mathbf{K} \\
 &= \left( \begin{bmatrix} \mathbf{K}_N^T \\ \Delta^T \end{bmatrix} - \delta \begin{bmatrix} \mathbf{K}_N^T \\ \mathbf{O} \end{bmatrix} \right) (\mathbf{K}_N\mathbf{K}_N^T + \Delta\Delta^T)^{-1} (\mathbf{E}_N + 2\delta\mathbf{K}_N\mathbf{K}_N^T(\mathbf{K}_N\mathbf{K}_N^T + \Delta\Delta^T)^{-1}) \left( \begin{bmatrix} \mathbf{K}_N & \Delta \end{bmatrix} - \delta \begin{bmatrix} \mathbf{K}_N & \mathbf{O} \end{bmatrix} \right) \\
 &= -\delta \begin{bmatrix} \mathbf{K}_N^T \\ \mathbf{O} \end{bmatrix} (\mathbf{K}_N\mathbf{K}_N^T + \Delta\Delta^T)^{-1} \begin{bmatrix} \mathbf{K}_N & \Delta \end{bmatrix} - \delta \begin{bmatrix} \mathbf{K}_N^T \\ \Delta^T \end{bmatrix} (\mathbf{K}_N\mathbf{K}_N^T + \Delta\Delta^T)^{-1} \begin{bmatrix} \mathbf{K}_N & \mathbf{O} \end{bmatrix} \\
 &\quad + 2\delta \begin{bmatrix} \mathbf{K}_N^T \\ \Delta^T \end{bmatrix} (\mathbf{K}_N\mathbf{K}_N^T + \Delta\Delta^T)^{-1} \mathbf{K}_N\mathbf{K}_N^T (\mathbf{K}_N\mathbf{K}_N^T + \Delta\Delta^T)^{-1} \begin{bmatrix} \mathbf{K}_N & \Delta \end{bmatrix}
 \end{aligned} \tag{3.8}$$

と計算できる.

推定誤差の2乗の変化を考えると,

$$e^2 = \mathbf{P}^T\mathbf{W}^T(\mathbf{B} - \mathbf{E}_M)^T(\mathbf{B} - \mathbf{E}_M)\mathbf{W}\mathbf{P} \tag{3.9}$$

となるから,

$$e'^2 - e^2 = \mathbf{P}^T\mathbf{W}^T \left( (\mathbf{B}' - \mathbf{E}_M)^T(\mathbf{B}' - \mathbf{E}_M) - (\mathbf{B} - \mathbf{E}_M)^T(\mathbf{B} - \mathbf{E}_M) \right) \mathbf{W}\mathbf{P} \tag{3.10}$$

$\mathbf{B}' = \mathbf{B} + \mathbf{\Gamma}$  であるから,

$$\begin{aligned}
 &(\mathbf{B}' - \mathbf{E}_M)^T(\mathbf{B}' - \mathbf{E}_M) - (\mathbf{B} - \mathbf{E}_M)^T(\mathbf{B} - \mathbf{E}_M) \\
 &= (\mathbf{B} - \mathbf{E}_M + \mathbf{\Gamma})^T(\mathbf{B} - \mathbf{E}_M + \mathbf{\Gamma}) - (\mathbf{B} - \mathbf{E}_M)^T(\mathbf{B} - \mathbf{E}_M) \\
 &= \mathbf{\Gamma}^T(\mathbf{B} - \mathbf{E}_M) + (\mathbf{B} - \mathbf{E}_M)^T\mathbf{\Gamma} + \mathbf{\Gamma}^T\mathbf{\Gamma}
 \end{aligned} \tag{3.11}$$

ここで,  $\mathbf{\Gamma}$  は  $\delta$  に比例するので2次以上の項を無視できる. また, 式(3.7)および式(3.8)より,  $\mathbf{B}$  と  $\mathbf{\Gamma}$  はともに対称行列である. これらを利用して整理し, 式(3.7)および式(3.8)を代入すると

$$\begin{aligned}
 &(\mathbf{B}' - \mathbf{E}_M)^T(\mathbf{B}' - \mathbf{E}_M) - (\mathbf{B} - \mathbf{E}_M)^T(\mathbf{B} - \mathbf{E}_M) \\
 &= \mathbf{\Gamma}\mathbf{B} + \mathbf{B}\mathbf{\Gamma} - 2\mathbf{\Gamma} \\
 &= \delta \begin{bmatrix} \mathbf{K}_N^T \\ \mathbf{O} \end{bmatrix} (\mathbf{K}_N\mathbf{K}_N^T + \Delta\Delta^T)^{-1} \begin{bmatrix} \mathbf{K}_N & \Delta \end{bmatrix} + \delta \begin{bmatrix} \mathbf{K}_N^T \\ \Delta^T \end{bmatrix} (\mathbf{K}_N\mathbf{K}_N^T + \Delta\Delta^T)^{-1} \begin{bmatrix} \mathbf{K}_N & \mathbf{O} \end{bmatrix} \\
 &\quad - 2\delta \begin{bmatrix} \mathbf{K}_N^T \\ \Delta^T \end{bmatrix} (\mathbf{K}_N\mathbf{K}_N^T + \Delta\Delta^T)^{-1} \mathbf{K}_N\mathbf{K}_N^T (\mathbf{K}_N\mathbf{K}_N^T + \Delta\Delta^T)^{-1} \begin{bmatrix} \mathbf{K}_N & \Delta \end{bmatrix}
 \end{aligned} \tag{3.12}$$

を得る. 第2.1.6項と同様に  $\mathbf{\Omega} = \mathbf{K}_N^{-1}\Delta$  と定義すると,

$$\begin{aligned}
 (\mathbf{K}_N\mathbf{K}_N^T + \Delta\Delta^T)^{-1} &= (\mathbf{K}_N^T)^{-1} \left( \mathbf{K}_N^{-1}\mathbf{K}_N\mathbf{K}_N^T(\mathbf{K}_N^T)^{-1} + \mathbf{K}_N^{-1}\Delta\Delta^T(\mathbf{K}_N^T)^{-1} \right)^{-1} \mathbf{K}_N^{-1} \\
 &= (\mathbf{K}_N^T)^{-1} (\mathbf{E}_N + \mathbf{\Omega}\mathbf{\Omega}^T)^{-1} \mathbf{K}_N^{-1}
 \end{aligned} \tag{3.13}$$

と変形できるので, 式(3.12)の値は

$$\delta \left( \begin{bmatrix} \mathbf{E}_N \\ \mathbf{O} \end{bmatrix} (\mathbf{E}_N + \mathbf{\Omega}\mathbf{\Omega}^T)^{-1} \begin{bmatrix} \mathbf{E}_N & \mathbf{\Omega} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \mathbf{E}_N \\ \mathbf{\Omega}^T \end{bmatrix} (\mathbf{E}_N + \mathbf{\Omega}\mathbf{\Omega}^T)^{-1} \begin{bmatrix} \mathbf{E}_N & \mathbf{O} \end{bmatrix} - 2 \begin{bmatrix} \mathbf{E}_N \\ \mathbf{\Omega}^T \end{bmatrix} (\mathbf{E}_N + \mathbf{\Omega}\mathbf{\Omega}^T)^{-2} \begin{bmatrix} \mathbf{E}_N & \mathbf{\Omega} \end{bmatrix} \right) \tag{3.14}$$

と書き表すことができる。

さて、前述の通り  $\mathbf{W}\mathbf{P}^{\text{true}}$  は入射スペクトルの周波数成分を並べたベクトルである。第 2.1.6 項と同様に、低周波側  $N$  成分を  $\tilde{\mathbf{P}}_N \in \mathbb{R}^N$ 、それより高周波側の成分を  $\tilde{\mathbf{P}}_{M-N} \in \mathbb{R}^{M-N}$  で書き表すことにする：

$$\mathbf{W}\mathbf{P}^{\text{true}} = \begin{bmatrix} \tilde{\mathbf{P}}_N \\ \tilde{\mathbf{P}}_{M-N} \end{bmatrix} \quad (3.15)$$

本項での仮定は、 $\tilde{\mathbf{P}}_N$  の各要素は  $\tilde{\mathbf{P}}_{M-N}$  の各要素よりも大きな絶対値をもつ傾向があると考えられるということである。この表記を使用して、フーリエ係数行列の低周波成分を  $(1-\delta)$  倍にしたときの推定誤差の 2 乗の変化の割合  $g$  を考えると、

$$\begin{aligned} g &= \frac{e'^2 - e^2}{\delta} \\ &= \begin{bmatrix} \tilde{\mathbf{P}}_N^T & \tilde{\mathbf{P}}_{M-N}^T \end{bmatrix} \left( \begin{bmatrix} \mathbf{E}_N \\ \mathbf{O} \end{bmatrix} (\mathbf{E}_N + \boldsymbol{\Omega}\boldsymbol{\Omega}^T)^{-1} \begin{bmatrix} \mathbf{E}_N & \boldsymbol{\Omega} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \mathbf{E}_N \\ \boldsymbol{\Omega}^T \end{bmatrix} (\mathbf{E}_N + \boldsymbol{\Omega}\boldsymbol{\Omega}^T)^{-1} \begin{bmatrix} \mathbf{E}_N & \mathbf{O} \end{bmatrix} \right. \\ &\quad \left. - 2 \begin{bmatrix} \mathbf{E}_N \\ \boldsymbol{\Omega}^T \end{bmatrix} (\mathbf{E}_N + \boldsymbol{\Omega}\boldsymbol{\Omega}^T)^{-2} \begin{bmatrix} \mathbf{E}_N & \boldsymbol{\Omega} \end{bmatrix} \right) \begin{bmatrix} \tilde{\mathbf{P}}_N \\ \tilde{\mathbf{P}}_{M-N} \end{bmatrix} \\ &= \tilde{\mathbf{P}}_N^T (\mathbf{E}_N + \boldsymbol{\Omega}\boldsymbol{\Omega}^T)^{-1} (\tilde{\mathbf{P}}_N + \boldsymbol{\Omega}\tilde{\mathbf{P}}_{M-N}) + (\tilde{\mathbf{P}}_N + \boldsymbol{\Omega}\tilde{\mathbf{P}}_{M-N})^T (\mathbf{E}_N + \boldsymbol{\Omega}\boldsymbol{\Omega}^T)^{-1} \tilde{\mathbf{P}}_N \\ &\quad - 2 (\tilde{\mathbf{P}}_N + \boldsymbol{\Omega}\tilde{\mathbf{P}}_{M-N})^T (\mathbf{E}_N + \boldsymbol{\Omega}\boldsymbol{\Omega}^T)^{-2} (\tilde{\mathbf{P}}_N + \boldsymbol{\Omega}\tilde{\mathbf{P}}_{M-N}) \end{aligned} \quad (3.16)$$

となる。各項はスカラーで、転置しても値が変わらない。また、

$$\left( (\mathbf{E}_N + \boldsymbol{\Omega}\boldsymbol{\Omega}^T)^{-1} \right)^T = \left( (\mathbf{E}_N + \boldsymbol{\Omega}\boldsymbol{\Omega}^T)^T \right)^{-1} = (\mathbf{E}_N + \boldsymbol{\Omega}\boldsymbol{\Omega}^T)^{-1} \quad (3.17)$$

より、第 3 項は第 1 項に等しい。したがって結局

$$g = 2\tilde{\mathbf{P}}_N^T (\mathbf{E}_N + \boldsymbol{\Omega}\boldsymbol{\Omega}^T)^{-1} (\tilde{\mathbf{P}}_N + \boldsymbol{\Omega}\tilde{\mathbf{P}}_{M-N}) - 2(\tilde{\mathbf{P}}_N + \boldsymbol{\Omega}\tilde{\mathbf{P}}_{M-N})^T (\mathbf{E}_N + \boldsymbol{\Omega}\boldsymbol{\Omega}^T)^{-2} (\tilde{\mathbf{P}}_N + \boldsymbol{\Omega}\tilde{\mathbf{P}}_{M-N}) \quad (3.18)$$

となる。この値が正であれば、フーリエ係数行列の低周波成分の寄与を小さくしたときに誤差が増大し、負であればかえって誤差が小さくなることを示す。 $g$  の正負は  $\tilde{\mathbf{P}}_N$ 、 $\tilde{\mathbf{P}}_{M-N}$  によって、すなわち入射スペクトルによって変化し、一定とはならない。スペクトルによっては、低周波側の寄与が減ずることで誤差が小さくなることもありうる。しかし、分光器としての性能は様々なスペクトルを総合的に再構成できることである。したがって、ここからは様々なスペクトルに関して誤差の平均をとるときに有効な項のみを考え、 $\langle g \rangle$  と表記する。

先述の通り、入射スペクトルは概して低周波側の成分は高周波側に比べて大きな絶対値をもつから、高周波側の寄与は小さいと考えることができる。このとき、あるスペクトル

$$\mathbf{P}_1^{\text{true}} = \mathbf{W}^T \begin{bmatrix} \tilde{\mathbf{P}}'_N \\ \tilde{\mathbf{P}}'_{M-N} \end{bmatrix}$$

を考えると、高周波成分を反転させた

$$\mathbf{P}_2^{\text{true}} = \mathbf{W}^T \begin{bmatrix} \tilde{\mathbf{P}}'_N \\ -\tilde{\mathbf{P}}'_{M-N} \end{bmatrix}$$

も非負の成分からなる可能なスペクトルとして想定することができる。これらの平均を考えたとき、式(3.18)のなかにおいて、行列の左右から  $\tilde{\mathbf{P}}_N$ ,  $\tilde{\mathbf{P}}_{M-N}$  をかけている成分は相殺される。このような項を除いて、相殺されずに残る項のみを考えると、

$$\langle g \rangle = 2\tilde{\mathbf{P}}_N^T (\mathbf{E}_N + \mathbf{\Omega}\mathbf{\Omega}^T)^{-1} \tilde{\mathbf{P}}_N - 2\tilde{\mathbf{P}}_N^T (\mathbf{E}_N + \mathbf{\Omega}\mathbf{\Omega}^T)^{-2} \tilde{\mathbf{P}}_N - 2\tilde{\mathbf{P}}_{M-N}^T \mathbf{\Omega}^T (\mathbf{E}_N + \mathbf{\Omega}\mathbf{\Omega}^T)^{-2} \mathbf{\Omega} \tilde{\mathbf{P}}_{M-N} \quad (3.19)$$

となる。 $\mathbf{\Omega}$  が  $N \times (M-N)$  行列であることをふまえて、先に証明した命題2を用いると

$$\begin{aligned} \langle g \rangle &= 2\tilde{\mathbf{P}}_N^T \mathbf{\Omega} (\mathbf{E}_{M-N} + \mathbf{\Omega}^T \mathbf{\Omega})^{-2} \mathbf{\Omega}^T \tilde{\mathbf{P}}_N - 2\tilde{\mathbf{P}}_{M-N}^T \mathbf{\Omega}^T (\mathbf{E}_N + \mathbf{\Omega}\mathbf{\Omega}^T)^{-2} \mathbf{\Omega} \tilde{\mathbf{P}}_{M-N} \\ &= 2 \left( \left\| (\mathbf{E}_{M-N} + \mathbf{\Omega}^T \mathbf{\Omega})^{-1} \mathbf{\Omega}^T \tilde{\mathbf{P}}_N \right\|^2 - \left\| (\mathbf{E}_N + \mathbf{\Omega}\mathbf{\Omega}^T)^{-1} \mathbf{\Omega} \tilde{\mathbf{P}}_{M-N} \right\|^2 \right) \end{aligned} \quad (3.20)$$

を得る。

$\mathbf{\Omega}$  の特異値を  $\sigma_{\Omega,n}$  ( $1 \leq n \leq N$ ) とし、特異値分解を  $\mathbf{\Omega} = \mathbf{U}_\Omega \mathbf{\Sigma}_\Omega \mathbf{V}_\Omega^T$  と書き表すと、式(3.20)のなかの2つの逆行列は式(A.7)および式(A.11)より

$$(\mathbf{E}_N + \mathbf{\Omega}\mathbf{\Omega}^T)^{-1} = \mathbf{U}_\Omega \text{diag} \left( \frac{1}{1 + \sigma_{\Omega,1}^2}, \dots, \frac{1}{1 + \sigma_{\Omega,N}^2} \right) \mathbf{U}_\Omega^T \quad (3.21)$$

$$(\mathbf{E}_{M-N} + \mathbf{\Omega}^T \mathbf{\Omega})^{-1} = \mathbf{V}_\Omega \text{diag} \left( \frac{1}{1 + \sigma_{\Omega,1}^2}, \dots, \frac{1}{1 + \sigma_{\Omega,N}^2}, 1, \dots, 1 \right) \mathbf{V}_\Omega^T \quad (3.22)$$

となっている。波長感度特性は少なくとも高周波と同程度の絶対値の値をもつことを想定しているので、低周波側と高周波側の値の比程度の成分として持つ  $\mathbf{\Omega} = \mathbf{K}_N^{-1} \mathbf{\Lambda}$  の固有値は1と同じオーダに分布すると考えられる。また、 $\mathbf{U}_\Omega$  および  $\mathbf{V}_\Omega$  は直交行列である。したがって、逆行列の項は作用するベクトルの大きさをあまり大きく変えず、 $\langle g \rangle$  の正負は  $\|\tilde{\mathbf{P}}_N\|$  と  $\|\tilde{\mathbf{P}}_{M-N}\|$  によって大まかに決定される。 $\tilde{\mathbf{P}}_N$  は  $N$  要素、 $\tilde{\mathbf{P}}_{M-N}$  は  $(M-N)$  要素であるから、 $\tilde{\mathbf{P}}_N$  の各要素が  $\tilde{\mathbf{P}}_{M-N}$  の各要素のおよそ  $(M-N)/N$  倍より十分大きければ、 $\langle g \rangle$  は正になると考えられ、かつ大きいほどより変化量が増大する。このことは、現実的な入射スペクトルおよび波長感度特性を想定するとき、高周波側の成分がある程度の振幅で分布していたとしても、低周波側の寄与が大きいほど再構成の精度が高いという傾向を示している。また、その影響はゆるやかな入射スペクトルほど強く効き、低周波成分の減少によって再構成精度が急激に悪化することがわかる。

以上の議論は、低周波成分を減少させることによって生じる変化を考察したが、この議論は高周波成分を増加させることと同義である。 $\mathbf{K}$  を実数  $c$  倍した  $c\mathbf{K}$  を使用した場合の推定誤差は

$$\begin{aligned} e &= \left\| \left( (c\mathbf{K})^T (c\mathbf{K})(c\mathbf{K})^T \right)^{-1} (c\mathbf{K}) - \mathbf{E}_M \right\| \mathbf{W}\mathbf{P}^{\text{true}} \left\| \right. \\ &= \left\| \left( \mathbf{K}^T (\mathbf{K}\mathbf{K}^T)^{-1} \mathbf{K} - \mathbf{E}_M \right) \mathbf{W}\mathbf{P}^{\text{true}} \right\| \end{aligned} \quad (3.23)$$

となり、フーリエ係数行列  $\mathbf{K}$  は定数倍しても精度は変化しない。低周波成分を  $(1-\delta)$  倍した行列  $\mathbf{K}'$  を  $1/(1-\delta)$  倍することで、低周波成分を一定にしたまま高周波成分を  $1/(1-\delta) \approx 1+\delta$  倍にした行列を得られるので、低周波成分を減少させるときの傾向は高周波成分を増加させるときの傾向と等しい。また、 $\mathbf{K}'$  を適切に定数倍することによって、感度行列のノルムを一定にしたまま低周波成分を低め、高周波成分を高めることができる。したがって、以上の議論は実際の波長感度特性の適切性を相対的に評価するときに当てはめることができる、妥当な議論であると考えられる。

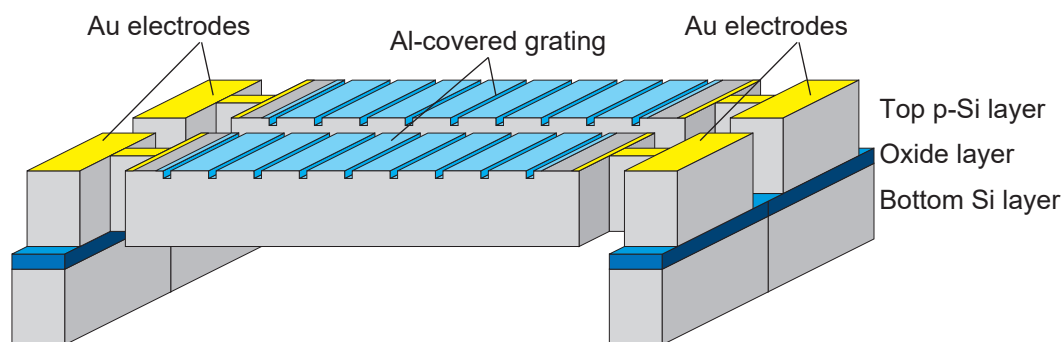


Fig. 3.13 ワンチップデバイスの概略図.

### 3.6 小型ワンチップ受光器の実装化検討

以上で検討したディテクタは、すべて1デバイス上に1つの受光器をのせた構造であったが、受光器を集積してワンチップのデバイスとして実装することは、小型分光器の実用化上で必須である。構造によっては、たとえば異なる深さのトレンチをワンチップ上に配列するような構造など、一つ一つのディテクタは個別に製作可能だが、同時にワンチップ上に製作することは困難であるということがある。そこで、ここまでの実験及び検討によって明らかにした、再構成分光が可能な一連の構造をワンチップ上に実装できるかを、試作を通じて検討した。一連の構造とは、細幅でアルミニウムで覆ったトレンチ構造を異なるピッチで配列した受光面が熱的・電氣的に互いに隔離されており、かつ読み出し回路を有する構造である。

#### 3.6.1 デバイス設計

ここでは、ワンチップで20面程度の受光面を備えたデバイスを設計した。ワンチップ化する上で、一つのチップ上に熱的に隔離された受光面を多数配置し、かつ各ディテクタに関する読み出し回路は電氣的に隔離される必要がある。そこで、各受光面を熱的に隔離するために、SOIウェハを使用して各受光面を切り離した構造のデバイスとする。SOIウェハの受光面側では、各ディテクタおよびその読み出し回路の間をDeep RIEで掘りぬくことで電氣的に絶縁する。そして、受光面部分において反対側のシリコンおよび酸化層を掘り抜き、熱的に隔離する。受光面の支持部を細くすることで、熱的隔離を強化することができる。概略図をFig. 3.13に示す。

第3.2.8項で述べたように、シリコン基板のみを使用してデバイスを構成することを考えると、デバイス層が薄く両端面が平行で、光吸収が完全でないウェハを使用する場合には、デバイス層のなかで光が干渉して必要以上に急峻な波長感度特性となるため、回折格子をつくりつけるシリコン層はある程度厚くする必要がある。今回は入射光の線幅等を考え、 $300\ \mu\text{m}$ 程度の厚さのp型シリコン層を有するSOIウェハを用いることとした。裏面は受光面等の支持を行うのみであり、厚さは特に問題とはならないが、本研究では $50\ \mu\text{m}$ のウェハを用意した。SPRの伝搬長を確保するため、各受光面は長さ1 mm以上の細長い形状とし、アルミニウムでおおわれたトレンチ構造を設置する。各トレンチ構造はトレンチ幅・ピッチ比は10%で固

本図は雑誌掲載の形での刊行(5年以内に出版予定)が予定されるため、  
非公開とする

**Fig. 3.14** ワンチップデバイスの設計.

定して、ピッチのみを変更することで異なる波長感度特性を実現する。空間的に均質な光源を確保するために、受光面の面積は3 mm 角に収まるように設計する。

本ディテクタは抵抗変化を計測するデバイスであるから、信号の読み出しにはホイートストンブリッジを用いるのが適切である。各チャンネルごとに読み出し用の配線が必要となるので、プリント基板と接続するためのチップ上には読み出し用のプリント基板にワイヤボンディングできるよう、各ディテクタから信号を引き出した電極を受光面の数用意し、加えて接地用の電極も配置する。

以上の要件を備えたデバイスとして、**Fig. 3.14** に示すようなデバイス設計とした。300  $\mu\text{m}$  の厚さのシリコン深掘りを行うと、開口幅によってエッチレートが大きく影響する。そこで、表面においてエッチングする際の開口幅は30 から 50  $\mu\text{m}$  に限定し、掘り深さが均等になるように設計してある。また、完成形の構造は細い梁を有し、外力に対して弱いので、プロセス後にダイシングをするのではなくプロセスの中でチップからデバイスが切り出されるよう、裏表からデバイスの縁をエッチングし、フッ化水素酸の酸化層エッチングにより切り離されるようにした。

チップ上には20チャンネルの回折格子受光部があり、加えて回折格子のないリファレンスを1チャンネル設けた。回折格子ピッチはChannel 1 から Channel 20 にかけて、2.43  $\mu\text{m}$  から 60 nm おきに 3.57  $\mu\text{m}$  までの20条件が振ってある。

### 3.6.2 デバイス製作

ここでは、ワンチップ分光デバイスの製作方法について述べる。大まかなプロセスフローを**Fig. 3.15** に示す。製作手順は、回折格子の受光面作製、信号読み出し用の金電極作製、受光面に相当する箇所のSOIウェハの裏面エッチング、受光面同士の回路を切り離すためのSOIウェハの表面エッチング、そして酸化層のエッチングという順である。

回折格子の受光面作製および、金電極の作製(**Fig. 3.15 1-6**)は第2.4.3項とほぼ同様である。ただし、アルミニウムのエッチングに関しては、受光面が小さくなるTMAHを用いたエッチングではなく、アルミニウムエッチャントを用いたエッチングとした。リフトオフの直前の金の蒸着は、配線が細くなることから、垂直性を十分に確保しないとリフトオフが行えない。デバイスに対してより垂直性高く蒸着されるよう、**Fig. 3.16** に示すように、タングステンボートの中央部を折り曲げて熔融金が中央部にとどまるようにし、その直上にデバイスがくるよう、チップ1枚ずつ真空蒸着を行った。金の真空蒸着を行い、リフトオフを完了させたときのデバイス表面の様子を**Fig. 3.17** に示す。アルミニウムでコーティングされた回折格子受光面と金の配線兼オーミック電極が形成されている。

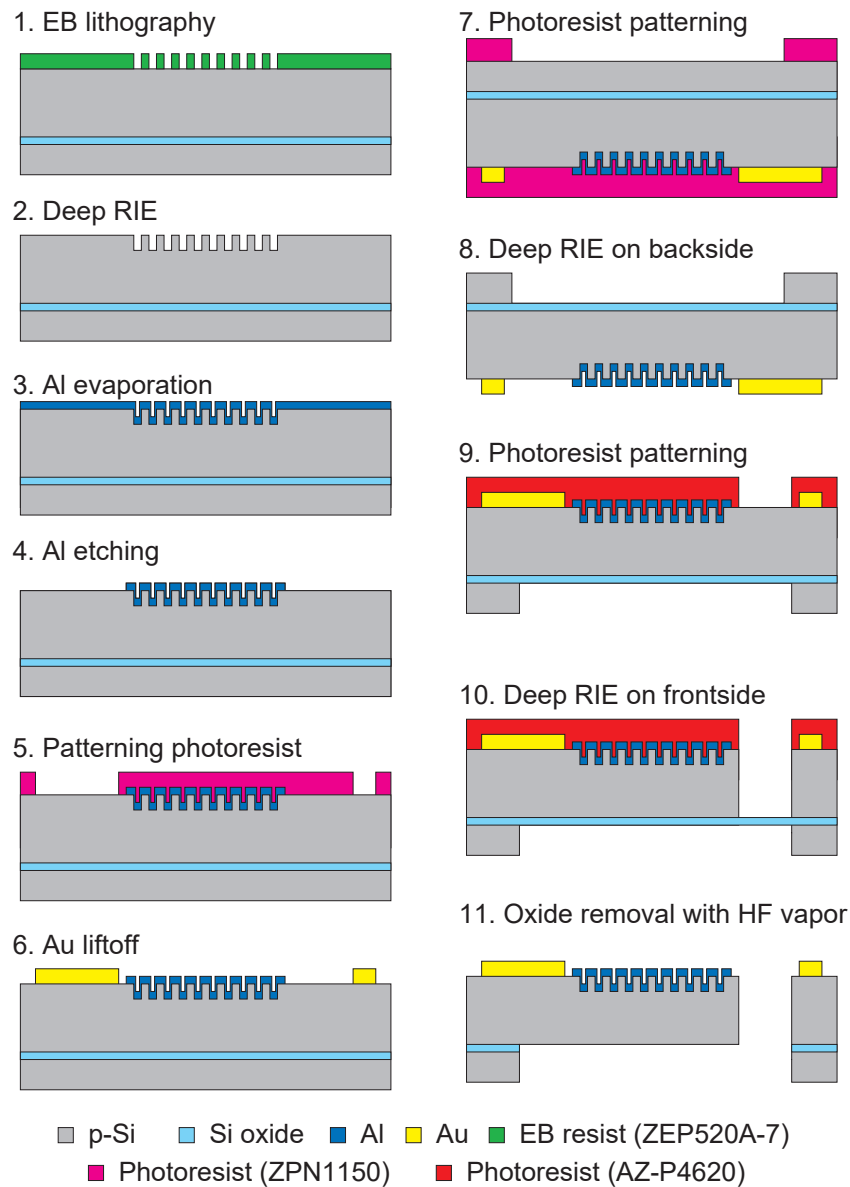
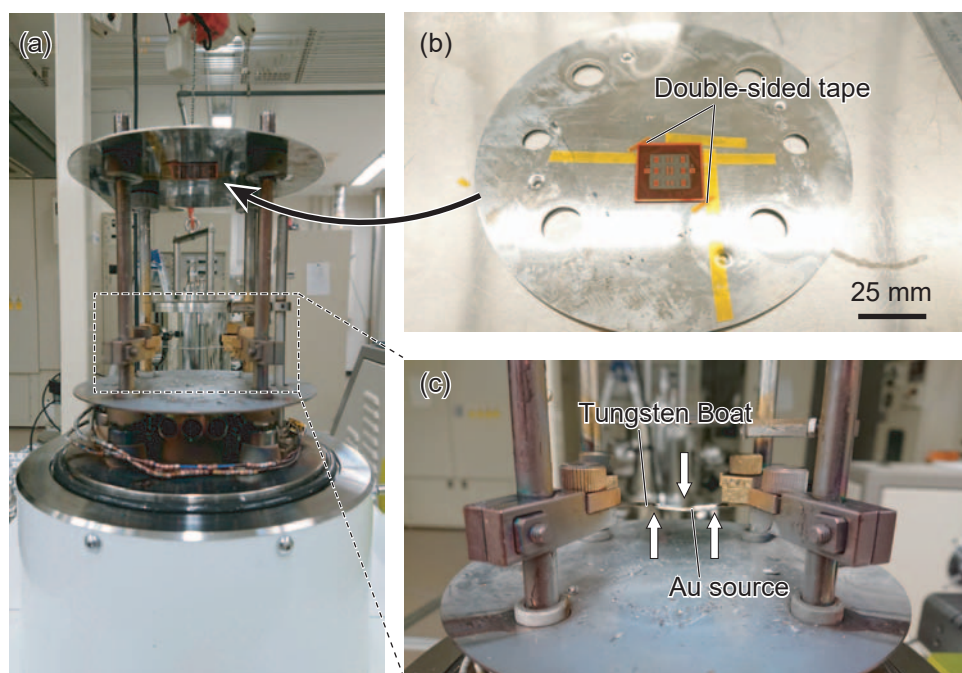


Fig. 3.15 ワンチップデバイスのプロセスフロー.

金電極および配線が完了した後に、SOI ウェハの裏面を掘る ( Fig. 3.15 7, 8). 表面からではなく裏面からエッチングを行う理由は、受光面に使用する側のシリコントップ層厚さが  $300\ \mu\text{m}$  と厚く、先にこの深さのエッチングを完了すると反対側へのレジストのスピコートが難しくなるからである. 裏面のエッチングのためにフォトレジスト (ZPN1150) を  $3000\ \text{rpm}$ ,  $30\ \text{sec}$  でスピコートして  $90\ ^\circ\text{C}$ ,  $90\ \text{sec}$  で製膜し、パターニングの際に、すでに作製済みの受光面や配線を傷つけないよう、表面にフォトレジスト (同じく ZPN1150) を予め製膜することで保護した. ZPN1150 はネガレジストなので、裏面に露光をした後に表面に全面露光をしてレジストが現像の段階で除去されないようにした.





**Fig. 3.16** 金蒸着のセットアップ. (a) 真空蒸着器内部の蒸着源とターゲットの位置関係. (b) 蒸着板上のチップ配置位置と接着方法. (c) 折り曲げたタングステンボートに金蒸着源を載せた様子.

本図は雑誌掲載の形での刊行 (5 年以内) に出版予定) が予定されるため、  
非公開とする

**Fig. 3.17** 金電極までを製作したあとのデバイス表面.

裏面のパターンニングが済んだ後に、フォトレジストの残渣を 50 W, 100 sccm の条件で 20 秒間アッシングして除去し、Deep RIE により裏面のエッチングを行った。ここで使用したレシピを **Table 3.1** に示す。100  $\mu\text{m}$  以上の広い開口幅で約 25  $\mu\text{m}/\text{分}$  のエッチレートである。50  $\mu\text{m}$  のシリコン層がなくなり、目視で酸化層が確認できるまで約 2 分でエッチングを完了した。

フォトレジストは 80  $^{\circ}\text{C}$  程度に温めた剥離液 104 に 10 分程度静置することで除去し、イソプロピルアルコールで 2 回リンスした。

表面のエッチングは深さがあるので、厚くマスキングをすることができるフォトレジスト AZ-P4620 を使用した。3000 rpm, 60 秒のスピンコート後、110  $^{\circ}\text{C}$ , 2 分のバークで約 7  $\mu\text{m}$  厚の膜を得ることができる。400  $\text{mJ}/\text{cm}^2$  の露光を行い、現像液 NMD-W で 3 分間攪拌してパターンを現像した。こちらも裏面の現像後と同様に、現像後にフォトレジストの残渣をアッシングにて除去した。

表面のエッチングに使用した Deep RIE のレシピは裏面のときと同様である。Deep RIE の際にシリコー

Table 3.1 裏面および表面のシリコンエッチングレシピ

設定		Etching (Delay)	Etching (Boost)	Passivation
時間 (sec)		2.5	6.0	2.5
ガス流量	SF <sub>6</sub>	400	400	0
(sccm)	C <sub>4</sub> F <sub>8</sub>	0	0	400
Platen LF (W)		80	20	0
Coil RF (W)		2500	2500	2500

ンオイルを用いてアルミニウム皿にチップを接着するのは第2と同様であるが、ここでのエッチングでは裏面に凹部が存在するので、気泡が入り込みやすい。気泡はチップからアルミニウム皿への熱伝達を阻害するだけでなく、Deep RIEのプロセスチャンパ内は真空であり、オイルを外に押し出して汚染の原因にもなる。そこで、アルミニウム皿にオイルを塗布してチップを接着するのではなく、チップ裏面の凹部に予めオイルを満たし、アルミ皿をチップにかぶせることで気泡のないマッチングが可能となる。

表面は裏面に比べ6倍の深さをエッチングするので、プロセス時間が長く、連続でプロセスをした場合にはデバイスがプロセスによる熱に長時間さらされることになる。高温ではプロセスガスに対するフォトレジストの耐久性が損なわれ、シリコンに対する選択比が悪化するので、10サイクル(110秒)ごとに1分程度のインターバルを挟んでプロセスを行った。合計120サイクル繰り返すことにより、300 $\mu$ mの表面シリコン層をエッチング完了した。

表面エッチングを行った後、アルミ皿ごとアセトンに1時間程度浸漬して、アルミ皿からデバイスを剥離した後、80 $^{\circ}$ Cに加熱した剥離液104に1時間浸漬してフォトレジストを除去した。チップはイソプロピルアルコールで2回リンスし、窒素ガンでブローして乾燥させた。Deep RIEで熱にさらされたレジストが残るので、これを5 sccm 50Wにて6分間アッシングし、除去した。この段階で、デバイスは酸化層のみでチップにつながっている状態であり、酸化層が割れてチップごとに分解している場合もあるが、この後に分離させるものがあるので問題ない。

この次にフッ化水素酸による酸化層の気相エッチングを行うが、表面側の金およびアルミニウムはともにフッ化水素酸の影響をうける。アルミニウムはフッ化水素酸に溶かされるほか、金はそれ自身は侵されないが、金が触媒となって金・シリコン界面でシリコンを酸化し、溶解させる<sup>[105]</sup>。したがって受光面を確実に保護する必要がある。本研究では次のようにしてフォトレジストによるマスキングが可能であることを確認した。まず、シリコンウェハなどの平坦な基板上にポジ型のフォトレジスト(OFPR-800, 東京応化工業)を1000-2000 rpmでスピコートし、レジストの溶媒が揮発する前にデバイスをレジスト上に設置する。このとき、デバイスの表面がレジストに接触する向きで、デバイスの裏面が表を向いた状態である(Fig. 3.18)。この状態でウェハごと110 $^{\circ}$ C、2分でプリバークを行い、レジストを固め、デバイスと基板を接着させる。50 W, 50 sccmで60秒程度アッシングすることでデバイスの裏面に露出した酸化層を清浄にし、表面の保護が完了する。フッ化水素酸による気相エッチングでは、酸化層のエッチングによる生成物である水がデバイス表面に残らないよう、40 $^{\circ}$ Cに加熱したホットプレート上にデバイスがのった基板を設置し、49%フッ化

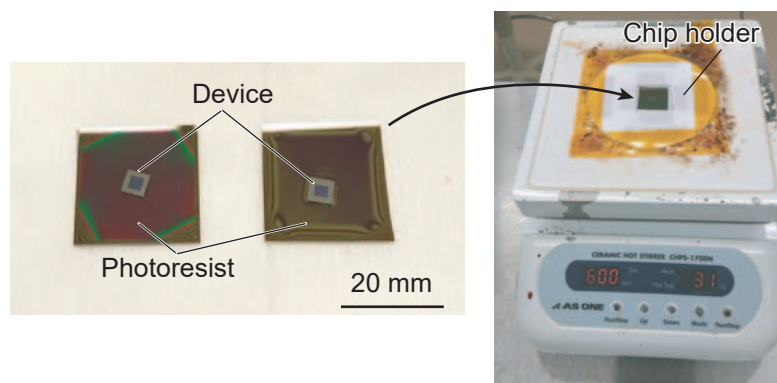


Fig. 3.18 気相フッ化水素酸エッチング用の際のセットアップ.

本図は雑誌掲載の形での刊行 (5 年以内に出版予定) が予定されるため、  
非公開とする

Fig. 3.19 深堀りシリコンエッチングの結果. (a) 表面の様子と高さプロファイル. (b,c) 酸化層エッチング後, デバイス裏面から暗視野顕微鏡で観察した様子. (c) の上半分は酸化層に接していた表面シリコン基板の高さに, 下半分は周辺のアンダーエッチ部の高さに焦点があっている.

水素酸の入ったビーカー上にデバイスを曝す. 30 秒ごとにエッチングの進行を目視で確認し, 4 分ほどで完了した.

Fig. 3.19 に深堀りシリコンエッチングの結果を示す. Fig. 3.19(a) は, 表面シリコンのエッチングが完了した後, レーザ顕微鏡にて表面の形状を観察したものである. 表面のシリコン層が  $300\ \mu\text{m}$  で, エッチングの結果受光面間の隙間や, 受光面支持部のクランク部分は  $300\ \mu\text{m}$  をこえる深さの溝が形成されているので, 十分にシリコン層をエッチングできていることがわかる. 金の受光面は中央に変色が見られるが, プロセス中の熱などにより金表面が荒れた結果である. 変色している箇所はワイヤボンディングで取り出すための電極であり, オーミック接触は回折格子に隣接する部分がメインであるので, デバイスの性能には影響しないと考えられる. Fig. 3.19 b,c は, 酸化層エッチングの後に, デバイス裏面から暗視野顕微鏡でエッチング部を観察した様子である. 表面から掘り進んだ結果, 酸化層にまでエッチングが達していることが確認できる. エッチング時間が長かったため, 酸化層と接する部分からアンダーエッチが数十  $\mu\text{m}$  進行していることが観察できる (Fig. 3.19(c)) が, 基板厚さは  $300\ \mu\text{m}$  であり構造には問題ない. 今回の試作では 9 個のデバイスを 1 枚の SOI チップ上に同時に製作したが, エッチングが確実に完了し, かつ構造が破壊されなかったものは 2 個であった.

酸化層エッチングが完了した後, アセトン中に数時間静置することで基板からデバイスを剥離させ, イソプロピルアルコールでリンスを 2 回行い, 自然乾燥によってイソプロピルアルコールを揮発させる. その

本図は雑誌掲載の形での刊行(5年以内に出版予定)が予定されるため、  
非公開とする

**Fig. 3.20** 試作したワンチップデバイス全体と (a) およびチップ部分 (b).

後、アッシングにより表面を清浄にし、プリント基板にエポキシ樹脂で接着・ワイヤボンディングし、プロセスを完了した。

**Fig. 3.20** は、以上の手順で試作したデバイスである。このデバイスでは、表面のアルミニウム膜に汚損があった。金属の蒸着の段階において金属膜に若干の汚損がみられており、フッ酸による酸化層エッチングでさらに汚損が悪化した。前者はウェハの洗浄不足、後者はレジストのコンタミネーションにより表面のマスキングが不十分であったことと、ホットプレートの加熱が不十分であったことが原因と考えられるが、これらの手順には確立されたプロセスが存在しており、デバイスのプロセス可能性を否定するものではないと考えられる。

### **3.6.3 試作したワンチップデバイスの評価**

本項は雑誌掲載の形での刊行(5年以内に出版予定)が予定されるため、  
非公開とする

## **3.7 デバイス評価の総括**

---

本項は雑誌掲載の形での刊行(5年以内に出版予定)が予定されるため、  
非公開とする

## 第4章 結論

### 4.1 本研究の結論

本研究では、以下を明らかにすることによって、再構成分光法に適した急峻かつ高ダイナミックレンジな波長感度特性を実現する中赤外ディテクタの受光面構造を示し、この受光面を用いて分光器を構成することが可能であることを示した。

再構成分光に適した波長感度特性の条件は次の2項目である。第一に、再構成分光を行う上で適した波長感度特性の急峻さとは、波長感度特性を計測波長領域のなかで振動する三角関数の和に分解したとき、(ディテクタの個数-1)/2倍振動の成分まで十分大きな係数を有することと、それを超える高次の振動成分が少ないことである。前者は再構成の計測ノイズに対する耐性に寄与し、後者は再構成の精度に関係する。このことは、仮想の波長感度特性とローパスフィルタを用いた数値実験によって確認された。第二に、最大感度に対して最小感度が小さい、すなわちオフセットが小さく高ダイナミックレンジな波長感度特性が適切である。高ダイナミックレンジとすることにより再構成の計測ノイズ耐性を高めることができる。以上の条件は、半整数倍のコサインカーブを基底に用いて波長感度特性をフーリエ変換することにより示された。先行研究<sup>[51, 56, 57]</sup>において述べられていた、波長感度特性のランダムさが分光性能に寄与するという分光器の設計指針を修正するものである。

種々の化学物質の弁別に有用な  $2.5\ \mu\text{m}$  から  $3.7\ \mu\text{m}$  の中赤外領域において、20個の受光面を用いて再構成分光を行うとき、幅が回折格子ピッチの12.5%程度、深さ500 nm程度の細幅なトレンチからなる、50 nm厚のアルミニウムで覆われたp型シリコン上の1次元回折格子を用いることで、適切な波長感度特性を実現できる。このとき、トレンチ構造を配置するピッチを変化させることで、急峻な傾斜が現れる波長を任意に設定できる。傾斜の立ち上がり波長は回折格子ピッチに一致し、ピッチによって傾斜は変化せず、長波長においても急峻さを保った波長感度特性を得ることができる。これにより、ピッチのみをパラメータとした同一設計の受光面を用いて再構成分光に必要なディテクタセットとすることができる。以上のことは、細幅のトレンチを繰り返し構造とし、アルミニウムの連続膜で覆ったシリコン回折格子に関して、トレンチ構造のパラメータを変化させたデバイスを実際に製作・計測し、上述の適切な波長感度特性の条件に基づいて評価することで明らかになった。また、ディテクタ設計に関わる次の知見を得た。(1)アルミニウムの膜厚は50 nm程度以上あればよく、これより薄いとオフセットが増加して性能が低下する。(2)アルミニウム薄膜とp型シリコン基板でデバイスを構成する上で、p型シリコン基板のドーピング濃度は高いほうがよいが、大きく影響しない。また、n型シリコン基板と銅薄膜を用いても急峻な波長感度特性を得ることができる。(3)ディテクタへの入射角は0度すなわち垂直入射が最適である。(4)入射光はシリコン基板に直接照射され

ることで波長感度特性が損なわれるので、極力アルミニウム連続膜で覆うことが好ましい。

上述のトレンチ構造を用いて、再構成分光を行うことが可能である。幅が回折格子ピッチの10%、深さ500 nmのトレンチ構造に50 nmの膜厚のアルミニウムでコーティングした回折格子で、ピッチを2.43  $\mu\text{m}$ から3.57  $\mu\text{m}$ まで60 nm間隔の20条件としたデバイスの実際の波長感度特性を用いて、標準偏差50 nm以上のガウス分布を約80%の精度で再構成でき、計測ノイズの影響を先行研究<sup>[8]</sup>の9.4倍抑制できることを、数値検証により示した。また、実際の波長感度特性からダイナミックレンジを低減したもの、および波長方向に引き伸ばして傾斜をなまらせたものと比較することで、実際の波長感度特性において適切な急峻さとダイナミックレンジが実現されていることを確認した。実測の波長感度特性を用いると、単色光を全幅半値幅68 nmで再構成でき、かつ80 nmはなれた2波長の光を弁別できる。以上の設計に基づけば、ピッチのみをパラメータとすることで再構成分光に適したディテクタのセットを作製できるので、複数のディテクタを同一基板上に実装することも容易である。本研究では実際に提案した回折格子構造がワンチップ上に集積可能であることを、プロセス方法の一例とともに示した。

本研究の中赤外ディテクタは、中赤外光を回折格子上にたつSPRを利用して吸収し、熱に変換してデバイスの温度を変化させることにより信号を得るデバイスである。したがって、すでに技術的に成熟が進み実用化に達している熱型中赤外ディテクタの技術を取り入れることが容易であると考えられ、システムとしての小型化を含めた今後の応用展開に親和性のあるデバイスであるといえる。また、本研究の中赤外ディテクタは、シリコン、アルミニウム、金のみで構成されており、シンプルな製作工程およびプロセスの容易な素材のみを用いているので、量産にも適した構造である。さらに、空間伝搬光を直接受光するディテクタであり、利用が簡便で、可動部がなく堅牢さにおいて有利な構成であると考えられる。

以上から、再構成分光にもとづく小型分光器として実用的な中赤外ディテクタの構成方法が本研究により示唆できたものとする。

## 4.2 今後の展望

---

本研究では、波長感度特性の急峻さを十分に確保するため、SPRの伝搬長と同程度の回折格子を設けたデバイスを検証したが、応用の用途によって求められる分光器の大きさ、構成が変わる。本研究で検討したデバイスはサブセンチメートルオーダーのデバイスでそのプロセス可能性を示したが、より小型化が求められ、回折格子部の長さを短くする必要がある分光器の需要もある。たとえば、小型化に特化した分光器では細胞の各点において組成を判断するための分光を行う需要があり、そのために分光機能の小型化に特化した、化合物半導体を用いたシングルナノワイヤ型分光器<sup>[45]</sup>が提案されている。本研究で示した回折格子構造を用いて、さらなる小型化を目指す場合には、伝搬長を短くした際の波長感度特性に関する検証が行われるべきである。一般に伝搬長が短くなるにつれてSPRの反射スペクトルのディップは鈍るので、波長感度特性の急峻さもデバイスサイズとトレードオフの関係にあると考えられる。要求されるデバイスのサイズと計測精度、波長分解能によって最適化されるべきである。

本研究の中赤外ディテクタは温度による抵抗変化をもたらす材質としてシリコンを用いている。構成はシンプルであるが、応答感度に関しては改善の余地がある。温度による抵抗変化が大きい素材として、酸化バナジウムやアモルファスシリコンなどがすでに中赤外ディテクタとして使用されていることは本論文

の冒頭に述べたとおりであり、これらの素材を用いてデバイスを構成すればより弱い光で動作する分光器とすることができると考えられる。また、今回アルミニウムと p 型シリコンの間の Schottky 接合は電流を流す用途では使用しなかったが、大きな逆バイアス電圧のもとでは温度により電流が大きく変化するので、電流読み出し用のオーミック接触の一方を回折格子から連続的につながったアルミニウムとし、Schottky 接合を流れる電流の温度依存性を利用したデバイスも考えられる<sup>[106]</sup>。本研究のデバイスにおいて回折格子は単純に熱を生じるだけの素子であるから、温度変化を捉える方法であれば他の方法も使用できる。

受光面をワンチップ上に集積したデバイスの信号を読み出す方法として、本研究では光をオン・オフしたときの受光面温度に依存した抵抗率変化をブリッジ回路で読みだしたが、ディテクタ間の温度差を生じないデバイス構成も考えられる。受光面を予め常温より高い温度にしておき、受光による発熱の分をネガティブフィードバックして温度を一定に保つようにして、そのときのフィードバックの大きさを信号として取り出すボロメータの構成法が提案されている<sup>[107]</sup>。この方法を用いれば、真空パッケージを用いずとも、受光面間の相関を下げるデバイス構成が可能と考えられる。

中赤外ディテクタに入射する光をミラーなどを用いて空間的に走査すれば、空間的な分光も可能であると考えられる。MEMS プロセスで製作された可動ミラーを動かして単画素イメージングを行う研究があり<sup>[108, 109]</sup>、同様に小型のミラーと統合したデバイスとすれば、空間的に分光を行うハイパースペクトルイメージングが構成できると考えられる。

本研究の中赤外ディテクタは中赤外小型分光器の基礎的技術であり、用途に応じて他の技術と組み合わせることによって、本論文の冒頭に述べた様々な応用展開が期待できると考えられる。

## 付録 A 第 3.5.4 項における数式の証明

### A.1 命題 1 の証明

$A + X = (E_N + XA^{-1})A$  より,

$$(A + X)^{-1} = A^{-1}(I + XA^{-1})^{-1} \quad (\text{A.1})$$

が成り立つ. いま  $S = \sum_{n=0}^{\infty} (-XA^{-1})^n$  を考えると,

$$\begin{aligned} S + XA^{-1}S &= \sum_{n=0}^{\infty} (-XA^{-1})^n - \sum_{n=0}^{\infty} (-XA^{-1})^{n+1} \\ &= E_N \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

となるので

$$(E_N + XA^{-1})S = E_N \quad (\text{A.3})$$

$$\therefore S = (E_N + XA^{-1})^{-1} \quad (\text{A.4})$$

したがって式 (A.3) と  $S$  の定義を式 (A.1) に代入することで式 (3.1) を得る. ■

### A.2 命題 2 の証明

$A$  は特異値分解により, 直交行列  $U_A \in \mathbb{R}^{N \times N}$  および  $V_A \in \mathbb{R}^{M \times M}$  を用いて  $U_A \Sigma_A V_A^T$  と書くことができる. ただし,

$$\Sigma_A = \begin{bmatrix} \sigma_{A,1} & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & & \mathbf{0} & & \\ & & & & & \\ & & & & & \sigma_{A,N} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{N \times M} \quad (\text{A.5})$$

であり,  $\sigma_{A,n}$  は  $A$  の特異値で非負の実数である.

特異値分解の結果を用いると,

$$\begin{aligned} E_N + AA^T &= E_N + U_A \Sigma_A V_A^T V_A \Sigma_A^T U_A^T \\ &= U_A (E_N + \Sigma_A \Sigma_A^T) U_A^T \\ &= U_A \text{diag}(1 + \sigma_{A,1}^2, \dots, 1 + \sigma_{A,N}^2) U_A^T \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

と書き表せるので,

$$(E_N + AA^T)^{-1} = U_A \text{diag}\left(\frac{1}{1 + \sigma_{A,1}^2}, \dots, \frac{1}{1 + \sigma_{A,N}^2}\right) U_A^T \quad (\text{A.7})$$





## 参考文献

- [1] 木股雅章ら. 環境の赤外線 Q&A. *日本赤外線学会誌*, 13(1):79–95, 2003.
- [2] Chee Leong Tan and Hooman Mohseni. Emerging technologies for high performance infrared detectors. *Nanophotonics*, 7(1):169–197, 2018.
- [3] Zongyin Yang, Tom Albrow-Owen, Weiwei Cai, and Tawfique Hasan. Miniaturization of optical spectrometers. *Science*, 371(6528):eabe0722, 2021.
- [4] Zongyin Yang, Tom Albrow-owen, Hanxiao Cui, Jack Alexander-webber, Fuxing Gu, Xiaomu Wang, Tien-chun Wu, Minghua Zhuge, Calum Williams, Pan Wang, Anatoly V Zayats, Weiwei Cai, Lun Dai, Stephan Hofmann, Mauro Overend, Limin Tong, Qing Yang, Zhipei Sun, and Tawfique Hasan. Single-nanowire spectrometers. *Science*, 365(6457):1017–1020, 2019.
- [5] Jasper J. Cadusch, Jiajun Meng, Benjamin Craig, and Kenneth B. Crozier. Silicon microspectrometer chip based on nanostructured fishnet photodetectors with tailored responsivities and machine learning. *Optica*, 6(9):1171–1177, 2019.
- [6] Jiajun Meng, Jasper J. Cadusch, and Kenneth B. Crozier. Detector-only spectrometer based on structurally colored silicon nanowires and a reconstruction algorithm. *Nano Letters*, 20(1):320–328, 2020.
- [7] Shaofan Yuan, Doron Naveh, Kenji Watanabe, Takashi Taniguchi, and Fengnian Xia. A wavelength-scale black phosphorus spectrometer. *Nature Photonics*, 15:601–607, aug 2021.
- [8] Benjamin Cerjan and Naomi J. Halas. Toward a Nanophotonic Nose: A Compressive Sensing-Enhanced, Optoelectronic Mid-Infrared Spectrometer. *ACS Photonics*, 6(1):79–86, 2019.
- [9] Vicente Durán. On-chip ultra-compact solution. *Nature Photonics*, 15:553–554, 2021.
- [10] Benjamin Craig, Vivek Raj Shrestha, Jiajun Meng, Jasper J. Cadusch, and Kenneth B. Crozier. Experimental demonstration of infrared spectral reconstruction using plasmonic metasurfaces. *Optics Letters*, 43(18):4481–4484, 2018.
- [11] Umpei Kurokawa, Byung Il Choi, and Cheng Chun Chang. Filter-based miniature spectrometers: Spectrum reconstruction using adaptive regularization. *IEEE Sensors Journal*, 11(7):1556–1563, 2011.
- [12] Jasper J. Cadusch, Jiajun Meng, Benjamin J. Craig, Vivek Raj Shrestha, and Kenneth B. Crozier. Visible to long-wave infrared chip-scale spectrometers based on photodetectors with tailored responsivities and multispectral filters. *Nanophotonics*, 9(10):3197–3208, 2020.
- [13] Christina P. Bacon, Yvette Mattley, and Ronald DeFrece. Miniature spectroscopic instrumentation: Applications to biology and chemistry. *Review of Scientific Instruments*, 75(1):1–16, 2004.
- [14] Andreas Burkart, Sergio Cogliati, Anke Schickling, and Uwe Rascher. A novel UAV-Based ultra-light weight spectrometer for field spectroscopy. *IEEE Sensors Journal*, 14(1):62–67, 2014.
- [15] S. K. Von Bueren, A. Burkart, A. Hueni, U. Rascher, M. P. Tuohy, and I. J. Yule. Deploying four optical UAV-based sensors over grassland: Challenges and limitations. *Biogeosciences*, 12(1):163–175, 2015.

- [16] Ana González, Jose Pozo, and Sergio Nicoletti. Mid-Infrared Chemical Sensors for Transport, Environment and Space. *Optik & Photonik*, 12(5):18–19, 2017.
- [17] Shuowen Yang, Xiang Yan, Hanlin Qin, Qingjie Zeng, Yi Liang, Henry Arguello, and Xin Yuan. Mid-infrared compressive hyperspectral imaging. *Remote Sensing*, 13(4):741, 2021.
- [18] Kuijun Wu, Zhongjie Luo, Yutao Feng, Guangbao Yu, Linmei Liu, Yuanhui Xiong, and Faquan Li. 2D visualization of hot gas based on a mid-infrared molecular Faraday imaging filter. *Optics Letters*, 43(15):3686–3689, 2018.
- [19] Lucie Leonarski, Laurent C.-Labonnote, Mathieu Compiègne, Jérôme Vidot, Anthony J. Baran, and Philippe Dubuisson. Potential of Hyperspectral Thermal Infrared Spaceborne Measurements to Retrieve Ice Cloud Physical Properties: Case Study of IASI and IASI-NG. *Remote Sensing*, 13(1):116, dec 2020.
- [20] Jingxuan Wei, Zhihao Ren, and Chengkuo Lee. Metamaterial technologies for miniaturized infrared spectroscopy: Light sources, sensors, filters, detectors, and integration. *Journal of Applied Physics*, 128(24):240901, dec 2020.
- [21] Xinyuan Chong, Erwen Li, Kenneth Squire, and Alan X. Wang. On-chip near-infrared spectroscopy of CO<sub>2</sub> using high resolution plasmonic filter array. *Applied Physics Letters*, 108(22):221106, may 2016.
- [22] Qin Chen, Li Liang, Qi Lin Zheng, Ya Xin Zhang, and Long Wen. On-chip readout plasmonic mid-IR gas sensor. *Opto-Electronic Advances*, 3(7):190040, 2020.
- [23] Yiming Ma, Yuhua Chang, Bowei Dong, Jingxuan Wei, Weixin Liu, and Chengkuo Lee. Heterogeneously Integrated Graphene/Silicon/Halide Waveguide Photodetectors toward Chip-Scale Zero-Bias Long-Wave Infrared Spectroscopic Sensing. *ACS Nano*, 15(6):10084–10094, 2021.
- [24] Jikai Xu, Zhihao Ren, Bowei Dong, Xinmiao Liu, Chenxi Wang, Yanhong Tian, and Chengkuo Lee. Nanometer-Scale Heterogeneous Interfacial Sapphire Wafer Bonding for Enabling Plasmonic-Enhanced Nanofluidic Mid-Infrared Spectroscopy. *ACS Nano*, 14(9):12159–12172, sep 2020.
- [25] Weixin Liu, Yiming Ma, Yuhua Chang, Bowei Dong, Jingxuan Wei, Zhihao Ren, and Chengkuo Lee. Suspended silicon waveguide platform with subwavelength grating metamaterial cladding for long-wave infrared sensing applications. *Nanophotonics*, 10(7):1861–1870, 2021.
- [26] Luis Rodriguez-Saona, Didem Peren Aykas, Karla Rodrigues Borba, and Alejandra Urtubia. Miniaturization of optical sensors and their potential for high-throughput screening of foods. *Current Opinion in Food Science*, 31:136–150, 2020.
- [27] Judith Müller-Maatsch, Francesca Romana Bertani, Arianna Mencattini, Annamaria Gerardino, Eugenio Martinelli, Yannick Weesepeel, and Saskia van Ruth. The spectral treasure house of miniaturized instruments for food safety, quality and authenticity applications: A perspective. *Trends in Food Science and Technology*, 110:841–848, 2021.
- [28] Anshuman Das, Tristan Swedish, Akshat Wahi, Mira Moufarrej, Marie Noland, Thomas Gurry, Edgar Aranda-Michel, Deniz Aksel, Sneha Wagh, Vijay Sadashivaiah, Xu Zhang, and Ramesh Raskar. Mobile phone based mini-spectrometer for rapid screening of skin cancer. *Next-Generation Spectroscopic Technologies VIII*, 9482:94820M, 2015.
- [29] Jayakrupakar Nallala, Marie Danièle Diebold, Cyril Gobinet, Olivier Bouché, Ganesh Dhruvananda Sockalingum, Olivier Piot, and Michel Manfait. Infrared spectral histopathology for cancer diagnosis: A novel approach for automated pattern recognition of colon adenocarcinoma. *Analyst*, 139(16):4005–4015, 2014.

- [30] Joseph J. Talghader, Anand S. Gawarikar, and Ryan P. Shea. Spectral selectivity in infrared thermal detection. *Light: Science and Applications*, 1:e24, 2012.
- [31] Yuhua Chang, Siyu Xu, Bowei Dong, Jingxuan Wei, Xianhao Le, Yiming Ma, Guangya Zhou, and Chengkuo Lee. Development of triboelectric-enabled tunable Fabry-Pérot photonic-crystal-slab filter towards wearable mid-infrared computational spectrometer. *Nano Energy*, 89:106446, nov 2021.
- [32] P. Cheben, J. H. Schmid, A. Delâge, A. Densmore, S. Janz, B. Lamontagne, J. Lapointe, E. Post, P. Waldron, and D.-X. Xu. A high-resolution silicon-on-insulator arrayed waveguide grating microspectrometer with sub-micrometer aperture waveguides. *Optics Express*, 15(5):2299–2306, 2007.
- [33] MohammadSadeh Faraji-Dana, Ehsan Arbabi, Amir Arbabi, Seyedeh Mahsa Kamali, Hyounghan Kwon, and Andrei Faraon. Compact folded metasurface spectrometer. *Nature Communications*, 9:4196, dec 2018.
- [34] Alaa Fathy, Yasser M. Sabry, Daa Khalil, and Tarik Bourouina. Differential Optical Spectrometer Based on Critical Angle Dispersion. *Journal of Lightwave Technology*, 39(9):2911–2916, 2021.
- [35] Andreas Tittl, Ann Katrin U. Michel, Martin Schäferling, Xinghui Yin, Behrad Gholipour, Long Cui, Matthias Wuttig, Thomas Taubner, Frank Neubrech, and Harald Giessen. A Switchable Mid-Infrared Plasmonic Perfect Absorber with Multispectral Thermal Imaging Capability. *Advanced Materials*, 27(31):4597–4603, 2015.
- [36] Andreas Tittl, Aleksandrs Leitis, Mingkai Liu, Filiz Yesilkoy, Duk Yong Choi, Dragomir N. Neshev, Yuri S. Kivshar, and Hatice Altug. Imaging-based molecular barcoding with pixelated dielectric metasurfaces. *Science*, 360(6393):1105–1109, 2018.
- [37] Shao-Wei Wang, Changsheng Xia, Xiaoshuang Chen, Wei Lu, Ming Li, Haiqian Wang, Weibo Zheng, and Tao Zhang. Concept of a high-resolution miniature spectrometer using an integrated filter array. *Optics Letters*, 32(6):632–634, 2007.
- [38] Artem Ivanov and Arne Kulinna. Mobile Near Infrared Spectrometer with a MEMS-FPI Sensor. In *SMSI 2021 Conference - Sensor and Measurement Science International*, pages 179–180, 2021.
- [39] Junyu Chai, Kun Zhang, Yuan Xue, Wenguang Liu, Tian Chen, Yao Lu, and Guomin Zhao. Review of mems based fourier transform spectrometers. *Micromachines*, 11(2):214, 2020.
- [40] T. Scharf, D. Briand, S. Bühler, O. Manzardo, H. P. Herzig, and N. F. de Rooij. Miniaturized Fourier transform spectrometer for gas detection in the MIR region. *Sensors and Actuators B: Chemical*, 147(1):116–121, 2010.
- [41] Amr O. Ghoname, Yasser M. Sabry, Momen Anwar, Ahmed Saeed, Bassam Saadany, and Daa Khalil. Ultra wide band MIR MEMS FTIR spectrometer. *Proc. of SPIE*, 10931:109310Z, 2019.
- [42] S. N. Zheng, J. Zou, H. Cai, J. F. Song, L. K. Chin, P. Y. Liu, Z. P. Lin, D. L. Kwong, and A. Q. Liu. Microring resonator-assisted Fourier transform spectrometer with enhanced resolution and large bandwidth in single chip solution. *Nature Communications*, 10:2349, 2019.
- [43] 浜松ホトニクス. MEMS-FPI 分光センサ. <https://www.hamamatsu.com/jp/ja/product/optical-sensors/spectrometers/mems-fpi-spectrum-sensor/index.html> (参照 2021-11-30).
- [44] Jie Bao and Mounji G. Bawendi. A colloidal quantum dot spectrometer. *Nature*, 523:67–70, jul 2015.

- [45] Tao Yang, Cao Xu, Ho-pui Ho, Yong-yuan Zhu, Xu-hao Hong, Qian-jin Wang, Yu-chao Chen, Xing-ao Li, Xin-hui Zhou, Ming-dong Yi, and Wei Huang. Miniature spectrometer based on diffraction in a dispersive hole array. *Optics Letters*, 40(13):3217–3220, 2015.
- [46] Woo Yong Jang, Zahyun Ku, Jiyeon Jeon, Jun Oh Kim, Sang Jun Lee, James Park, Michael J. Noyola, and Augustine Urbas. Experimental demonstration of adaptive infrared multispectral imaging using plasmonic filter array. *Scientific Reports*, 6:34876, 2016.
- [47] Ang Wang and Yaping Dan. Mid-infrared plasmonic multispectral filters. *Scientific Reports*, 8:11257, 2018.
- [48] Jiajun Meng, Jasper J. Cadusch, and Kenneth B. Crozier. Plasmonic Mid-Infrared Filter Array-Detector Array Chemical Classifier Based on Machine Learning. *ACS Photonics*, 8(2):648–657, 2021.
- [49] Hwa Seub Lee, Gyu Weon Hwang, Tae Yeon Seong, Jongkil Park, Jae Wook Kim, Won Mok Kim, Inho Kim, and Kyeong Seok Lee. Design of mid-infrared filter array based on plasmonic metal nanodiscs array and its application to on-chip spectrometer. *Scientific Reports*, 11:12218, 2021.
- [50] Vivek Raj Shrestha, Benjamin Craig, Jiajun Meng, James Bullock, Ali Javey, and Kenneth B. Crozier. Mid- to long-wave infrared computational spectroscopy with a graphene metasurface modulator. *Scientific Reports*, 10:5377, 2020.
- [51] J. Oliver, Woong-Bi Lee, and Heung-No Lee. Filters with random transmittance for improving resolution in filter-array-based spectrometers. *Optics Express*, 21(4):3969–3989, 2013.
- [52] Eric Huang, Qian Ma, and Zhaowei Liu. Etalon Array Reconstructive Spectrometry. *Scientific Reports*, 7:40693, 2017.
- [53] Shang Zhang, Yuhan Dong, Hongyan Fu, Shao-Lun Huang, and Lin Zhang. A Spectral Reconstruction Algorithm of Miniature Spectrometer Based on Sparse Optimization and Dictionary Learning. *Sensors*, 18(2):644, feb 2018.
- [54] Cheolsun Kim, Dongju Park, and Heung-No Lee. Compressive Sensing Spectroscopy Using a Residual Convolutional Neural Network. *Sensors*, 20(3):594, jan 2020.
- [55] Shaoda Zhang, Wu Bin, Binbin Xu, Xingyu Zheng, Binbin Chen, Xueqin Lv, Haisheng San, and Werner Hofmann. Mixed-gas CH<sub>4</sub>/CO<sub>2</sub>/CO detection based on linear variable optical filter and thermopile detector array. *Nanoscale Research Letters*, 14:348, dec 2019.
- [56] Zhu Wang and Zongfu Yu. Spectral analysis based on compressive sensing in nanophotonic structures. *Optics Express*, 22(21):25608–25614, 2014.
- [57] Zhu Wang, Soongyu Yi, Ang Chen, Ming Zhou, Ting Shan Luk, Anthony James, John Nogan, Willard Ross, Graham Joe, Alireza Shahsafi, Ken Xingze Wang, Mikhail A. Kats, and Zongfu Yu. Single-shot on-chip spectral sensors based on photonic crystal slabs. *Nature Communications*, 10:1020, dec 2019.
- [58] Shinpei Ogawa and Masafumi Kimata. Wavelength- or Polarization-Selective Thermal Infrared Detectors for Multi-Color or Polarimetric Imaging Using Plasmonics and Metamaterials. *Materials*, 10(5):493, may 2017.
- [59] Antoni Rogalski. History of infrared detectors. *Opto-Electronics Review*, 20(3):279–308, 2012.
- [60] Dieter K. Schroder, R. Noel Thomas, and John C. Swartz. Free Carrier Absorption in Silicon. *IEEE Journal of Solid-State Circuits*, SC-13(1):180–187, feb 1978.

- [61] Greffet Jean-Jacques, Remi Carminati, Karl Joulain, Jean-Philippe Mulet, Stephane Mainguy, and Yong Chen. Coherent emission of light by thermal sources. *Nature*, 416:61–64, 2002.
- [62] J. G. Fleming, S. Y. Lin, I. El-Kady, R. Biswas, and K. M. Ho. All-metallic three-dimensional photonic crystals with a large infrared bandgap. *Nature*, 417:52–55, 2002.
- [63] Thomas Maier and Hubert Brückl. Wavelength-tunable microbolometers with metamaterial absorbers. *Optics Letters*, 34(19):3012–3014, 2009.
- [64] Zhi Hao Jiang, Seokho Yun, Fatima Toor, Douglas H. Werner, and Theresa S. Mayer. Conformal Dual-Band Near-Perfectly Absorbing Mid-Infrared Metamaterial Coating. *ACS Nano*, 5(6):4641–4647, 2011.
- [65] Ya Lun Ho, Alejandro Portela, Yaeim Lee, Etsuo Maeda, Hitoshi Tabata, and Jean Jacques Delaunay. Hollow plasmonic u-cavities with high-aspect-ratio nanofins sustaining strong optical vortices for light trapping and sensing. *Advanced Optical Materials*, 2(6):522–528, 2014.
- [66] J. A. Mason, S. Smith, and D. Wasserman. Strong absorption and selective thermal emission from a midinfrared metamaterial. *Applied Physics Letters*, 98(24):241105, jun 2011.
- [67] 岡本隆之・梶川浩太郎. プラズモニクス. 講談社, 2010.
- [68] Wei Su, Gaige Zheng, and Xiangyin Li. Design of a highly sensitive surface plasmon resonance sensor using aluminum-based diffraction grating. *Optics Communications*, 285(21-22):4603–4607, oct 2012.
- [69] Xiaoliang Sun, Xuewen Shu, and Changhong Chen. Grating surface plasmon resonance sensor: angular sensitivity, metal oxidization effect of Al-based device in optimal structure. *Applied Optics*, 54(6):1548–1554, 2015.
- [70] Ankit Kumar Pandey and Anuj Kumar Sharma. Advancements in Grating Nanostructure Based Plasmonic Sensors in Last Two Decades: A Review. *IEEE Sensors Journal*, 21(11):12633–12644, 2021.
- [71] Kyung Hun Yoon, Michael L. Shuler, and Sung June Kim. Design optimization of nano-grating surface plasmon resonance sensors. *Optics Express*, 14(11):4842–4849, 2006.
- [72] Mahmoud H. Elshorbagy, Alexander Cuadrado, José Antonio Gómez-Pedrero, and Javier Alda. Opto-Electronic Refractometric Sensor Based on Surface Plasmon Resonances and the Bolometric Effect. *Applied Sciences*, 10(4):1211, feb 2020.
- [73] Wei Li and Jason G. Valentine. Harvesting the loss: Surface plasmon-based hot electron photodetection. *Nanophotonics*, 6(1):177–191, 2017.
- [74] Bob Zheng, Hangqi Zhao, Ben Cerjan, Sadegh Yazdi, Emilie Ringe, Peter Nordlander, and Naomi J. Halas. A room-temperature mid-infrared photodetector for on-chip molecular vibrational spectroscopy. *Applied Physics Letters*, 113(10):101105, sep 2018.
- [75] Shun Yasunaga and Tetsuo Kan. Narrow Trench Plasmonic Mid-Infrared Detector with Distinct Responsivity for Reconstructive Spectroscopy. *21st International Conference on Solid-State Sensors, Actuators and Microsystems, TRANSDUCERS 2021*, pages 1076–1079, 2021.
- [76] Kenichiro Hirose, Fumitaka Shiraishi, and Yoshio Mita. A simultaneous vertical and horizontal self-patterning method for deep three-dimensional microstructures. *Journal of Micromechanics and Microengineering*, 17(7):S68–S76, jul 2007.

- [77] Kenichiro Hirose, Yoshio Mita, Yoshiaki Imai, Frédéric Marty, Tarik Bourouina, Kunihiko Asada, Shuichi Sakai, Tadashi Kawazoe, and Motoichi Ohtsu. Polarization-transmissive photovoltaic film device consisting of an Si photodiode wire-grid. *Journal of Optics A: Pure and Applied Optics*, 10(4):044014, apr 2008.
- [78] Yutaka Arima. Silicon Near-Infrared Sensor Using Trench Photodiode Array. *IEEE Access*, 9:41532–41539, 2021.
- [79] Xiaoyi Liu, Jinsong Gao, Haigui Yang, Hai Liu, Xiaoyi Wang, and Zhenfeng Shen. Near-Infrared Absorption Enhancement Mechanism Investigations of Deep-Trench Silicon Microstructures Covered with Gold Films. *Plasmonics*, 11:1019–1024, aug 2016.
- [80] Keng-Te Lin, Hsuen-Li Chen, Yu-Sheng Lai, and Chen-Chieh Yu. Silicon-based broadband antenna for high responsivity and polarization-insensitive photodetection at telecommunication wavelengths. *Nature Communications*, 5:3288, may 2014.
- [81] Shun Yasunaga, Hidetoshi Takahashi, Tomoyuki Takahata, Isao Shimoyama, and Tetsuo Kan. Densely Arrayed Active Antennas Embedded in Vertical Nanoholes for Backside-Illuminated Silicon-Based Broadband Infrared Photodetection. *Advanced Materials Interfaces*, 7(21):2001039, nov 2020.
- [82] Yoshiaki Saito, Yosuke Yamamoto, Tetsuo Kan, Takuya Tsukagoshi, Kentaro Noda, and Isao Shimoyama. Electrical detection SPR sensor with grating coupled backside illumination. *Optics Express*, 27(13):17763–17770, 2019.
- [83] K. Ikeda, H. T. Miyazaki, T. Kasaya, K. Yamamoto, Y. Inoue, K. Fujimura, T. Kanakugi, M. Okada, K. Hatade, and S. Kitagawa. Controlled thermal emission of polarized infrared waves from arrayed plasmon nanocavities. *Applied Physics Letters*, 92(2):021117, jan 2008.
- [84] Bowen Liu and Zhijun Sun. Plasmon resonances in deep nanogrooves of reflective metal gratings. *Photonics and Nanostructures - Fundamentals and Applications*, 10(1):119–125, 2012.
- [85] 小國健二. 応用例で学ぶ逆問題と計測. オーム社, 2011.
- [86] William Menke. 離散インバース理論 逆問題とデータ解析. 古今書院, revised edition, 1997.
- [87] Jiri Homola, Ivo Koudela, and Sinclair S. Yee. Surface plasmon resonance sensors based on diffraction gratings and prism couplers: sensitivity comparison. *Sensors and Actuators B: Chemical*, 54(1-2):16–24, jan 1999.
- [88] Robert C. Weast, David R. Lide, Melvin Jensen Astle, William H. Beyer, H.P.R. Frederikse, Samuel M. Selby, and W.M. Haynes. *CRC handbook of chemistry and physics : a ready-reference book of chemical and physical data, 92nd ed. : 2011-2012*. 2011.
- [89] Milos Nedeljkovic, Richard Soref, and Goran Z. Mashanovich. Predictions of Free-Carrier Electroabsorption and Electrorefraction in Germanium. *IEEE Photonics Journal*, 7(3):2600214, jun 2015.
- [90] S. M. Sze and K. Ng Kwok. *Physics of Semiconductor Devices*. John Wiley & Sons, Inc., Hoboken, New Jersey, 3rd editio edition, 2007.
- [91] Jochen Meyer, Abdulhakem Y. Elezzabi, and Michael K.Y. Hughes. Infrared Absorption and Momentum Relaxation of Free Carriers in Silicon Generated by Subpicosecond Above Band Gap Radiation. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 31(4):729–734, 1995.

- [92] K. Takeda, K. Sakui, A. Taguchi, and M. Sakata. Effect of intervalence-band interaction on relaxation time and transport coefficients for holes in non-polar semiconductors. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, 16(4):729–745, 1983.
- [93] L. M. Lambert. Free carrier reflectivity in optically homogeneous silicon. *Physica Status Solidi (a)*, 11(2):461–467, jun 1972.
- [94] A. W. Simonian, A. B. Sproul, Z. Shi, and E Gauja. Observation of Fano resonance in heavily doped p-type silicon at room temperature. *Physical Review B*, 52(8):5672–5674, 1995.
- [95] Mehbuba Tanzid, Arash Ahmadvand, Runmin Zhang, Ben Cerjan, Ali Sobhani, Sadegh Yazdi, Peter Nordlander, and Naomi J. Halas. Combining Plasmonic Hot Carrier Generation with Free Carrier Absorption for High-Performance Near-Infrared Silicon-Based Photodetection. *ACS Photonics*, 5(9):3472–3477, sep 2018.
- [96] Arash Ahmadvand, Burak Gerislioglu, and Zeinab Ramezani. Generation of magnetoelectric photocurrents using toroidal resonances: a new class of infrared plasmonic photodetectors. *Nanoscale*, 11(27):13108–13116, 2019.
- [97] Simeon C. Baker-Finch, Keith R. McIntosh, Di Yan, Kean Chern Fong, and Teng C. Kho. Near-infrared free carrier absorption in heavily doped silicon. *Journal of Applied Physics*, 116(6):063106, aug 2014.
- [98] S. M. Sze. 半導体デバイス. 産業図書, second edition, 2004.
- [99] J. F. Lin, S. S. Li, L. C. Linares, and K. W. Teng. Theoretical analysis of hall factor and hall mobility in p-type silicon. *Solid State Electronics*, 24(9):827–833, 1981.
- [100] S. K. Cheung and N. W. Cheung. Extraction of Schottky diode parameters from forward current - voltage characteristics. *Applied Physics Letters*, 49(2):85–87, jul 1986.
- [101] Marc J. Madou. *Fundamentals of Microfabrication : the science of miniaturization*. CRC Press, second edition, 2002.
- [102] R. A. Haken, I. M. Baker, and J. D. E. Beynon. An investigation into the dependence of the chemically-etched edge profiles of silicon dioxide films on etchant concentration and temperature. *Thin Solid Films*, 18:S3–S6, 1973.
- [103] W.M. Bullis, F.H. Brewer, C.D. Kolstad, and L.J. Swartzendruber. Temperature coefficient of resistivity of silicon and germanium near room temperature. *Solid-State Electronics*, 11(7):639–646, jul 1968.
- [104] Takayuki Okamoto, Janne Simonen, and Satoshi Kawata. Plasmonic band gaps of structured metallic thin films evaluated for a surface plasmon laser using the coupled-wave approach. *Physical Review B*, 77(11):115425, mar 2008.
- [105] Zhipeng Huang, Nadine Geyer, Peter Werner, Johannes de Boor, and Ulrich Gösele. Metal-Assisted Chemical Etching of Silicon: A Review. *Advanced Materials*, 23(2):285–308, jan 2011.
- [106] Somnath Mahato and Joaquim Puigdollers. Temperature dependent current-voltage characteristics of Au/n-Si Schottky barrier diodes and the effect of transition metal oxides as an interface layer. *Physica B: Condensed Matter*, 530:327–335, feb 2018.
- [107] M. Denoual, D. Brouard, A. Veith, O. De Sagazan, M. Pouliquen, P. Attia, E. Lebrasseur, Y. Mita, and G. Allègre. A heat balanced sigma—delta uncooled bolometer. *Measurement Science and Technology*, 25(6):065101, jun 2014.



- [108] Marco F. Duarte, Mark A. Davenport, Dharmpal Takhar, Jason N. Laska, Ting Sun, Kevin F. Kelly, and Richard G. Baraniuk. Single-pixel imaging via compressive sampling. *IEEE Signal Processing Magazine*, 25(2):83–91, mar 2008.
- [109] Zhen Yong Shin, Horng Sheng Lin, Tong-Yuen Chai, Xin Wang, and Sing Yee Chua. Programmable Single-Pixel Imaging. In *2019 13th International Conference on Sensing Technology (ICST)*, pages 1–6. IEEE, dec 2019.

謝辞

---

謝辞

本節は個人情報に関わるため非公開とする

以上

1-91 ページ完

博士論文 (要約)

安永 竣