

任意の屈折率を持つ層からなる光学多層膜フィルタの最適設計

*中野 武雄、**前田 真、***馬場 茂

Optimum design of optical filter with multiple layers of arbitrary refractive indices

* Takeo NAKANO, ** Shin MAEDA and *** Shigeru BABA

ABSTRACT: A computer program has been developed to search for the optimum multi-layer filter structure by modifying the refractive indices (RI) of the layers continuously between 1.417 and 2.435, which are the RIs of SiO₂ and TiO₂, respectively. It aims to propose a design strategy where RI control of each layer is available by the recent progress in co-sputtering technique. We have tested the optimization of 3 kinds of initial structures for various numbers of layers (N_L). These initial structures are (HLHL...), (LHLH...), and (OOO...), where H denotes the TiO₂ layer, L does the SiO₂ layer, and O denotes the layer whose RI is the halfway of H and L. The residual error becomes smaller as N_L increases, and the HL structure shows the best result at any N_L . The OO is as good as the HL while the N_L is small, but becomes worst at $N_L > 20$. By comparing the HL and LH, it is understood that the more the alteration periods of H and L layers in the initial structure is, the better the optimization result is.

KEYWORDS: optical filter, multilayer structure, optimum design

1. はじめに

近年進められている波長多重化光通信 (Wavelength Division Multiplexing: WDM) のさらなる高密度化に伴い、信号以外の波長帯域をよりシャープにカットでき、なおかつ透過帯での透過率が高い光学フィルタの開発が強く望まれるようになっている。

誘電体多層膜として、反射/透過の帯域フィル

タを実現するもっともよく知られた構造は、高屈折率 (n_H) の層 H と低屈折率 (n_L) の層 L とを交互に積層させたものである [1]。このとき各層の厚さ d は光学膜厚にして $1/4$ 波長、すなわち、反射させたい波長 λ_0 に対する層材料の屈折率を n とし、 $d = \lambda_0 / (4n)$ とする。こうすると層の境界で反射した波が打ち消しあい、その波に対する禁制バンドができ、透過率が減少する。この構造では、中心波長 λ_0 の両側

$$\Delta\left(\frac{\lambda_0}{\lambda}\right) = \frac{2}{\pi} \sin\left(\frac{n_H - n_L}{n_H + n_L}\right) \quad (1)$$

*物理情報工学科助手 **同 大学院生 (現在 日本真空光学 (株)) ***同 教授

の範囲で高い反射率を持つフィルタとなる。この構造の反射フィルタは、HL の繰り返しの層数を多くすればするほど中心波長での反射率が増加し、かつ反射波長域の両端でのカット特性がシャープになることが知られている。しかし、この場合、透過領域に side lobe と呼ばれるリップル構造が現われてくるのが欠点である。

これに対し最近では、製膜技術の進歩によって、異なる屈折率を持った二種類の材料を同時にスパッタ蒸着し、混合比を制御して任意の屈折率を持つ膜を精度良く作製することが可能となってきた。例えば Wang らは TiO_2 と SiO_2 とを混合し、屈折率がなだらかに傾斜する zone と、(HL) の振幅が徐々に増加するような zone とを含む 33 層からなるフィルタ構造を提案・作成し、良好なフィルタ特性を得ている [2]。

本研究では、多層膜光学フィルタにおいて、各層の屈折率を任意に選べると仮定し、フィルタ特性が最適となるような解を数値的に求めるプログラムを開発した。これを用いて、層数と初期構造とを変えて最適化を行い、多層膜構造とフィルタ特性との関係について考察した。

2. 多層膜フィルタの透過特性

平面基板上に屈折率の異なる複数の膜を積層して作製した多層膜構造の透過率・反射率の計算には、いくつかの手法が存在する [3,4]。ここでは本研究で用いた、マトリックス法と呼ばれる方法を、Macleod による解説 [5] に沿って簡単に紹介する。

いま図 1 のような、0~ m まで指数付けされた $m+1$ 層からなる多層膜構造を考え、各層の屈折率を n_r ($r=0\dots m$) とおく。第 0 層と第 m 層は半無限の境界条件を持ち、第 1~第 ($m-1$) 層までが実際の薄膜に相当する。この各層の厚さを d_r ($r=1\dots m-1$) と置く。

いまこの多層膜構造に、第 0 層の側から入射角 θ_0 で波長 λ の光が入射した場合を考える。このとき各層における光路の傾きは、Snell の法則

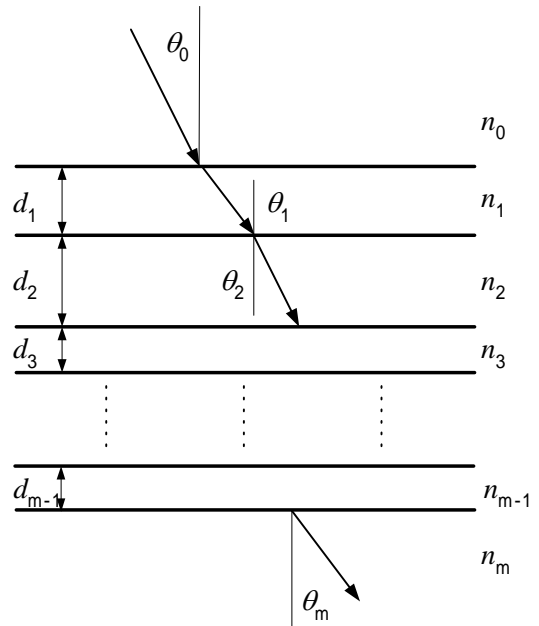


図 1. 光学多層膜構造

$$n_r \sin \theta_r = \text{const.} \quad (r = 0 \dots m) \quad (2)$$

によって決定できる。

このとき第 0 層における電磁場をそれぞれ E_o, H_o とし、第 m 層における電磁場を E_m, H_m とする。各境界面における電磁場の連続条件を繰り返し用いると、これらの間には最終的に

$$\begin{bmatrix} E_o \\ H_o \end{bmatrix} = \prod_{r=1}^{m-1} M_r \begin{bmatrix} E_m \\ H_m \end{bmatrix} \quad (3)$$

なる関係があることが示される。ここで M_r は 2 行 2 列の行列で、

$$M_r = \begin{pmatrix} \cos \delta_r & \frac{i}{\eta_r} \sin \delta_r \\ i \eta_r \sin \delta_r & \cos \delta_r \end{pmatrix} \quad (4)$$

と記述される。 δ_r と η_r とは、それぞれ光路長および光学アドミタンスと呼ばれる量で、

$$\delta_r = \frac{2\pi n_r d_r \cos \theta_r}{\lambda}$$

$$\eta_r = \begin{cases} \frac{n_r}{c\mu_0} \cos \theta_r & (s \text{ 偏光}) \\ \frac{n_r}{c\mu_0 \cos \theta_r} & (p \text{ 偏光}) \end{cases}$$

と表わされる。ただし c は光速で、 μ_0 は真空の透磁率である。

このフィルタのエネルギー透過率 T は、第 0 層と第 m 層それぞれにおける Poynting ベクトルの大きさの比率で与えられ、結局

$$\begin{bmatrix} B \\ C \end{bmatrix} = \prod_{r=1}^{m-1} M_r \begin{bmatrix} 1 \\ \eta_m \end{bmatrix}$$

なる B, C を用いて

$$T = \frac{4\eta_0 \operatorname{Re}(\eta_m)}{|\eta_0 B + C|^2} \quad (5)$$

と表わされる。以上の表式は各層が複素屈折率を持っている場合でもそのまま成立する。

本研究においては、簡単のため各層の屈折率は実数とし、さらに波長依存性は持たないものと仮定した。また垂直入射 ($\theta_0 = 0$) の場合のみを対象とした。

3. 最適化プログラム

本研究では $m+1$ 層の透明多層膜構造において、中間の $m-1$ 層の屈折率を変化させ、最適なフィルタ構造を探索するようなプログラムを開発した。Wang らの論文と同じく TiO_2 と SiO_2 を混合することを念頭に置き、各薄膜層の屈折率は、 SiO_2 の屈折率である 1.471 と、 TiO_2 の屈折率である 2.435 との間で変化させた。第 0 層には空気を想定して $n_0 = 1$ とし、第 m 層にはガラスを想定して $n_m = 1.510$ とした。

最適化の目標とする理想のフィルタとしては、中心波長 λ_0 を 730 nm とし、(1) 式に $n_H = 2.435$ と $n_L = 1.471$ とを代入して得られる、631.7 ~ 864.4 nm を反射帯とするものを考えた。反射帯内部では透過率 $T = 0$ 、外部では $T = 1$ とした。

この理想的なフィルタのスペクトルと、フィルタ構造から 2 節の方法に基づいて計算した透過スペクトルとの差分を波長 1 nm おきに取り、それらの二乗を総和した値 (残差) を、最適化の対象とする関数 (評価関数) にした。この差

分をとる波長領域は、中心波長からフィルタ領域両端までの波長幅をそれぞれ約 2 倍した、530 ~ 1000 nm とした。

最適化のアルゴリズムには、local minimum に落ち込む現象への耐性が強いと言われている、滑降シプレックス法 [6] を用いた。このパラメータ空間 $(x_1, x_2, \dots, x_{m-1})$ の値 x_r から屈折率 n_r への写像としては

$$n_r = \frac{n_H - n_L}{2} \sin x_r + \frac{n_H + n_L}{2} \quad (6)$$

を用いた。また各層の厚さ d_r は

$$n_r d_r = \frac{\lambda_0}{4} \quad (7)$$

となるように決定した。

最適化を開始する前の初期構造としては、

- 第 1 層の屈折率を n_H とし、以降を n_L, n_H, n_L, \dots と交互に重ねた構造 (HL 構造)
- 第 1 層の屈折率を n_L とし、それ以降を n_H, n_L, n_H, \dots と交互に重ねた構造 (LH 構造)
- 全ての層の屈折率を $(n_H + n_L)/2$ とした構造 (OO 構造)

の三種類を試した。

プログラムは FORTRAN で記述した。開発および実行に用いた OS 環境は Debian GNU/Linux (バージョン名 woody) [7] で、コンパイラには GNU g77 (バージョン 0.5.25 20010319 prerelease) [8] を用いた。このプログラムは <http://surf.ap.seikei.ac.jp/fopt/> より取得できるようになっている。プログラムの作成にあたっては、最適化アルゴリズム・パラメータからフィルタ構造を構築するルーチン・最適化関数を求めるルーチンを、それぞれモジュール化するように配慮した。従って、これらの各部分に対するアイデアが将来生じた場合、本プログラムを改造してそれらを試すことが容易になっている。

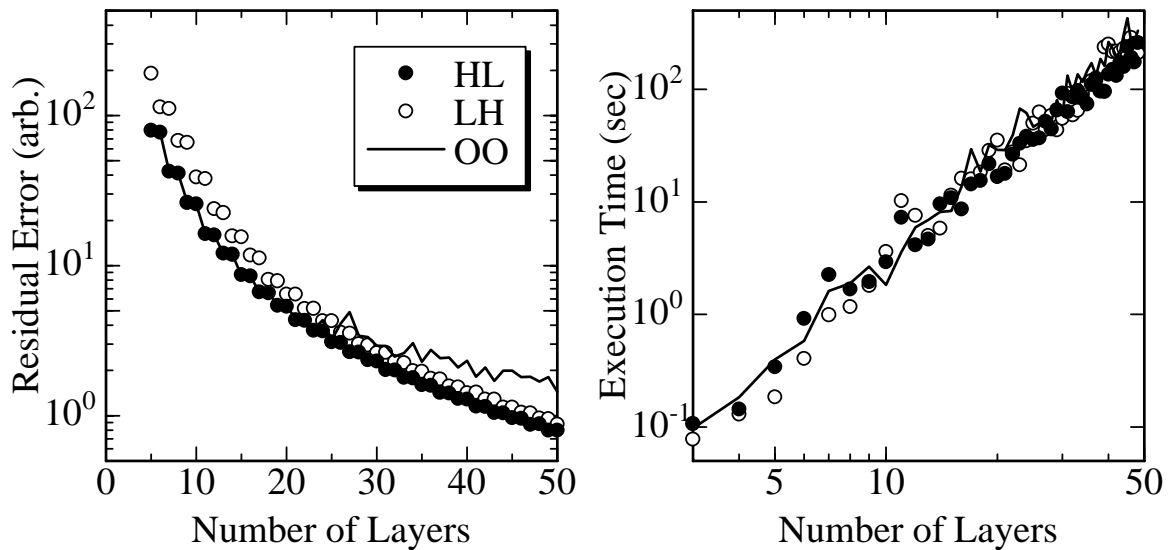


図2 残差と計算時間の層数依存性

4. 結果と考察

計算は層数 $m+1$ の値が 5~50 の範囲で行った。図2に計算の結果得られた、残差と計算時間の層数依存性を示す。左が縦軸に残差を対数値で取ったグラフ、右は計算時間を両対数で示したグラフである。

この計算には AMD Athlon MP 1600+ の dual CPU マシンを用いた。ただし実際に用いているのは、1 プロセスあたり 1 つの CPU のみである。g77 コンパイラの最適化オプションとしては、-O のみを指定した。計算時間には特に強い初期構造依存性は見られなかった。グラフより傾きを求めたところ、いずれも層数の 2.7~2.9 乗で増加していることが分かった。

残差のグラフを見ると、まず初期構造に対する依存性が存在することがわかる。すなわち本プログラムで得られたフィルタ構造に対応する残差の値は、局所的な極小値である可能性が高い。

すべての層数において、最も成績が良いのは HL を初期構造とした場合であった。OO 構造は層数が少ないうちは HL と同じ残差になっているが、20 層程度以降では、最も成績が悪くなった。この層数 20 程度までは、いずれの初期構

造でも残差は急激に減少しており、それ以降はより緩やかに、ほぼ層数の等比数列的な関係で減少していることがわかる。

ここで HL と LH を注意して見てみると、HL では層数が奇数のときに、また LH では層数が偶数のときに、残差の減少がより急激になっていることがわかる。すなわち、第 m 層が H になっているような初期構造が、最適化後により良いフィルタ構造を与えていると言える。さらに HL が LH よりも良い成績を収めていることから、同様に第 1 層も H になっている初期構造が好ましいと言える。

図3に、最適化後のフィルタ構造と、そのフィルタ特性との例を示す。この図では層数が 11, 23, 35 層の場合を示してある。図の上部には最適化後の構造を、下部にはその時の透過スペクトルを示してある。HL, LH, OO 各初期構造の結果を縦方向に配列してある。

層数が 20 以下では、HL と OO はほぼ等しい残差となっていたが、この領域に含まれる 11 層での結果を見ると、構造もほぼ HL と同じになっていることがわかる。これに対して、OO の残差が悪くなる領域にあたる 35 層の結果を HL および LH の結果と比べると、H と L の繰り返し構造が崩れていることがわかる。

次に LH に注目すると、いずれの層数でも第 1 層と第 m 層とが L に固定されてしまっていることがわかる。従って実質的には $m-3$ 個のパラメータしか動いていないことになる。実際、図 2 に示した残差の総数依存性のグラフを見ると、LH の結果は HL の結果を右に 2 層分ずらした結果とほぼ重なるように見える。

以上のことをまとめると、H 層と L 層が交互に繰り返される構造が、フィルタ特性を良くするためにはまず必要なのであろう。その上で、フィルタ構造の両端 ($r=0$ と $r=m$ に近い領域) の数層分の屈折率を変化させて、side lobe を減少させるような方向にパラメータが動くのだらうと考えられる。

今回用いた最適化モデルでは、 $m-1$ 次元のパラメータ空間上に初期構造に対応する点が与えられ、そこから最適化探索が開始される。シンプレックス法ではこの点の周囲に m 個の頂点を持つ多面体を作り、評価関数の値が小さくなる方向に多面体を動かしていく。OO 構造では全層が同じ屈折率からスタートするため、この多面体の形成に付随してまず屈折率の揺らぎが生じ、これが成長して、図 3 に見られるようなくし形の構造になっていくものと考えられる。このため層数が多くなると、H と L とが交互に積層する構造に育つ確率が低くなり、パラメータ空間の局所的な極小値に落ち込んでしまうのであろう。

HL 構造の残差は、20 層程度までは層数とともに比較的急激に減少し、その後はやや傾きの緩やかな等比数列的な減少を見せた。これは 20 層程度で、side lobe を押さえるためのフィルタ両側の処理がすみ、後は内部の H と L の繰り返し数が増えることによって、透過スペクトルの反射帯両端でのカットが急激になっている(すなわちスペクトルが矩形に近づいている)結果であると理解できる。20 層程度までの OO 構造の結果が HL 構造と近い値を取っていたことは、

おそらくこのことに関連していると我々は考えている。すなわち side lobe を減少させるための構造は、H と L との周期的な繰り返しほどには明瞭なパターンを持っていないため、残差の近い何種類かの構造がありうるだろう。このため OO 構造を出発点としても、それらのいずれかに到達できたのであろう。これに対して中央部の H と L の繰り返し数がフィルタの性能を決めているような層数では、パターンの制約が厳しいため、そのような構造に対応するパラメータ空間の座標に到達する確率が小さくなってしまったのであろう。

HL 構造と LH 構造の結果を見てみると、第 1 層や第 $m-1$ 層が H になっている構造が好成績を収めていた。この場合はそれぞれ第 0 層や第 m 層を起点とする LHLH... の繰り返しが始まる初期構造となる。逆に第 1 層や第 $m-1$ 層が L になる場合は、空気やガラス基板に相当する第 0 層や第 m 層の屈折率と、L 層の屈折率との差が小さいために、実効的な H と L の繰り返し数が減ってしまうのであろう。第 1 層と第 $m-1$ 層の両方が L であるような場合には、全ての層を逆転させればより残差が小さくなるような構造にすることは可能だが、それにはパラメータ空間上の距離が遠すぎる、あるいはその中途にある極小を避けられないのであろう。

ところで、34 層における HL や LH の最適化後の構造を見てみると、中心部の多層膜積層構造の両側に、徐々に屈折率が変化している領域や、あるいは H と L の交互変化の振幅が、外に向かってだんだん減少しているような構造が現われている。これらは [2] の文献で Wang が設計したフィルタ構造と似ており、このようなゾーンがリップルを押さえるためにどのような働きをしているかは興味深い。今回の研究では、パラメータ空間のそれぞれの成分をフィルタ構造の各層の屈折率に対応させるという最も単純な写像を用いた。これに対し、最初が

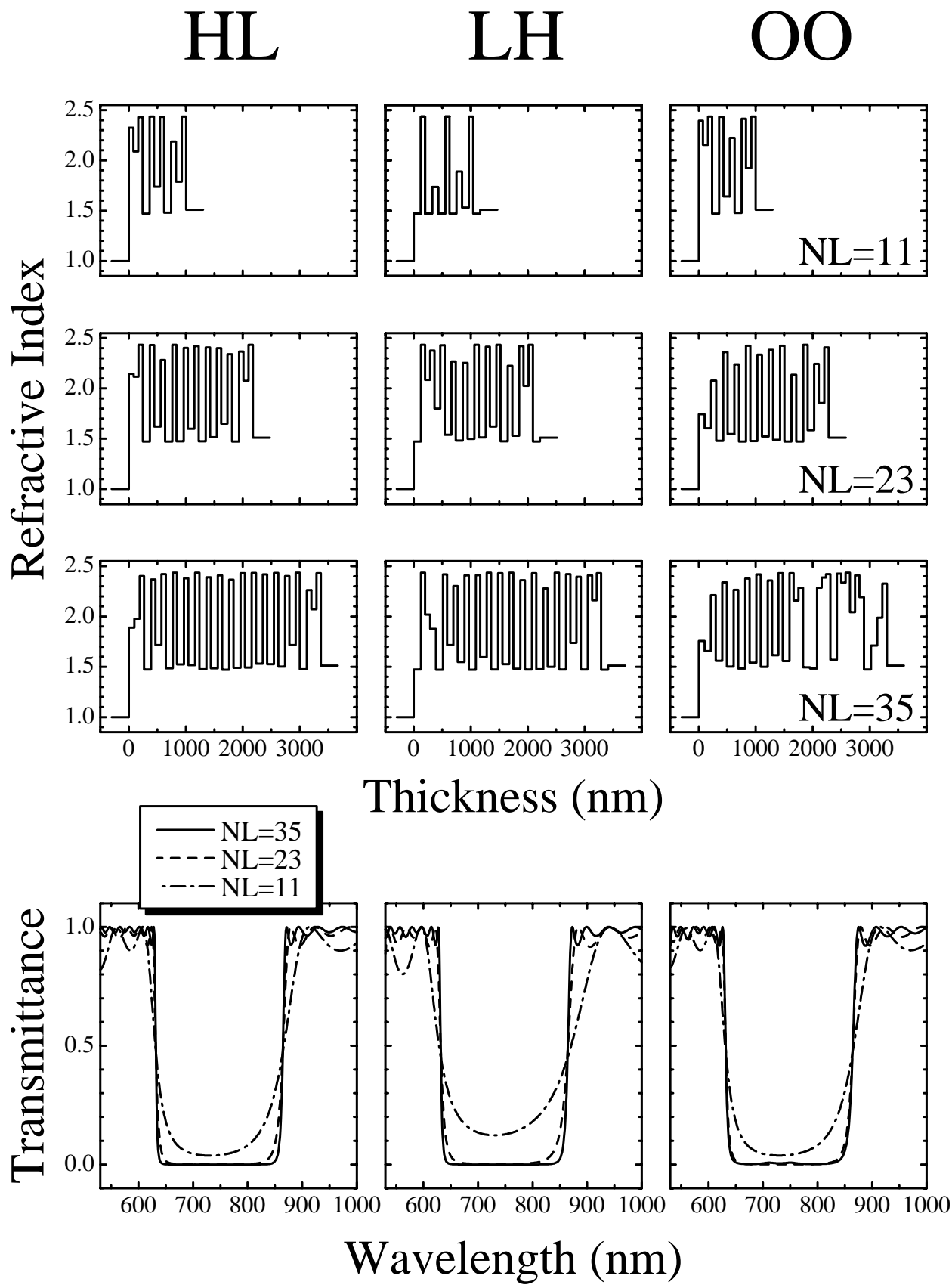


図 3: 最適化後のフィルタ構造と透過スペクトル

ら屈折率が傾斜するゾーンや振幅が変化するゾーンを想定し、それらをいくつかのパラメータによって制御して最適化するような計算も、今後試してみる価値があるかと考えている。

5. まとめ

透明膜の多層構造からなる光学フィルタに対して、各層の屈折率を連続的に変化させ、特定の波長域で透過率 0、その外部で透過率 1 を取るような透過スペクトルに最適化するプログラムを開発した。最適化前の初期構造としては HL, LH, OO といった 3 種類のものを採用し、層数を変えながら最適化計算を行った。結果より、H と L が交互に並び、その繰返し数が多い構造ほど、目的とした透過スペクトルに対する残差が小さいフィルタが得られた。

参考文献

[1] Pochi Yeh “*Optical Waves in Layered Media*”

Wiley & Sons (New York), 1988, Chap. 6.

- [2] X. Wang, H. Masumoto, Y. Someno, L. Chen and T. Hirai, *J. Mater. Res.*, **15** (2000) 274.
- [3] 吉田貞史 『薄膜』 東京大学出版会 (1990)、5.1 節
- [4] 吉田貞史、矢嶋弘義 『薄膜・光デバイス』 東京大学出版会 (1994)、1.4 節
- [5] H. A. Macleod “*Thin-Film Optical Filters*, 3rd Ed.” IoP Publishing (Bristol and Philadelphia), 2001, Chap. 2.
- [6] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling and B. P. Flannery “*Numerical Recipes in FORTRAN*, 2nd Ed.” Cambridge University Press (New York) 1992, Sec. 10.4.
- [7] <http://www.debian.org/>
- [8] <http://www.gnu.org/software/gcc/gcc.html>