

# 目次

<b>第1部 序論</b> .....	4
1.1 はじめに .....	4
1.2 水素センサ .....	4
1.2.1 電氣的センサ(熱伝導率センサ) .....	4
1.2.2 電気化学(EC)センサ.....	5
1.2.3 光學的センサ .....	6
1.3 光共振器 .....	7
1.3.1 ファブリ・ペロー共振器 .....	7
1.3.2 WGM 共振器.....	7
1.3.3 フォトニック結晶共振器 .....	9
1.4 微小光共振器を利用したセンサ .....	10
1.4.1 共振波長のシフトを利用したガスセンシング.....	10
1.4.2 温度センシング .....	11
1.4.3 熱伝導率を利用したガスセンシング.....	13
1.5 本研究の目的 .....	13
<b>第2部 理論</b> .....	14
2.1 光共振器の理論.....	14
2.1.1 Q 値.....	14
2.1.2 共振波長シフト .....	15
2.1.3 シリカの光吸収による発熱.....	16
2.1.4 シリコンの二光子吸収による発熱 .....	16
2.2 シミュレーションで用いたパラメータ .....	17

第3部 シミュレーション.....	19
3.1 COMSOL の設定.....	19
3.2 シミュレーションモデル.....	19
3.3 熱解析.....	20
第4部 結果.....	22
4.1 入力光のパワーと温度変化量の関係.....	22
4.2 入力光のパワー設定.....	24
4.3 温度分布 .....	24
4.4 共振器の温度変化 .....	25
4.5 温度変化による波長シフト量.....	26
4.6 共振波長の線幅に対する波長シフト量.....	27
第5部 結論.....	29

# 第1部 序論

## 1.1 はじめに

水素ガスは、有望な次世代エネルギーとして現在注目を集めている。その理由としては、燃焼効率が高いことや燃焼時に二酸化炭素を排出しないこと等が挙げられる。しかしながら水素ガスは無色・無臭であり、また大気中における濃度が4~75%の場合爆発する危険性があるため、実用的な応用には危険を伴う。この問題の解決として期待されるのが高感度水素センサの実現である。

本研究では微小光共振器を用いた熱伝導式センサの実現に向け、複数の微小光共振器の熱解析をシミュレーションし、その性能の比較検討を行った。

## 1.2 水素センサ

水素センサとは、水素濃度を計測する装置である。水素センサは、その仕組みによって、電気的、電気化学的、光学的センサに分類される。本節ではその3つのセンサについて解説する。

### 1.2.1 電気的センサ(熱伝導率センサ)

水素ガスは既存のガスの中で最も高い熱伝導率を有している。この性質を利用したものが熱伝導率(TCD)センサである。<sup>[1]</sup> このセンサは2つの同一のセルと、それらを繋ぐホイートストンブリッジのアームにより構成されている。2つのセルには水素濃度が既知である参照ガスと、水素濃度が未知であるテストガスがそれぞれ流される。セルの金属要素は加熱され、流されたガスの水素濃度によりセルの温度は変化する。したがってホイートストンブリッジのアームの抵抗は水素濃度に依存することとなる。参照ガスとテストガスの水素濃度に差がある場合、二つのセルを繋ぐホイートストンブリッジのアームの抵抗値にも差が生じる。この抵抗値差はホイートストンブリッジにより測定可能であり、測定された抵抗値差をもとに水素濃度差が求められる。参照ガスの水素濃度は既知であるため、求められた水素濃度差からテストガスの水素濃度を求めることが出来る。

最新の熱伝導率センサでは設計の簡略化のため参照セルを必要としない測定法を用いている。この測定法では水素濃度0%での抵抗値を基準点に設定し、その抵抗値とテストガスを流すことにより変化した抵抗値との差によってテストガスの水素濃度を測定する。

熱伝導率センサは感度が低いという難点が存在するものの、酸素が無くても測定可能であること、中毒を起こしにくいこと、再現性・長期安定性に優れていること等の利点がある。

本研究では水素の熱伝導率の高さを利用したセンサに関するシミュレーションを行った。

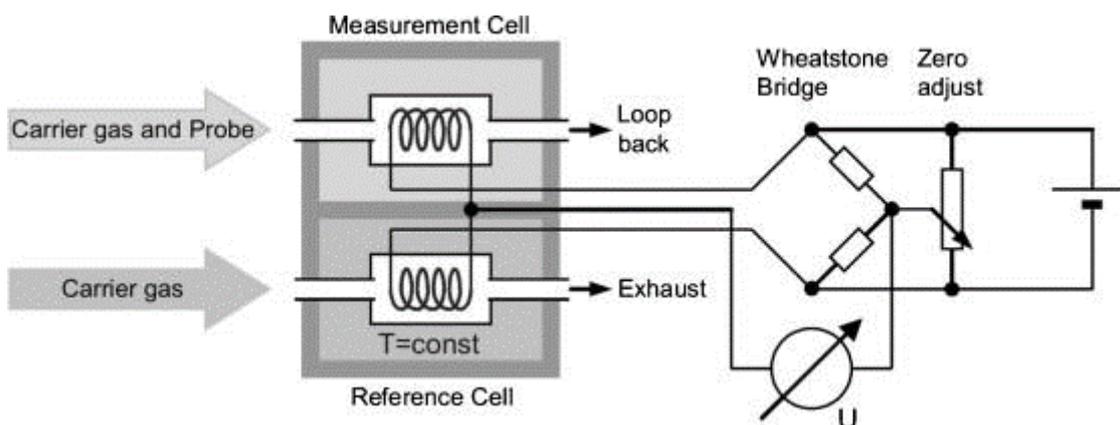


Fig. 1.1: ホイートストンブリッジを利用した熱伝導率センサの概略図 [L. B.-B. B. T. Hübert, “Hydrogen sensors – A review, “Elsevier, 2011.]

## 1.2.2 電気化学(EC)センサ

電気化学(EC)センサでは、水素が酸化還元反応する際に生じる電位差を測定することで水素濃度を計測する。<sup>[2]</sup> このセンサは白金などの触媒でコーティングされた電極(検出電極)とイオン伝導体、電位の安定した参照電極で構成される。検出電極では水素が酸化され、これが参照電極との電位差を生じさせる。この電位差は水素濃度と相関があるため、これにより水素濃度を計測する。対極での逆反応では通常酸素の還元が行われるため、このセンサが正常に動作するには酸素が必要となる。

電気化学センサは感度が高く、動作中の電力消費が非常に少ないという利点があるが、電極触媒の劣化等により時間とともに感度が下がるという難点がある。

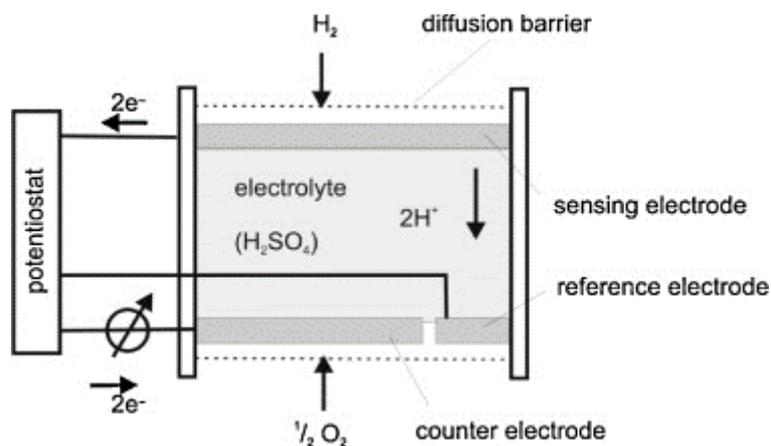


Fig. 1.2: 電気化学センサの概略図 [L. B.-B. B. B. T. Hübert, “Hydrogen sensors – A review, “Elsevier, 2011.]

### 1.2.3 光学的センサ

光学的センサでは、水素と相互作用し光学特性を変化させる材料を利用して水素濃度を計測する。光学的センサの利点としては、従来の電気ベースのセンサに比べ、電磁ノイズの影響を受けにくいこと、また使用する光信号を変化することで様々なガスセンサとして利用できる可能性があること等が挙げられ、近年注目されている。

光学的センサの一例としてマイクロミラーをあげる。これは光ファイバーの劈開端にセンシング材料の薄層がコーティングされており、水素を計測する場合にはこの材料には通常パラジウムが用いられる。パラジウム層の反射率は暴露される気体の水素濃度により変化するため、反射光の強度を観測することにより水素濃度を計測する。

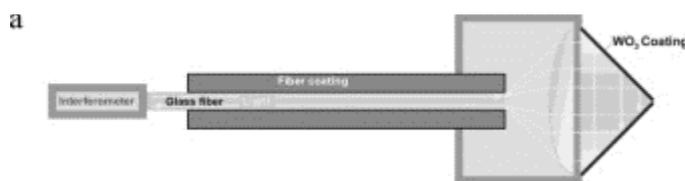


Fig. 1.3: 光学的センサの概略図[L. B.-B. B. B. T. Hübert, “Hydrogen sensors – A review, “Elsevier, 2011.]

## 1.3 光共振器

光共振器とは光を閉じ込めることのできる素子である。そのうち光を閉じ込める領域の大きさが光の波長程度以下であるものを微小光共振器と呼ぶ。

光信号処理をするためには光と物質を、物質の電気双極子を介して作用させる必要があるが、この相互作用は小さい。微小光共振器では光を小さな空間に長時間閉じ込めることが可能であるため、光と物質の相互作用を強めるのに役立つ。そのため、微小光共振器を用いることで小型デバイスによる高感度な光信号処理を可能にすることが期待されている。

光共振器の性能を表す主な数値として、モード体積( $V$ )と  $Q$  値(Quality Factor)が挙げられる。モード体積とは「光を閉じ込めることのできる空間の大きさ」を、 $Q$  値とは「光を閉じ込めることのできる時間の長さ」を表す数値である。微小光共振器にはモード体積の小さいことと高  $Q$  値であることに加えて、シリコンチップ上に集積可能であることも求められる。 $Q$  値の定義式は次の通りである。

$$Q = \omega_0 \times \frac{\text{共振器に蓄えられているエネルギー}[J]}{\text{単位時間あたりに失われるエネルギー} \left[ \frac{J}{s} \right]} = \omega_0 (\text{光子寿命}[s]) \quad (1.1)$$

光共振器はその構造により、ファブリ・ペロー共振器、ウィスパーリング・ギャラリー・モード (Whispering Gallery Mode : WGM) 共振器、フォトニック結晶共振器の 3 種類に分類される。3 種類を以下に個別に説明する。

### 1.3.1 ファブリ・ペロー共振器

ファブリ・ペロー共振器では高反射率な面状の光学素子を向かい合わせに設置し、光を繰り返し反射させることで光を閉じ込める。現状作成されているファブリ・ペロー共振器には  $Q = 1.8 \times 10^{10}$ ,  $V = 3 \text{ mm}^3$  のものや、 $Q = 4.8 \times 10^5$ ,  $V = 1690 \text{ }\mu\text{m}^3$  のもの等があるが、十分に小さく高  $Q$  値であるものはこれまで報告されていない。<sup>[3], [4]</sup>

### 1.3.2 WGM 共振器

WGM 共振器では、光を共振器の誘電体表面で全反射させ共振器に沿って周回させることで光を閉じ込める。Whispering Gallery(ささやきの回廊)という名称は、ロンドン、セントポール大聖堂にある円状回廊の壁に沿って音響波が伝わることで、離れた場所のささやき声もはっきりと聞こえる現象に因んだものである。WGM 共振器の形状はいくつかあり、単純なものとしては球状、円盤状、リング状が挙げられる。

WGM 共振器の  $Q$  値に影響する要因として、共振器と外部の屈折率差や共振器表面の

粗さ等が挙げられる。WGM共振器では全反射の繰り返しにより光が閉じ込められるため、屈折率差を大きくすることにより放射損失は小さくなるためQ値は改善される。また表面が滑らかであれば反射時の散乱が小さくなるため損失は小さくなり、Q値は改善される。

微小球やシリカトロイド、シリカボトルの作成では、CO<sub>2</sub>レーザの照射により材料を溶かし、表面張力により構造を丸めることで滑らかな表面を実現している。この作成法が利用できないCaF<sub>2</sub>などの結晶材料では、研磨や切削といった機械加工により滑らかな表面を実現している。

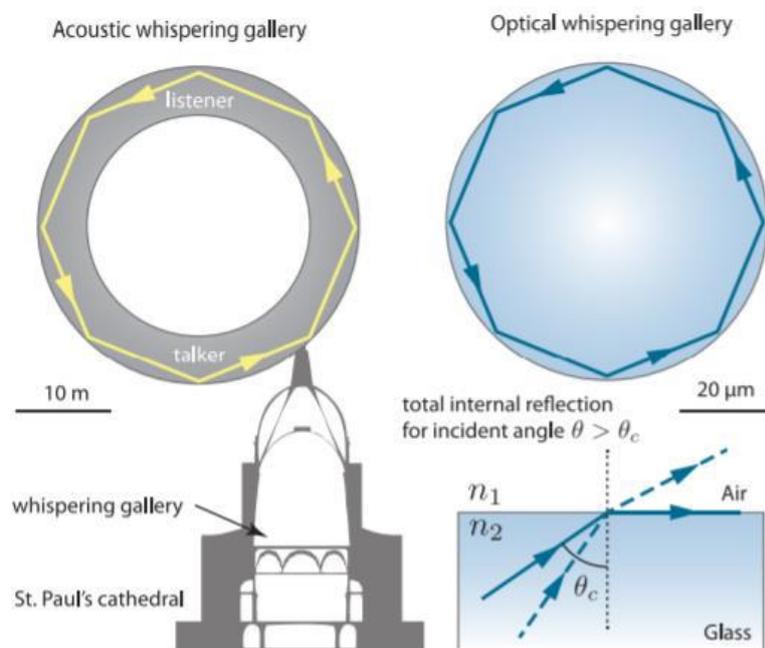


Fig. 1.4: WGM [Matthew R. Foreman, Jon D. Swaim, and Frank Vollmer, Whispering gallery mode sensors, *Advances in Optics and Photonics* Vol. 7, Issue 2, pp. 168-240 (2015)]

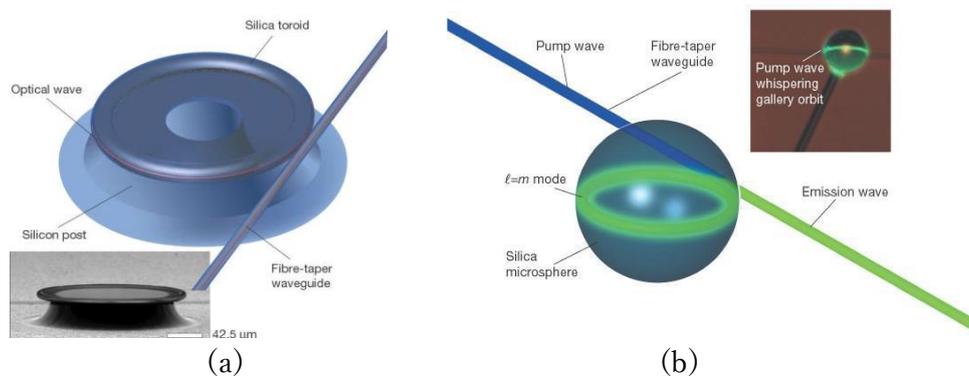


Fig. 1.5: (a) トロイド共振器. (b) 微小球共振器 [K. J. Vahala, "Optical microcavities," *Nature* 424, 839-846, 2003.]

### 1.3.3 フォトニック結晶共振器

フォトニック結晶共振器ではフォトニック結晶の構造に意図的な欠陥を作ることによって光を閉じ込める。

フォトニック結晶とは光の波長程度のオーダーで周期的な屈折率分布をもつ結晶であり、ブラッグ反射により特定の周波数域の光を伝搬不可能にする。この周波数域はフォトニックバンドギャップと呼ばれる。フォトニック結晶の例としてはシリコンなどの材料に周期的に空孔を空けたものが挙げられる。このような特性をもつフォトニック結晶に意図的に欠陥を作ることによって、光をその欠陥に閉じ込めることができる。これがフォトニック結晶共振器である。

フォトニック結晶は非常に小さいモード体積を実現できる上に、原理上では非常に高  $Q$  値が得られることも示されている。<sup>[5]</sup> さらに構造を適切に設計することでフォトニックバンドギャップを任意に設定できる。しかしながら、作成するために高精度な技術が求められるために、理論上程の  $Q$  値が得られていないという課題もある。

フォトニック結晶共振器を利用したセンサとしては、圧力センサやガスセンサが研究されている。<sup>[6],[7]</sup>

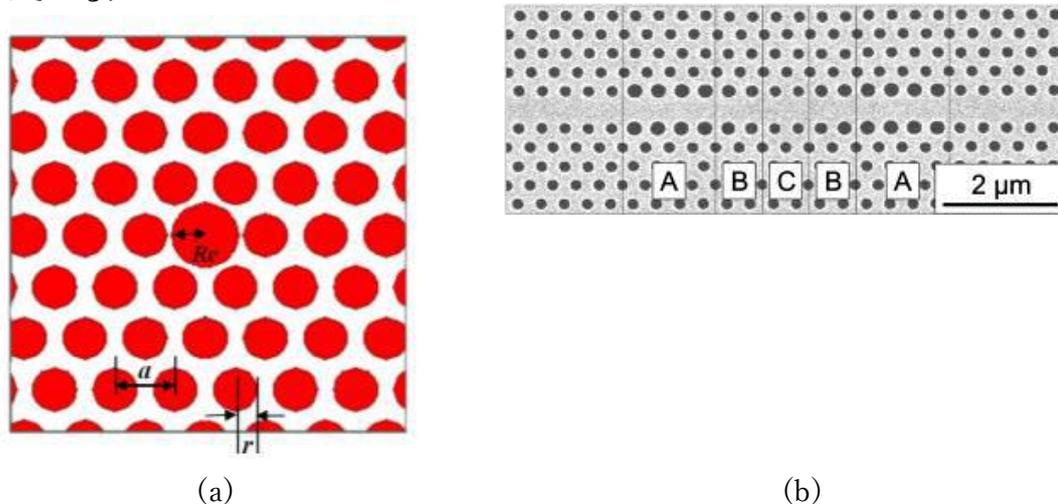


Fig. 1.6: (a)圧力センサに用いられた PhC 共振器. (b)ガスセンサに用いられた PhC. [S.O. a. A. A. Dehghani, "Nano-Pressure Sensor using High Quality Photonic Crystal Resonator," 8th International Symposium on Communication Systems, Networks & Digital Signal Processing (CSNDSP), Poznan, Poland, 2012, pp. 1-4, doi: 10.1109/CSNDSP.2012.6292729., 2012.], [T. S. S.-H. K. T. W. S. S. H. M. K. a. A. F. T. Sünner, "Photonic crystal cavity based gas sensor," Appl. Phys. Lett. 92, 261112, 2008.]

## 1.4 微小光共振器を利用したセンサ

高 Q 値の微小光共振器では、閉じ込められる光が密度は非常に高くなるため、低パワーでも非線形光学効果を起こすことが出来る。そのため非線形光学効果の研究はもちろんのこと、センシングや低閾値レーザなど様々な研究で用いられている。<sup>[8]</sup> 本節では微小光共振器を用いたセンシングについて説明する。

### 1.4.1 共振波長のシフトを利用したガスセンシング

これまでに開発された小型ガスセンサには光検出の他にも、電気化学検出、触媒検出など様々な種類のものがある。<sup>[9], [10]</sup> 中でも幅広く用いられているのは金属酸化物(MOS)半導体の抵抗値がガス吸着による変化を用いた電気化学検出式のセンサである。<sup>[11]</sup> しかしながら、MOS センサは高感度化のために高温での動作が必要な場合が多く、消費電力の高さが課題である他に、スパークの危険性があるため爆発の可能性がある環境下での動作では安全性が低いといった課題がある。<sup>[4]</sup> 光ガスセンサは室温での動作が可能であることや電氣的接続を必要としないことから、MOS センサの課題を解決できる可能性がある。光センサには光ファイバーを用いたものやシリコン・オン・インシュレーター(SOI)を用いたものなどがあるが、ここでは小型化・集積化に適した SOI を用いたセンサの説明をする。<sup>[12], [13]</sup>

Fig. 1.7 は半径5  $\mu\text{m}$  の SOI マイクロリング共振器(MRR)を用いた、室温で動作するエタノール蒸気センサを示す。<sup>[14]</sup> SOIMRR には多孔性の ZnO ナノ粒子フィルムがコーティングされており、ガス吸着のための大きな表面積を有している。このフィルムが蒸気を吸着すると屈折率が変化し、共振波長がシフトする。この共振波長シフト量はエタノールガス濃度と相関があるため、シフト量を観測することで濃度を測定することが出来る。

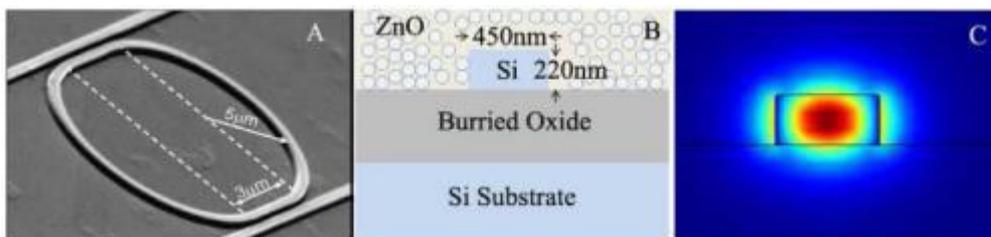


Fig. 1.7: (A)SOIMRR の走査型電子顕微鏡像. (B)SOI エタノールセンサ構造の断面図.

(C)COMSOL Multiphysics を用いたシミュレーションによる、幅 450 nm、高さ 220 nm の ZnO クラッド付き SOI 導波路の TE モード電界プロファイル. [Nebiyu A. Yebo, Petra Lommens, Zeger Hens, and Roel Baets, An integrated optic ethanol vapor sensor based on a silicon-on-insulator microring resonator coated with a porous ZnO film, Optics Express Vol. 18, Issue 11, pp. 11859-11866(2010).]

## 1.4.2 温度センシング

ここではガスセンサではなく、微小光共振器を用いた温度センサの研究を説明する。このセンサは UV 硬化型低屈折率ポリマーを使用したテーパファイバー導波路とマイクロトロイド共振器により構成されている。<sup>[15]</sup> また共振器がパッケージングされているため、高品質かつ長期的な安定性を実現している。レーザダイオードにノコギリ波を印加することでレーザ光の周波数を直線的に走査できるため、マイクロトロイド共振器の透過スペクトルを得ることが出来る。共振器の屈折率は温度に依存して変化するため、共振波長も温度に依存して変化する。したがって透過スペクトルから温度を測定することが出来る。

このシステムを無人ドローンに搭載することにより、アメリカ、セントルイス都市公園内上空の温度分布の測定ができることが実証されており、実用化に至っている。[]

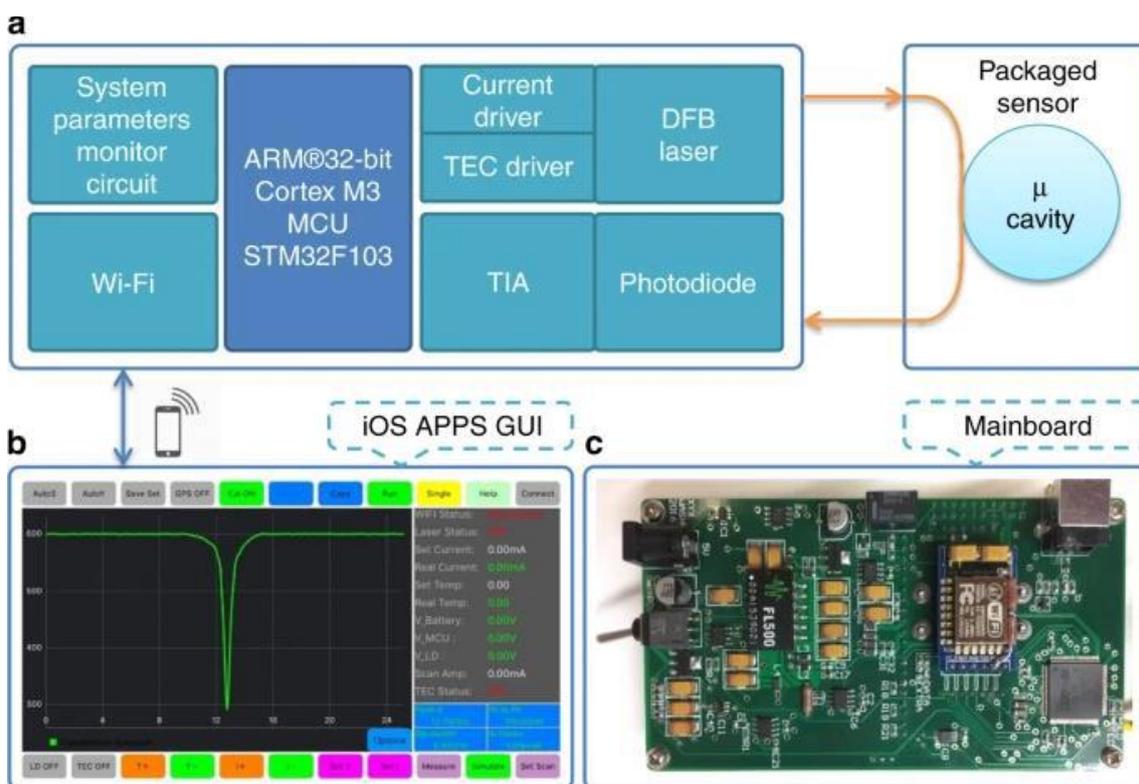


Fig. 1.8: 温度センサの構造. [Xiangyi Xu, Weijian Chen, Guangming Zhao, Yihang Li, Chenyang Lu & Lan Yang, Wireless whispering-gallery-mode sensor for thermal sensing and aerial mapping, Light: Science & Applications Volume 7, Article number: 62 (2018).]

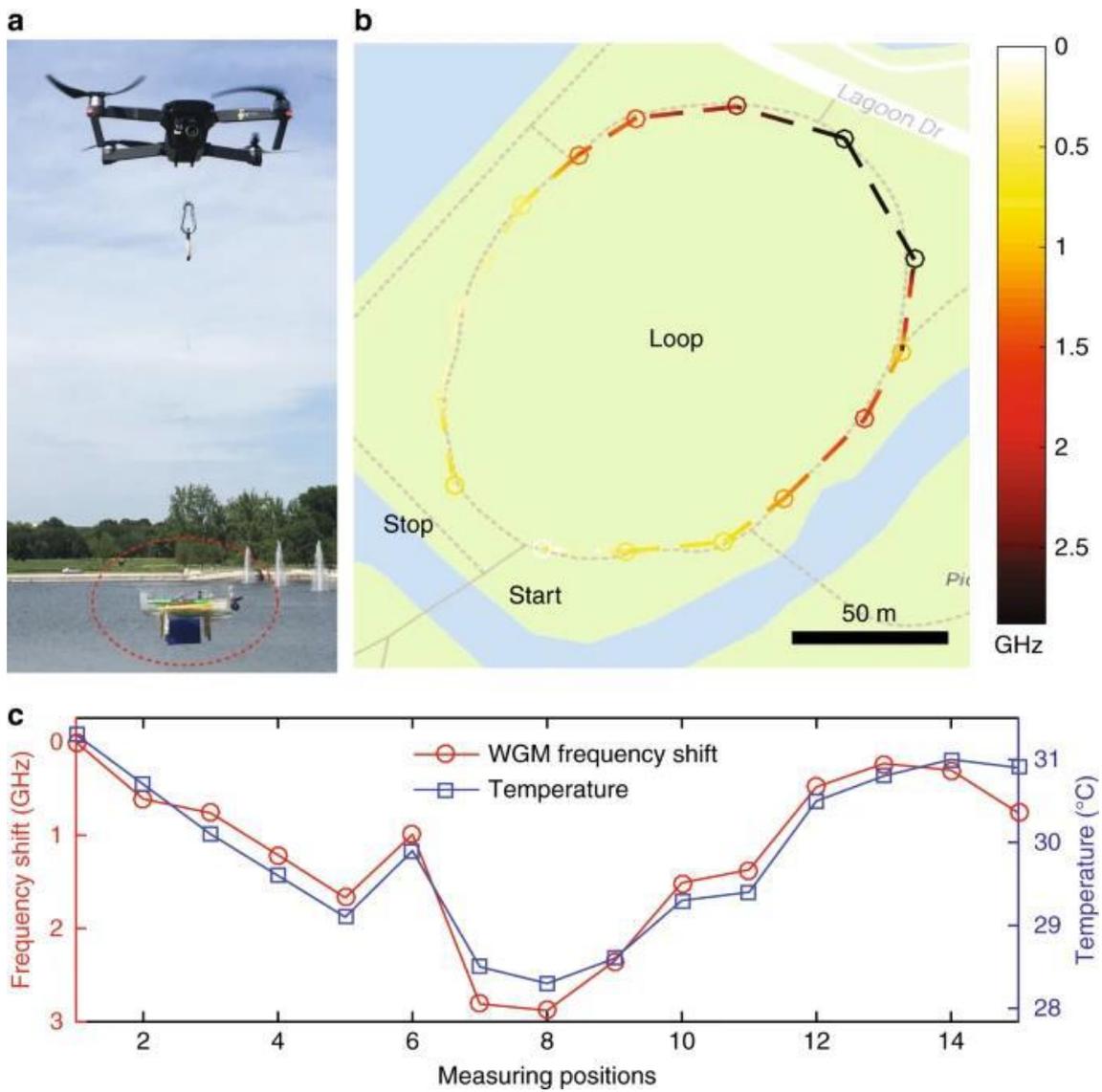


Fig. 1.9: ドローンを用いた温度マッピング. [Xiangyi Xu, Weijian Chen, Guangming Zhao, Yihang Li, Chenyang Lu & Lan Yang, Wireless whispering-gallery-mode sensor for thermal sensing and aerial mapping, Light: Science & Applications Volume 7, Article number: 62 (2018).]

### 1.4.3 熱伝導率を利用したガスセンシング

テーパ光ファイバーのテーパ部に隣接したポリスチレン製の微小球共振器からなるガスセンサを説明する.<sup>[16]</sup>

光共振器に光が入射されると光吸収により共振器の温度は上昇する. このとき周囲にあるガスの熱伝導率が大きいほど共振器から熱が逃げやすいため, 共振器の温度はガスの熱伝導率に依存することとなる. 共振器の温度が上昇すると, 屈折率の温度依存性, 及び熱膨張により共振波長がシフトし, つまりガスの熱伝導率と共振波長シフト量には相関がある. 周囲のガスを構成する成分が既知であれば伝導率からその成分の濃度を導くことが出来るため, シフト量から濃度を測定することが出来る.

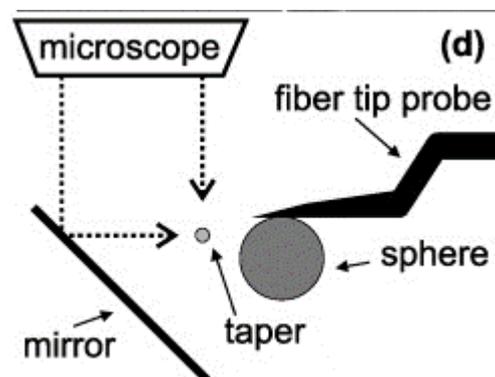


Fig. 1.10: 微小球共振器を用いたガスセンサの構造. [C. P. R. H. A. W. A. P. a. O. B. Markus Gregor, "An alignment-free fiber-coupled microsphere resonator for gas sensing applications," Appl. Phys. Lett. 96, 231102, 2010.]

## 1.5 本研究の目的

上記で紹介した従来の水素ガスセンサは電気回路が水素ガス中に露出しているため, スパークによる爆発の危険性がある. しかし, 微小光共振器を用いることで電気回路が水素ガス中に露出していない安全なセンサを作成することが出来る.

本研究ではその実現のため, いくつかの微小光共振器の水素ガスセンサとしての性能をシミュレーションにより比較し, 特に低濃度下において最適な共振器を示すことを目的とする. 使用する微小光共振器のモデルは, シリカトロイド( $\text{SiO}_2$  toroid)共振器, シリコン 1 次元フォトニック結晶( $\text{Si}$  1DPhC)共振器, シリコン 2 次元フォトニック結晶( $\text{Si}$  2DPhC)共振器, シリカ 1 次元フォトニック結晶( $\text{SiO}_2$  1DPhC)共振器, ポリスチレン微小球( $\text{PS}$  sphere)共振器の 5 種類である.

本研究では水素ガスの熱伝導率の高さを利用したガスセンシングを想定しており, 共振波長の線幅に対する波長シフトの大きさによりセンサー感度の比較を行う.

## 第2部 理論

### 2.1 光共振器の理論

#### 2.1.1 Q 値

Q 値(Quality Factor)とは共振器の光閉じ込め性能の指標であり、次の関係で定義される。<sup>[17]</sup>

$$Q = \omega \times \frac{\left[ \text{共振器に蓄えられた電磁界のエネルギー} \right]}{\left[ \text{共振器から散逸するパワー} \right]} \quad (2.1)$$

ここで、 $\omega$  は光波の角周波数である。

例として、ファブリ・ペロー型共振器の Q 値を考える。

間隔  $L$  で向かい合わせに設置された 2 枚の反射鏡を波数  $k$  の平面波が往復している場合、反射平面に対して垂直に  $z$  軸をとると内部の電界は次式で表される。

$$E(z, t) = E_0 \sin \omega t \sin kz \quad (2.2)$$

ここで、 $E_0, \omega$  はそれぞれ電界の振幅と角周波数を表している。

電界により共振器内に蓄えられる平均のエネルギーは、

$$U_{electric} = \frac{A\epsilon}{2T} \int_0^L \int_0^T E^2(z, t) dz dt \quad (2.3)$$

であり、ここで  $A, \epsilon$  はそれぞれ共振器の断面積と誘電率を、 $T = 2\pi/\omega$  は平面波の周を表している。これを整理すると、

$$U_{electric} = \frac{1}{8} \epsilon E_0^2 V \quad (2.4)$$

となる。ここで  $V = AL$  は共振器の体積を表す。磁界により共振器内に蓄えられる平均のエネルギーは電界に等しいので、共振器内の全蓄電エネルギーは次のようになる。

$$U = \frac{1}{4} \epsilon E_0^2 V \quad (2.5)$$

共振器に入射するパワーを  $P_{in}$  とする。定常状態では散逸パワーは入射パワーに等しいため、式(2.1)から共振器の Q 値は、

$$Q = \omega \times \frac{U}{P_{in}} = \frac{\omega \epsilon E_0^2 V}{4P_{in}} \quad (2.6)$$

であり、電界の振幅は、

$$E_0 = \sqrt{\frac{4QP_{in}}{\omega \epsilon V}} \quad (2.7)$$

となる。したがって電界振幅は Q 値の平方根に比例し、同じ入射パワーでも Q 値の高い共振器ほど高い強度を生じることが出来ることが分かる。

ファブリ・ペロー共振器では、共振器長  $L$  が半波長の整数倍である時、光は共振器内で

定常波を形成し閉じ込められる。このような条件を共振条件と呼ぶ。  $n$  を共振器の屈折率、  $\lambda$  を真空中での光の波長とすると共振条件は、

$$L = m \frac{\lambda}{2n}, \quad m = 1, 2, 3 \quad (2.8)$$

であり、これを満たす波長を共振周波数と呼ぶ。

式(2.8)を光の周波数  $\nu$  に関する式となるよう整理すると、  $\nu = \frac{c}{\lambda}$  なので、

$$\nu = m \frac{c}{2nL} \quad (2.9)$$

となる。ここで  $c$  は真空中における光の速度である。共振条件を満たす周波数を共振周波数と呼ぶ。式(2.9)から共振周波数の間隔は

$$\frac{c}{2\pi L} \quad (2.10)$$

であり、これは FSR(Free Spectral Range)と呼ばれる。

Q 値は  $\frac{\text{共振周波数}}{\text{線幅}}$  でも表されるので、共振周波数を  $\nu_0$ 、線幅を  $\delta\nu$  とすると、

$$\delta\nu = \frac{\nu_0}{Q} \quad (2.11)$$

であり、  $\nu = \lambda \frac{\omega}{2\pi}$  の関係から共振波長の線幅  $\delta\lambda$  は

$$\delta\lambda = \frac{\lambda_0}{Q} \quad (2.12)$$

である。

## 2.1.2 共振波長シフト

式(2.9)から分かる通り、共振波長は屈折率と共振器長に依存して変化する。この変化を共振器シフトと呼ぶ。共振器シフトが起こる要因としては、熱光学効果、熱膨張、光カー効果などが挙げられる。熱光学効果と熱膨張を考慮すると、シフト前の共振波長を  $\lambda_0$  とし、シフト後の共振波長  $\lambda_r$  は次のようになる。<sup>[18]</sup>

$$\lambda_r = \lambda_0 \left[ 1 + \frac{1}{n} \frac{dn}{dT} \Delta T_1(t) + \frac{dL}{dT} \Delta T_2(t) \right] \quad (2.13)$$

ここで、  $\Delta T_1, \Delta T_2$  はそれぞれモード部分と構造全体の温度変化であり、  $\frac{dn}{dT}, \frac{dL}{dT}$  はそれぞれ TO 係数、TE 係数と呼ばれる。

熱膨張の影響は熱光学効果に比べわずかであるため、本研究では熱光学効果のみを考慮する。したがって波長シフト量  $\Delta\lambda$  は次のとおりである。

$$\Delta\lambda = \lambda_0 \frac{1}{n} \frac{dn}{dT} \Delta T(t) \quad (2.14)$$

センシングでは共振波長の線幅に対する波長シフト量が重要であるため、

$$\Delta\lambda' = \frac{\Delta\lambda}{\delta\lambda} \quad (2.15)$$

を用いて性能の比較を行う。

### 2.1.3 シリカの光吸収による発熱

光吸収により共振器に流入する熱は,

$$q_{in} = \eta P_{in} \frac{Q}{\frac{2\pi n}{\alpha_{abs} \lambda_0} \left( \frac{\lambda_p - \lambda_r}{\Delta\lambda/2} \right)^2 + 1} \quad (2.16)$$

である.<sup>[19]</sup> ここで  $\eta$  は結合効率,  $P_{in}$  は入力光のパワー,  $\alpha_{abs}$  は吸収係数,  $\lambda_p$  は入力光の波長をそれぞれ表している.<sup>[5]</sup>

入力光の波長が共振波長に等しいと仮定すると, 式(2.16)は

$$q_{in} = \eta P_{in} Q \frac{\alpha_{abs} \lambda_0}{2\pi n} \quad (2.17)$$

と表される.

### 2.1.4 シリコンの二光子吸収による発熱

シリコンの単位長さあたりの吸収係数  $\alpha$  は次式で表される.

$$\alpha = \alpha_0 + \beta I \quad (2.18)$$

ここで,  $\alpha_0$  は線形吸収係数,  $\beta$  は二光子吸収係数,  $I$  は光パワー密度をそれぞれ表している. シリコンでは線形吸収は無視できるほど小さいため,  $\alpha_0 = 0$ .

単位時間あたりの吸収係数  $\alpha'$  は  $\alpha$  に光速をかけることで導かれる.

$$\alpha' = \alpha c = \beta I c \quad (2.19)$$

光パワー密度は光の持つ時間平均のエネルギー密度  $\frac{u}{V_{eff}}$  と光速の積なので,

$$I = \frac{u}{V_{eff}} \frac{c}{n} = \frac{u}{V_{eff}} c' \quad (2.20)$$

ここで,  $c'$  は光速度.

式(2.19), (2.20)を用いると, 単位時間あたりの光吸収エネルギーは次のように表される.

$$\alpha' u = \frac{\beta c^2}{n V_{eff}} u^2 \quad (2.21)$$

プランク定数  $h$  を用いると単一光子が持つエネルギーは  $h\nu$  で記述される. 単一光子がもつエネルギーで式(2.21)を割ることで, 単位時間あたりに吸収される光子数  $N_{photon}$  が導かれ,

$$N_{photon} = \frac{1}{h\nu} \frac{\beta c^2}{n V_{eff}} u^2 \quad (2.22)$$

である. 二光子吸収では光子2つ毎にキャリアが1つ生成されるので, 単位時間あたりに生成されるキャリア数  $N$  は  $\frac{N_{photon}}{2}$  となる. キャリア数を体積  $V$  で割ることでキャリア密度が導かれるので, 単位時間あたりに増加するキャリア密度は,

$$\frac{N}{V} = \frac{1}{2h\nu} \frac{\beta c^2}{n V_{eff} V} u^2 \quad (2.23)$$

である。

以上から、光エネルギー、キャリア密度に関するレート方程式は次のようになる。

$$\frac{du}{dt} = -\frac{1}{\tau_Q}u - \frac{\beta c^2}{nV_{eff}}u^2 + P_{in} \quad (2.24)$$

$$\frac{dN}{dt} = -\frac{1}{\tau_c}N + \frac{1}{2h\nu nV_{eff}V}\beta C^2 u^2 \quad (2.25)$$

ここで、 $\tau_Q = \frac{\lambda_Q}{2\pi c}$ は光子寿命、 $\tau_c$ はキャリア寿命を表す。

定常状態では式(2.24),(2.25)の左辺は0となり、連立方程式を解くと、

$$\frac{\beta c^2}{nV_{eff}}u^2 = P_{in} + 2 \left\{ \frac{n\pi^2 V_{eff}}{\beta \lambda_0^2 Q^2} - \sqrt{\left( \frac{n\pi^2 V_{eff}}{\beta \lambda_0^2 Q^2} \right)^2 - \frac{n\pi^2 V_{eff}}{\beta \lambda_0^2 Q^2} P_{in}} \right\} \quad (2.26)$$

が得られる。式(2.21)の右辺と式(2.26)の左辺が一致していることから、式(2.26)は単位時間あたりの光吸収エネルギーを表していることがわかる。

## 2.2 シミュレーションで用いたパラメータ

Table. 2.1, Table. 2.2, Table. 2.3 は今回のシミュレーションで用いたパラメータを示す。

Table. 2.1: 共振器の材料に関するパラメータ

パラメータ	記号	値(Si)	値(SiO2)	値(PS)	単位	参考文献
共振波長	$\lambda_0$	1550			Nm	
屈折率	$n_0$	3.48	1.45	1.578		[18], [16]
TO 係数	$dn/dT$	$1.86 \times 10^{-4}$	$1.178 \times 10^{15}$	$-1.2 \times 10^{-4}$	$K^{-1}$	[20], [21]
密度	$\rho$	$2.33 \times 10^{-15}$	$2.203 \times 10^{-15}$	$1.04 \times 10^{-15}$	$kg/\mu m^3$	[18], [22]
比熱	$C$	713.9	703	1340	$W \cdot s / (kg \cdot K)$	[18], [22]
比誘電率	$\epsilon$	12	3.8	-		[18]
熱伝導率	$\mu$	140	13.8	0.1	$W / (m \cdot K)$	[18], [22]
光速	$c$	$2.998 \times 10^8$			m/s	[18]
結合効率	$\eta$	-	80	-	%	[23]
二光子吸収係数	$\beta$	$8 \times 10^{-9}$	-	-	mm/mW	[20]
吸収係数	$\alpha_{aps}$	-	0.0368	-	/km	[24]

Table. 2.2: 熱伝導率

材料	空気	水素	Si	SiO2	PS
熱伝導率 $[W/(m \cdot K)]$	0.026	0.182	130	1.38	0.1

Table. 2.3: 共振器の性能に関するパラメータ

	SiO2 toroid	SiO2 1DPhC	Si 1DPhC	Si 2DPhC	PS sphere
Q 値	$1.0 \times 10^7$	$1.0 \times 10^5$	$1.0 \times 10^6$	$1.0 \times 10^6$	$6.0 \times 10^5$
モード体積( $\mu\text{m}^3$ )	4244	0.0643	0.0633	459	15599

## 第3部 シミュレーション

### 3.1 COMSOL の設定

光共振器の熱解析シミュレーションを COMSOL Multiphysics を用いて行った。空間次元を 3D, フィジックスを伝熱(固体), スタディタイプを定常解析とした。

### 3.2 シミュレーションモデル

本研究では 5 種類のモデルに対して熱解析を行った。Fig. 3.1 はシミュレーションに用いた SiO<sub>2</sub> 1DPhC 共振器のモデルを示す。このようにモデルは気体の入った立方体の中心に設置されている。立方体のすべての面は 300K で一定とし、初期温度は一様に 300K とした。これらの条件は他のモデルでも同様である。

Fig. 3.2 は 5 種類の共振器のモデルを示す。2DPhC は空孔間隔 420nm, 気孔半径 115.5nm, スラブ厚さ 210nm となっている。また、光が閉じ込められる領域の両側にある空孔は半径が 63nm に縮小され、元の位置から外側に 32nm シフトしている。<sup>[25]</sup> SiO<sub>2</sub> トロイドの土台の材料はシリコンであり、上部の素材はシリカである。

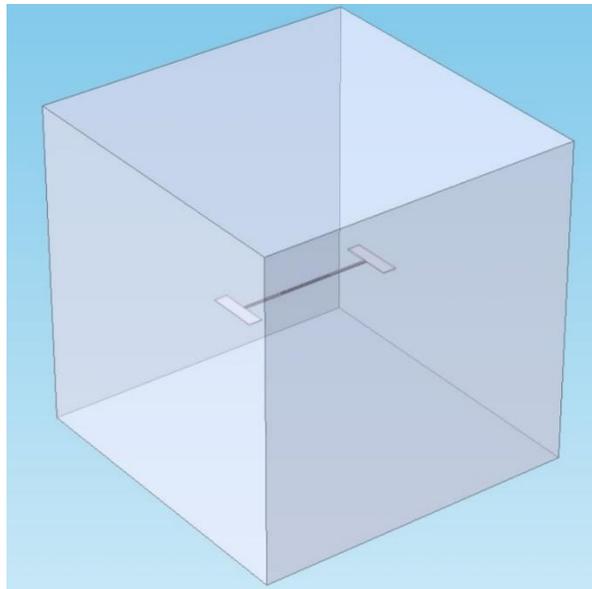


Fig. 3.1: シミュレーションモデル

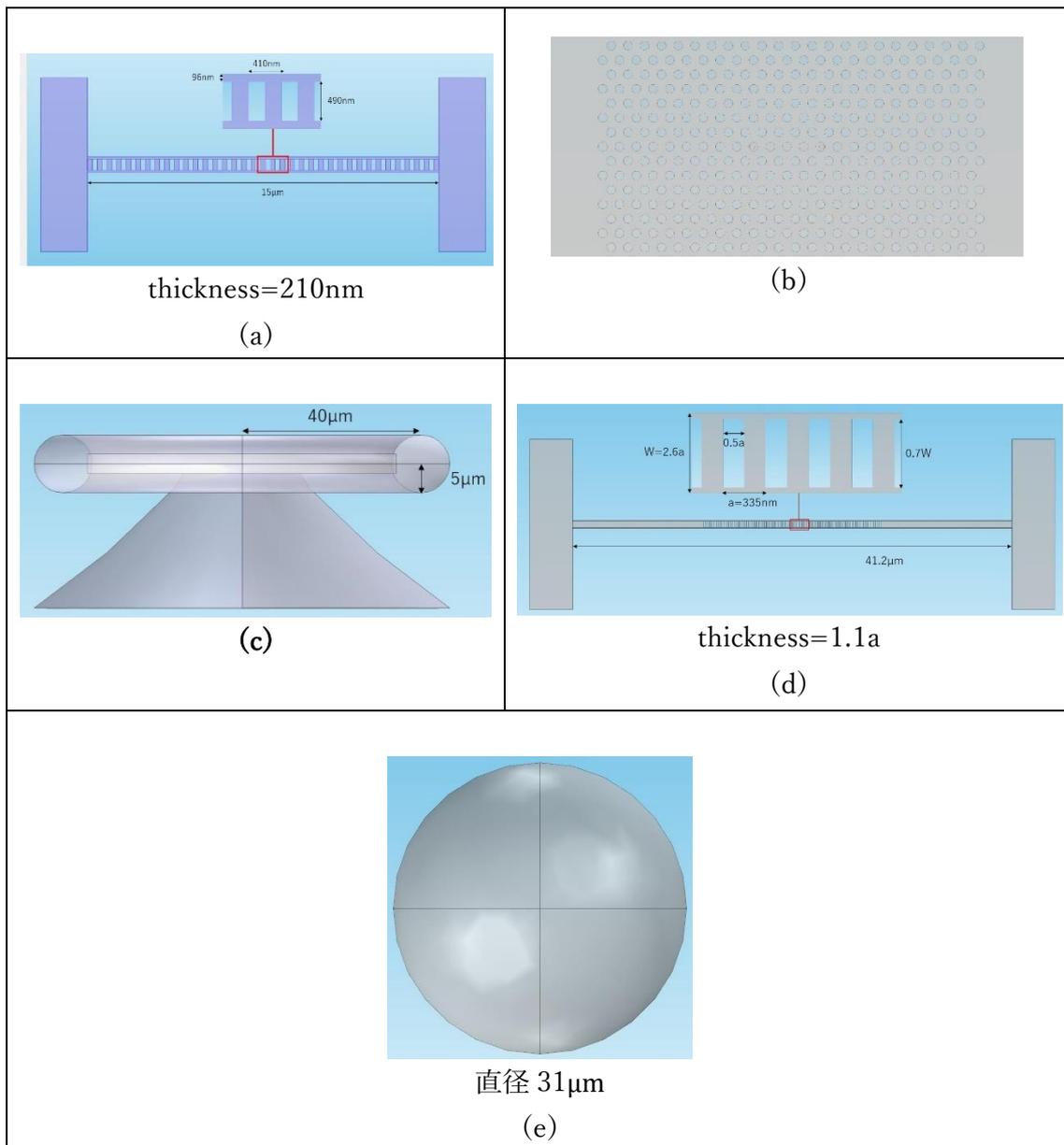


Fig. 3.2: (a)Si 1DPhC 共振器モデル. (b)Si 2DPhC 共振器モデル. (c)SiO<sub>2</sub> toroid 共振器モデル. (d)SiO<sub>2</sub> 1DPhC 共振器モデル. (e)PS sphere 共振器モデル.

### 3.3 熱解析

本研究では共振器に光を入射し続け、定常状態に達した後の共振器の温度を計測した。Fig. 3.3 の青みががかった部分は各共振器の熱源を示す。発熱量の計算は、材料がシリカである共振器では式(2.17)を、材料がシリコンである共振器では式(2.26)を用いた。材料がポリスチレンである共振器では入力光のパワーと発熱量の関係は求めるこ

とが出来なかったため、発熱量のみとなっている。

立方体内にある気体は水素と空気の混合気体に設定し、水素濃度 0~100%の範囲での熱解析を行った。

水素濃度 0%での共振器の温度を基準点に設定し、基準点と計測した温度の差を用いて式(2.14)により共振波長のシフト量を導いた。その後、式(2.12)により導かれた共振波長の線幅によりシフト量を割り、線幅に対する共振波長シフト量を導き、センサー感度の比較を行った。

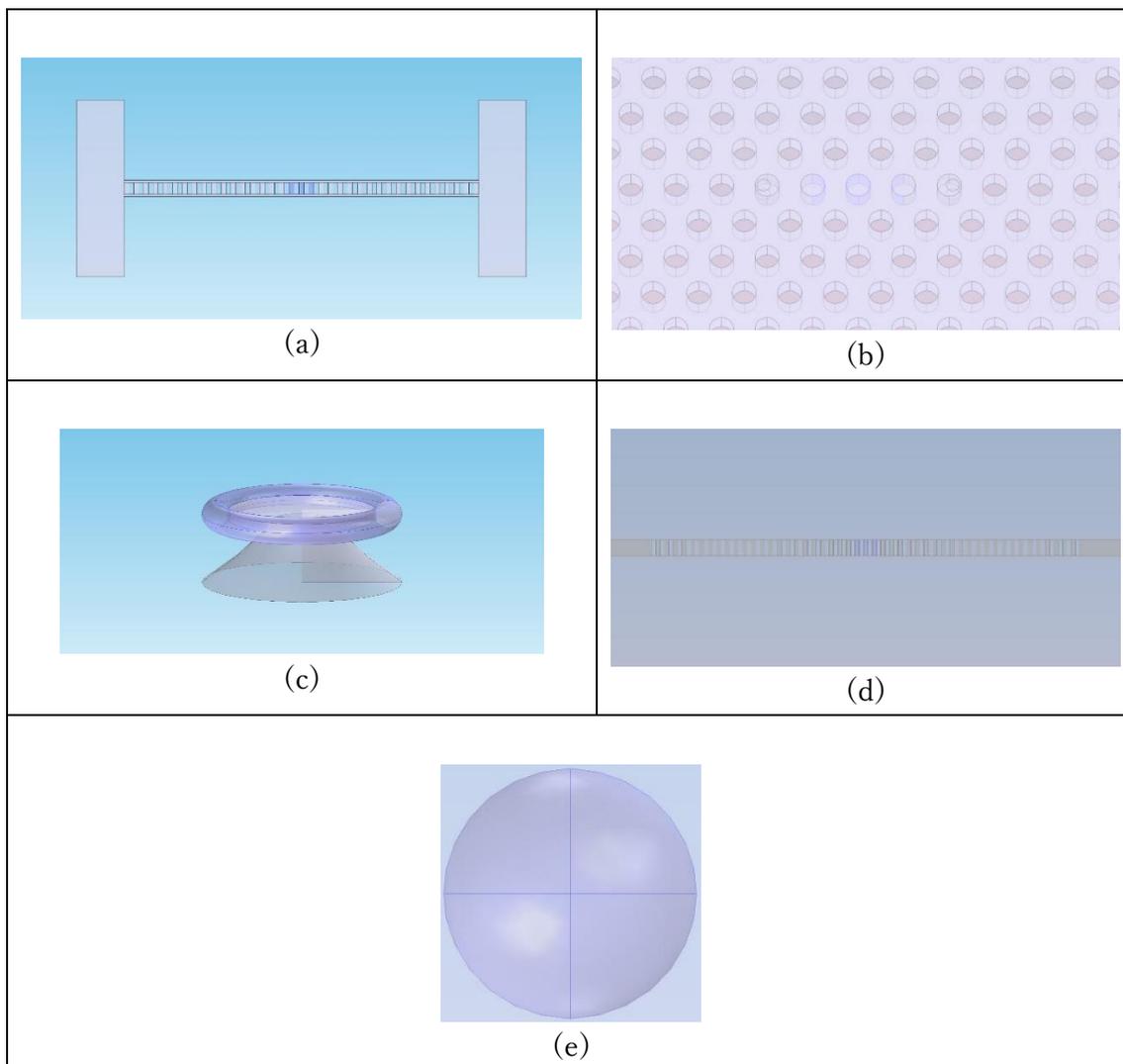


Fig. 3.3: (a)Si 1DPhC 共振器の熱源. (b)Si 2DPhC 共振器の熱源. (c)SiO<sub>2</sub> toroid 共振器の熱源. (d)SiO<sub>2</sub> 1DPhC 共振器の熱源. (e)PS sphere 共振器の熱源.

## 第4部 結果

### 4.1 入力光のパワーと温度変化量の関係

Fig. 4.1 は各共振器の水素濃度と温度変化量の関係を示す。ここで, PS sphere 共振器のみ凡例が発熱量となっており, 他の共振器の凡例は入力光のパワーである。Table. 4.1 は設定した入力光のパワーと発熱量の関係を示す。

片対数グラフにおいてグラフの概形が変化していないことから, 通常のグラフにおいても縦軸のスケールを適切に設定すれば, 発熱量に関わらずグラフの概形は同じであることが分かる。

Table. 4.1: 入力光のパワーと発熱量

入力光のパワー[mW]	0.02	0.2	2
発熱量 (Si 1DPhC) [mW]	$1.74 \times 10^{-2}$	$1.91 \times 10^{-1}$	1.97
発熱量 (Si 2DPhC) [mW]	$1.35 \times 10^{-4}$	$1.21 \times 10^{-2}$	$6.37 \times 10^{-1}$
発熱量 (SiO2 toroid) [mW]	$1.00 \times 10^{-6}$	$1.00 \times 10^{-5}$	$1.00 \times 10^{-4}$
発熱量 (SiO2 1DPhC) [mW]	$1.00 \times 10^{-8}$	$1.00 \times 10^{-7}$	$1.00 \times 10^{-6}$

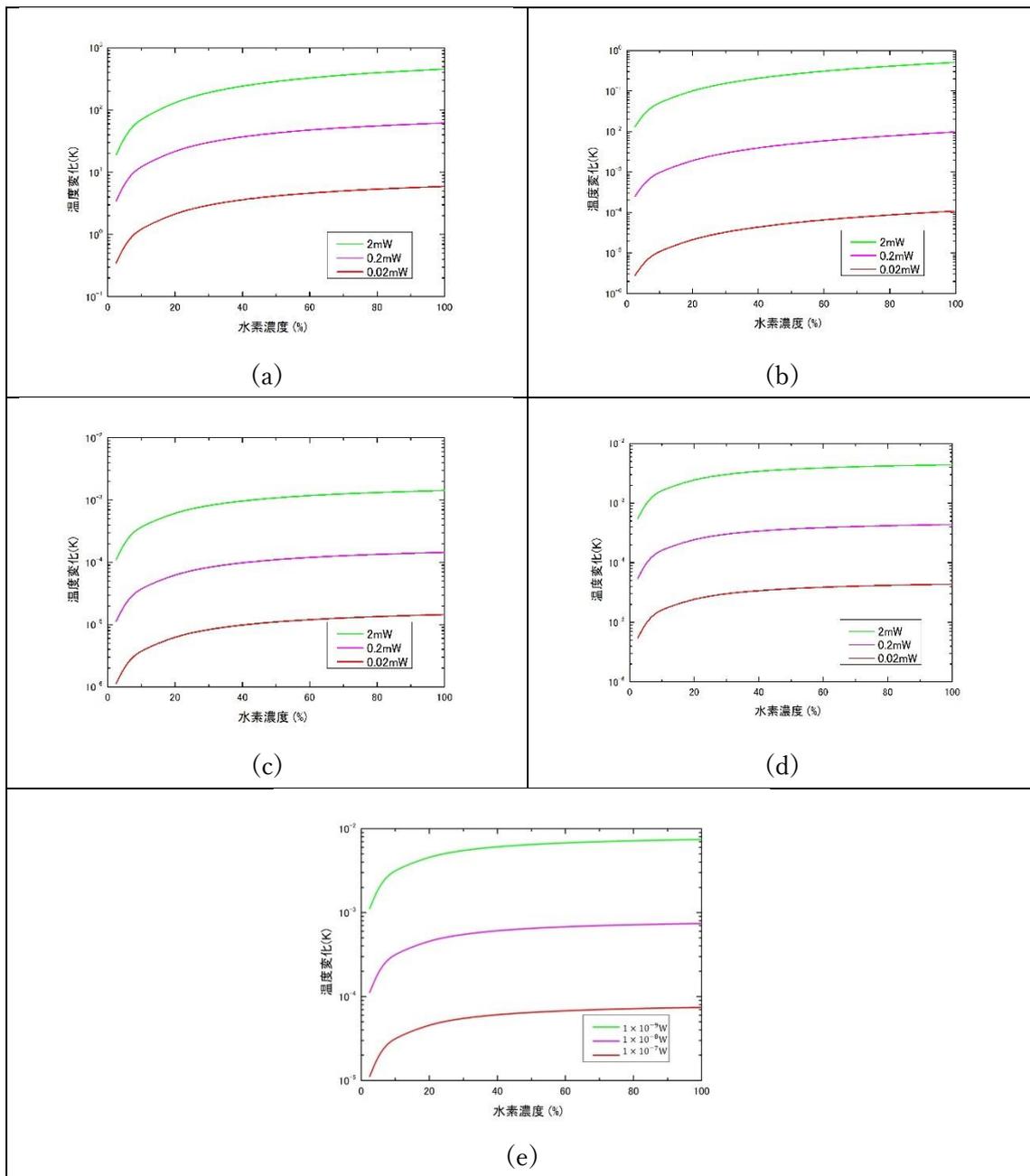


Fig. 4.1: 定常状態における(a)Si 1DPhC 共振器の温度変化量. (b)Si 2DPhC 共振器の温度変化量. (c)SiO<sub>2</sub> toroid 共振器の温度変化量. (d)SiO<sub>2</sub> 1DPhC 共振器の温度変化量. (e)PS sphere 共振器の温度変化量.

## 4.2 入力光のパワー設定

各共振器の水素濃度 100%における線幅に対する共振波長シフト量がほぼ同じになるような条件でシミュレーションを行った. Table. 4.2 は各共振器への入力光のパワーと, そのときの発熱量を示す.

Table. 4.2:入力光のパワーと発熱量

	SiO2 toroid	SiO2 1DPhC	Si 1DPhC	Si 2DPhC	PS
入力光のパワー	4.3W	210 W	24 $\mu$ W	0.01 W	
発熱量( $\mu$ W)	215	105	21.1	5860	73.7

## 4.3 温度分布

Fig. 4.2 は水素濃度 0%の場合における, 定常状態での各共振器の温度分布を示す. Si 2DPhC は横から見た図になっている.

空気中にも熱が伝わっていることから, 周囲の気体の熱伝導率が共振器の温度分布にも影響を与えることがわかる.

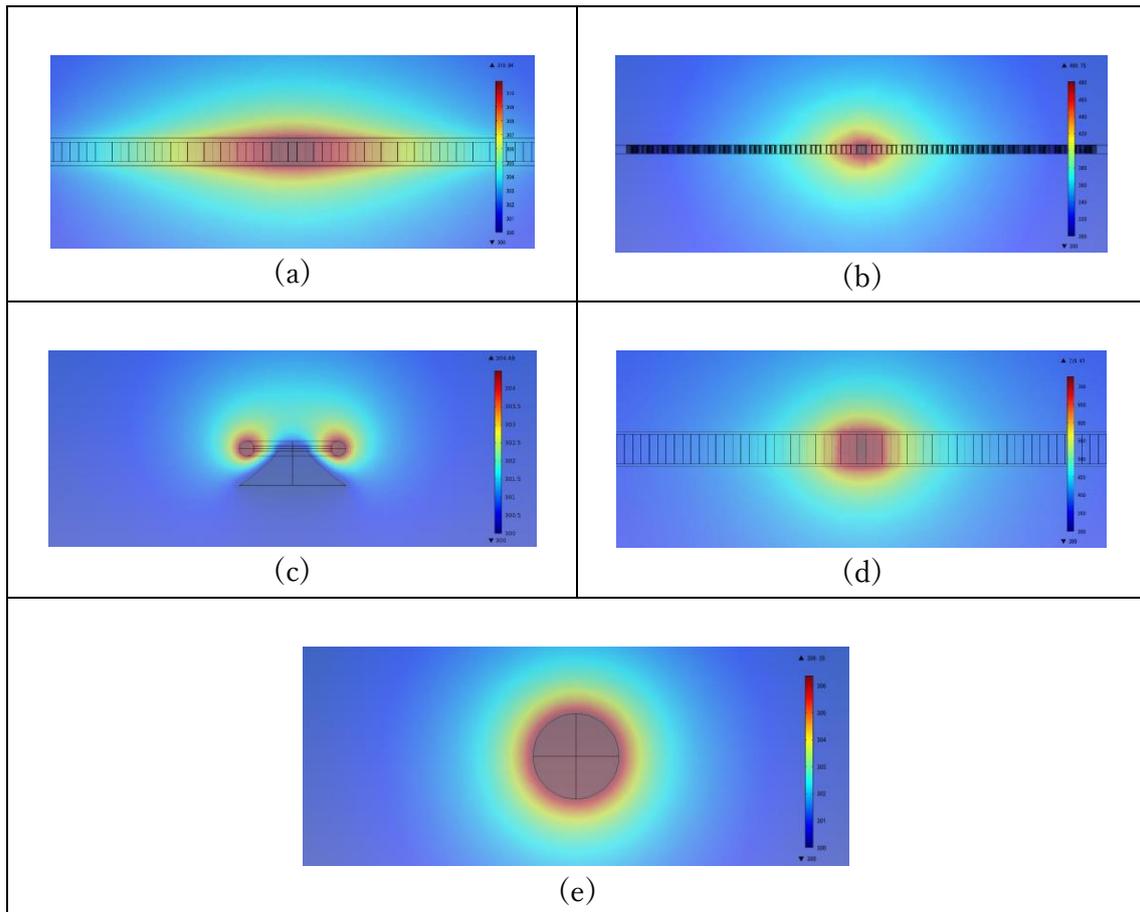


Fig. 4.2: 定常状態における (a)Si 1DPhC 共振器の温度分布. (b)Si 2DPhC 共振器の温度分布.  
 (c)SiO<sub>2</sub> toroid 共振器の温度分布. (d)SiO<sub>2</sub> 1DPhC 共振器の温度分布.  
 (e)PS sphere 共振器の温度分布.

#### 4.4 共振器の温度変化

Fig. 4.3 は水素濃度と共振器の温度との関係を示す.

水素濃度が増加するにつれて、すべての共振器で温度変化量が増加していることが分かる. これは水素の伝導率が空気に比べて大きいことに起因していると考えられる.

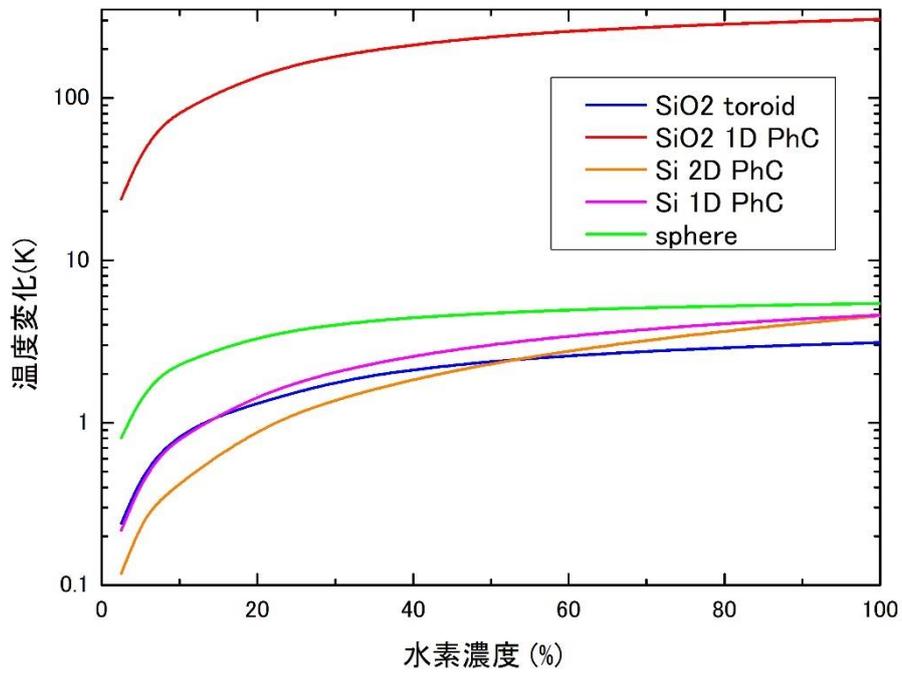


Fig. 4.3: 水素濃度-温度変化

#### 4.5 温度変化による波長シフト量

Fig. 4.4 は水素濃度と、式(2.14)を用いて温度変化量から導かれた共振波長シフト量との関係を示す. Fig. 4.3 では SiO2 1DPhC の変化量がその他に比べ大きすぎたために片対数グラフとしたが, Fig. 4.4 では通常のグラフとした.

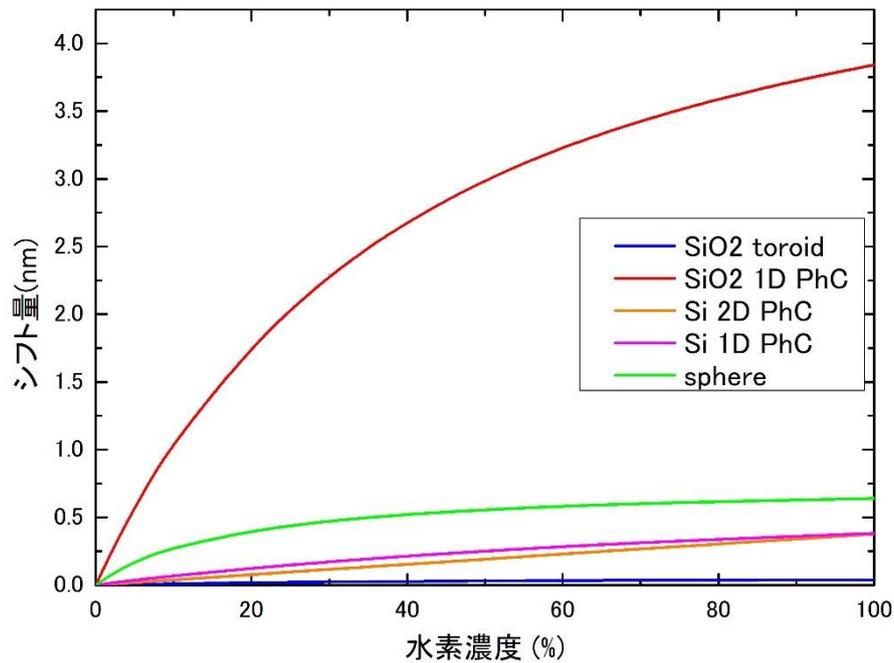


Fig. 4.4: 水素濃度-共振波長シフト量

## 4.6 共振波長の線幅に対する波長シフト量

Fig. 4.5 は Fig. 4.4 の縦軸を式(2.12)により導かれた共振波長の線幅で割ることにより規格化したものを示す. これをセンサー感度の比較に用いる.

半値半幅の波長シフトを検出可能であると仮定する.<sup>[14]</sup> この場合, 線幅に対するシフト量が 1 変化したときの水素濃度の変化量がセンサの分解能であるということになり, グラフが急峻であるほどセンサー感度は高くなる. したがって, 低濃度下においてはポリスチレン微小球共振器が最も感度が高いことが分かる. 水素濃度が 5%以下である場合, ポリスチレン微小球共振器は 0.068%の感度を示している.

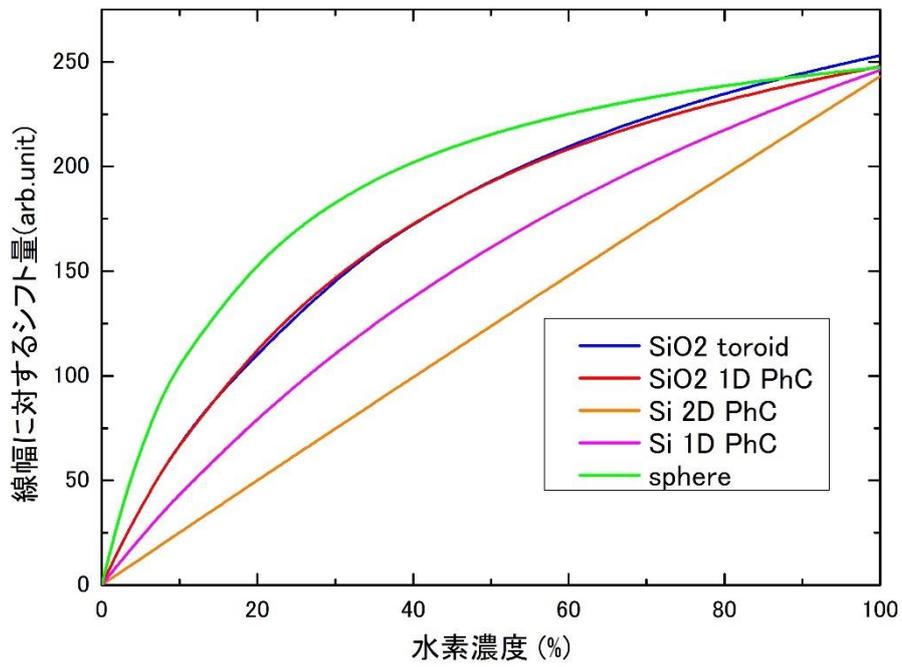


Fig.4.5: 水素濃度-共振波長の線幅に対する波長シフト量

## 第 5 部 結論

微小光共振器を用いた水素センサの実現のために、シリカトロイド共振器, シリカ 1DPhC 共振器, シリコン 1PhC 共振器, シリコン 2DPhC 共振器, ポリスチレン微小球共振器の 5 種類のモデルに対し熱解析を行った。

シミュレーション結果から低濃度下におけるセンサー感度は微小球共振器が最も高く, 発熱量  $73.7\mu\text{W}$ である場合 0.068%の水素濃度変化が検出可能であることが分かった。ただし, センサー感度は波長シフトの検出精度の向上だけでなく, 光共振器の Q 値の向上によっても改善されるため, 光共振器製作技術が向上すれば今回の結果とは異なる結果が得られる可能性があることには注意が必要である。

## 参考文献

- [1] M. A. I. Simon, "Thermal and gas-sensing properties of a micromachined thermal conductivity sensor for the detection of hydrogen in automotive applications," *Sensors and Actuators A*, 2002.
- [2] S. D. H. J. S. G. Korotcenkov, "Review of electrochemical hydrogen sensors," *Chemical Reviews*, 2009.
- [3] R. J. T. H. J. K. a. R. L. G. Rempe, "Measurement of ultralow losses in an optical interferometer," *Optics Letters* 17, 363-365, 1992.
- [4] K. J. Vahala, "Optical microcavities," *Nature* 424, 839-846, 2003.
- [5] Y. T. Y. S. T. A. a. S. N. Y. Taguchi, "Statistical studies of photonic heterostructure nanocavities with an average Q factor of three million," *Optics Express* 19, 11916-11921, 2011.
- [6] S.O. a. A. A. Dehghani, "Nano-Pressure Sensor using High Quality Photonic Crystal Resonator," 8th International Symposium on Communication Systems, Networks & Digital Signal Processing (CSNDSP), Poznan, Poland, 2012, pp. 1-4, doi: 10.1109/CSNDSP.2012.6292729., 2012.
- [7] T. S. S.-H. K. T. W. S. S. H. M. K. a. A. F. T. Süner, "Photonic crystal cavity based gas sensor," *Appl. Phys. Lett.* 92, 261112, 2008.
- [8] T. J. Kippenberg, "Nonlinear Optics in Ultra-high-Q Whispering-Gallery Optical Microcavities," Phd. Thesis, 2004.
- [9] D. D. B. B. a. F. P.-E. A. Airoudj, "Design and sensing properties of an integrated optical gas sensor based on a multilayer structure," *Anal. Chem.* 80(23), 9188-9194, 2008
- [10] W. O. a. A. B. B. Timmer, "Ammonia sensors and their applications- a review," *Sens. Actuators B Chem.* 107(2), 666-677, 2005.
- [11] A. H. T. B. G. M. I. E. S. Z. M. P. a. S. M. M. I. Syhan, "Discontinuously operated metal oxide gas sensors for flexible tag microlab applications," *IEEE Sens. J.* 8(2), 176-181, 2008
- [12] L. B. a. J. Y. M. El-Sherif, "Fiber optic sensors for detection of toxic and biological threats," *Sensors* 7(12), 3100-3118, 2007.
- [13] W. B. A. T. J.-M. F. a. R. B. P. Dumon, "Silicon nanophotonics," *Future Fab. International* 25, 29-36, 2008.
- [14] Nebiyu A. Yebo, Petra Lommens, Zeger Hens, and Roel Baets, "An integrated optical ethanol vapor sensor based on a silicon-on-insulator microring resonator coated with a"

- porous ZnO film, *Optics Express* Vol. 18, Issue 11, pp. 11859-11866(2010).
- [15] Xiangyi Xu, Weijian Chen, Guangming Zhao, Yihang Li, Chenyang Lu & Lan Yang, Wireless whispering-gallery-mode sensor for thermal sensing and aerial mapping, *Light: Science & Applications* Volume 7, Article number: 62 (2018).
- [16] C. P. R. H. A. W. A. P. a. O. B. Markus Gregor, "An alignment-free fiber-coupled microsphere resonator for gas sensing applications," *Appl. Phys. Lett.* 96, 231102, 2010.
- [17] ヤリーヴ-イェー, "光エレクトロニクス 基礎編," 丸善出版株式会社, 東京都千代田区神田神保町二丁目 17 番, 2010.
- [18] Y. N. Y. M. H. K. Y. K. a. T. T. Hiroki Itobe, "Bi-material crystalline whispering gallery mode microcavity structure for thermo-opto-mechanical stabilization," *AIP Advances* 6, 055116, 2016.
- [19] L. Y. a. K. J. V. Tal Carmon, "Dynamical thermal behavior and thermal self-stability of microcavities," *Optics Express*, 2004.
- [20] M. H. K. H. S. a. M. Q. Shijun Xiao, "Two-Photon Absorption Induced Thermal-Optic Effect," *IEEE*, 2007.
- [21] Q. Q. J. S. S.-j. S. Ning Yang, "Research on the temperature characteristics of optical fiber refractive index," *Optik*, Volume 125, Issue 19, Pages 5813-5815, ISSN 0030-4026, 2014.
- [22] 八光電機, "各種物質の性質：非金属固体の性質," 八光電機, [オンライン]. Available: <https://www.hakko.co.jp/qa/qakit/himl/h01010.htm>. [アクセス日 :01 27 2022].
- [23] M. L. Gorodetsky and V. S. Ilchenko, "Optical microsphere resonators: optimal coupling to high-Q whispering-gallery modes," *J. Opt. Soc. Am. B* 16, 147-154, 1999.
- [24] L. P. M. J. Rei Kitamura, "Optical constants of silica glass from extreme ultraviolet," *Appl. Opt.* 46, 8118-8133, 2007.
- [25] H. T. E. K. M. N. a. T. T. Akihiro Fushimi, "Fast calculation of the quality factor for two-dimensional photonic crystal slab nanocavities," *optics Express* Vol. 22, Issue 19, pp.23349-23359, 2014.
- [26] D. K. T. S. S .e. a. Armani, "Ultra-high-Q toroid microcavity on a chip," *Nature* 421, 925-928, 2003.