

目次

第 1 部 序論	3
1.1 はじめに	3
1.2 分光法とその先行研究	4
1.2.1 回折格子による分光	4
1.2.2 プリズムによる分光	6
1.2.3 干渉分光法	6
1.3 フォトニック結晶とその応用	8
1.3.1 フォトニック結晶	8
1.3.2 フォトニック結晶における製造誤差とその影響	14
1.3.3 本研究の概要	16
第 2 部 理論	17
2.1 光伝搬の基本的原理	17
2.1.1 マクスウェル方程式	17
2.1.2 ブロッホの定理	18
2.2 フォトニック結晶の原理	19
2.2.1 フォトニックバンドギャップ	19
2.2.2 フォトニック結晶導波路	23
2.2.3 フォトニック結晶における局在	26
2.3 FDTD 法	29
第 3 部 FDTD 法によるシミュレーション	31
3.1 MEEP の設定	31

3.2	計算結果	32
3.2.1	誘電体マップ	32
3.2.2	スペクトル測定	33
3.2.3	プロファイルの出力	35
3.3	チャープ導波路における測定	38
3.4	マルチモードの局在の確認	40
第4部 深層学習を用いた波長分析		44
4.1	学習アルゴリズム	44
4.2	学習結果	46
4.3	深層学習による波長分析に関する考察	48
第5部 最適化アルゴリズムを用いた波長分析		50
5.1	焼きなまし法のアルゴリズム	50
5.2	SA による波長の分析結果	52
第6部 結論		57
第7部 謝辞		58

第 1 部

序論

1.1 はじめに

近年、光学素子の小型化に関する研究は盛んに研究されている。スマートフォンのような小さな電子機器が普及し、いかに電気素子、光学素子のサイズを小さくするかという課題は、非常に大きな注目を浴びているトピックの一つである。"IoT"と呼ばれる、身の回りにある"モノ"とインターネットをつなぐという考え方も登場し、世界に飛び交うデータ量はさらに膨れ上がっている。それに加えて、それを扱う機器は小型化しているため、内蔵されている素子はより高性能でより微細な構造が要求されている。それに並行して、それらの機器を大量出来るような技術、または安価な製造方法も必須となる。

その課題を克服しようとして近年注目されているマテリアルとして、フォトニック結晶と呼ばれるものがある。フォトニック結晶が保有する物性によって、入射する光の分散制御が可能となる。フォトニック結晶の研究は 1897 年、B.Rayleigh による光のバンドギャップの発見に端を発し、1987 年に E.Yablonovitch による三次元周期のフォトニック結晶の研究をきっかけとして世界規模の研究が盛んに行われるようになった。フォトニック結晶の周期的構造は光の波長スケールであるため、様々な光学素子のスケールを小さくすることができる利点を生かし、それを生かした研究が盛んにおこなわれている。

本チームが研究しているテーマは、フォトニック結晶を用いた分光器の開発である。分光器とは入射光のスペクトル測定を行う光学機器の総称で、プリズムや回折格子を用いたものが一般的には知られている。先行研究として後述するが、フォトニック結晶を基盤とした分光器も登場し、その素子サイズは劇的に変化した。本研究において、さらにシンプルな構造を用いてさらに分解能を高めることに成功した。分光器本体のスケールはチップに乗せるに十分な程小さいため、この論文によって少しでも光素子のさらなる普及に貢献できれば幸いである。

1.2 分光法とその先行研究

分光学は現代において化学センサーや天文学など、様々な場所で大きな役割を果たしており、分光システムに関する研究は今でも世界中で盛んに行われている。分光学の発展に大きく貢献したのは回折格子の登場である。それまでプリズムが基本だった分光システムは、フラウンホーファーによる回折格子の分光実験によって飛躍的に精度が向上し、現在までに様々な分光法が開発されてきた。

分光器は大別すると、分散型分光器と干渉分光器の二種類が存在する。分散型分光器とは、物質を透過する光の分散の性質を用いて分光するもので、プリズムや回折格子を使ったものがある。また干渉分光器は、ビームスプリッターなどで光路を分けた後に干渉させ、その干渉縞を測定する。歴史としては分散型が古く、現在は干渉分光器の研究も盛んに行われている。

1.2.1 回折格子による分光

分散型分光器の中で最も一般的に使われている手法は、回折格子を用いたものである。回折格子とは平らな鏡面に平行な溝を作り、波長によって反射方向を変化させる素子である。Figure 1.1. は回折格子の原理を表した図である^[1]。

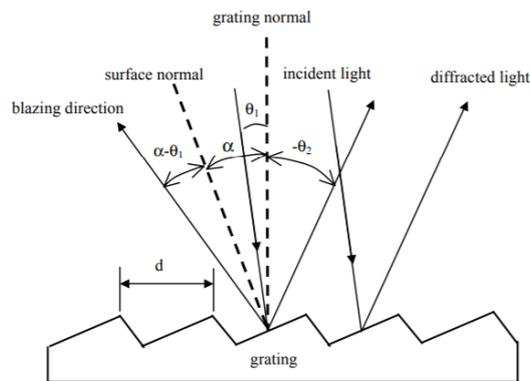


Fig. 1.1. About the principle of diffraction grating. Each parameter is defined lattice constant, incident and reflect angle as d, θ_1, θ_2 . (From Ray T.Chen, *et al.*, "High-performance dense wavelength division multiplexer based on blazed grating and ion-exchanged glass waveguide technique," Proc. SPIE 4998, Photonic Integrated Systems (9 July 2003))

Figure 1.1. における光路差は、 $2d(\sin \theta_1 - \sin \theta_2)$ と表わされるため、ある特定の波長 λ において強め合う条件は、自然数 n を用いて次式のように表すことができる。

$$2\pi \frac{d(\sin \theta_1 - \sin \theta_2)}{\lambda} = 2\pi n \quad (1.2.1)$$

左辺は位相差を表しており、位相差が 2π の整数倍の波長で反射光が互いに強め合うため、干渉縞を測定することができれば元のスペクトルを復元することができる。この方法を用いる分光法は古くから進められており、現代で様々な用途で用いられている。回折格子分光器の分解能は、総溝本数に大きく左右される。回折格子溝本数を N (本/mm) とすると、波長分解能 $\Delta\lambda$ (nm) の関係式は次のように表される。

$$\frac{\Delta\lambda}{\lambda} = \frac{1}{N} \quad (1.2.2)$$

300 本/mm の回折格子を用いて 1000 nm 近辺の波長を分解する場合、光を入射する幅を 20 mm とすると、波長分解能は 0.167 nm となる。なお実際は、レンズを用いることによる収差やミラーのような光学系の影響も考慮しなければならない。Figure 1.2. は回折格子分光器の一例である。この分光器では、回折格子によって分光された光を受光器で感知することで、370 nm という波長帯域で、0.5 nm の波長分解能を有している。X 線領域のように短波長の場合は、分光結晶が用いられることが多い。X 線は結晶格子面でブラッグ反射を起こすため、波長と同程度の結晶格子の間隔を持つ結晶を用いることで回折格子のような働きをする。

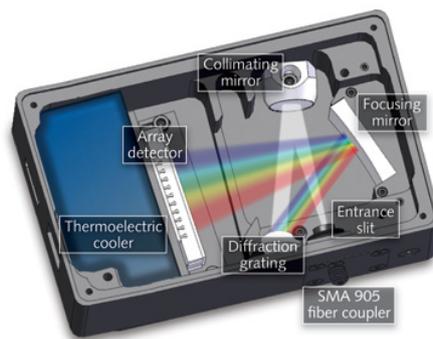


Fig. 1.2. Spectrometer used diffraction grating and optical component in spectrometer. (From B&W Tek. An Introduction to a Spectrometer-Diffraction Grating. AZoM. Retrieved on December 30, 2019)

1.2.2 プリズムによる分光

次にプリズムを用いた分光法を紹介する。初めて行われた分光実験はプリズムを用いて行われており、ニュートンが太陽光をプリズムに通して行ったといわれている。プリズムの利点としては、構造が極めて簡単なため、安価に作れることだが、プリズムによる分光では精度に限界がある。さらに、プリズムを透過できる波長でないと使えないなどの欠点があるため、現在はあまり使われていない。プリズム内を透過するとき、波長によって屈折率が異なるため、白色光が入射した場合は分散が起こり、波長によって光路が変化する。その現象を利用してスペクトルを得ることが可能である^[2]。Figure 1.3. はプリズムを用いた分光器の一例である^[3]。

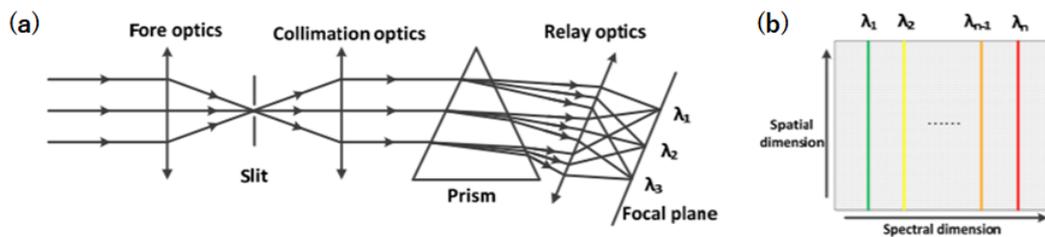


Fig. 1.3. Schematic of typical prism spectrometer. (a) Structure of prism spectrometer. The incident light imaged by the fore optics pass the slit. The light pass through prism according to the refraction principle. (b) Raw data on focal plane. (From Xu,L, *et al.*, "Integrated System for Auto-Registered Hyperspectral and 3D Structure Measurement at the Point Scale," *Remote Sens.* **2017**)

1.2.3 干渉分光法

次に干渉分光法について解説する。分散型分光法とは異なり、非分散で全波長を検出できる。マッハツェンダー干渉計なども用いた干渉分光器の研究は非常に盛んに行われている^{[4][5][6]}。Figure 1.4. は基本的な干渉分光器の光学系を表している。 z 方向に伝搬する光の強度と波長を I_0 , λ とする。移動鏡が d だけ動いているとき、受光器に検出される光強度は、

$$I = 2I_0 \left[1 + \cos \left(2\pi \frac{d}{\lambda} \right) \right] \quad (1.2.3)$$

となるため、フーリエ変換することでスペクトルを再構築することが出来る。

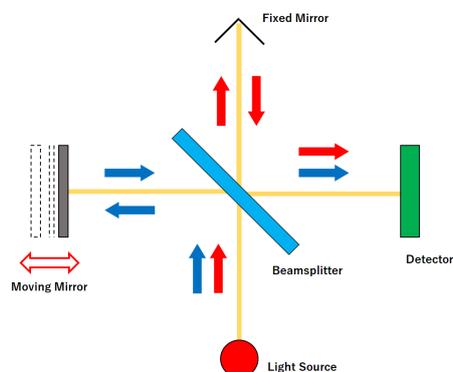


Fig. 1.4. The schematic representation of a FT-IR system.

分散型分光器と比較してフーリエ変換型分光器は、コンピュータを用いて短時間で高性能な計測が可能である。フーリエ変換型の分光器は Figure 1.5. のような MEMS としても応用されている^[6]。これは分波を行った後、片方にのみ熱を加えて熱光学効果を起こし、光路差を生み出している^[7]。また電界を加えて電気光学効果を用いた分光器も存在している^[8]。

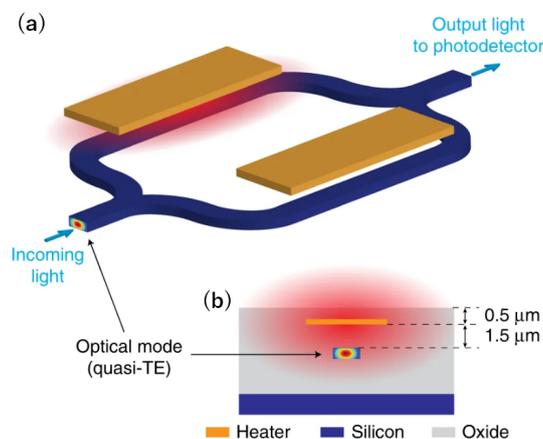


Fig. 1.5. On-chip Fourier transform spectrometer. (a) Schematic of a MZI with integrated metal microheaters on silicon-on-insulator (SOI) platform. (b) Device cross-section illustrating the quasi-TE mode (energy density) of the strip silicon waveguide and the heated area (light red) when current flows through the microheater. (From Frateschi, N.C., et al, "Fourier transform spectrometer on silicon with thermo-optic non-linearity and dispersion correction," Nat Commun 9, 665 2018)

1.3 フォトニック結晶とその応用

1.3.1 フォトニック結晶

フォトニック結晶 (Photonic Crystal: PhC) とは、誘電体に光の波長スケールで周期的な構造を持たせた構造体のことを言う。その周期構造の次元数に応じて、1次元、2次元、または3次元フォトニック結晶と分類される。原理は1887年にB.Rayleighによって提唱され、1987年にE.Yablonovitchによってバンド理論が明らかになったことにより、それ以降世界各地の研究機関の関心を集めている。原理の詳細は後述するが、フォトニック結晶にはフォトニックバンドギャップと呼ばれる禁制帯が存在し、ある特定の波長の光の透過率が著しく下がる現象が起こる。この現象は、屈折率の周期的変化によるブラッグ反射に起因している。

フォトニック結晶は、禁制帯 (Photonic band-gap: PBG) という特徴から主に、光を閉じ込める用途に使われることが多い。例えば、2次元フォトニック結晶に挟まれた空間に、禁制帯の波長の光を入射する場合を考える。禁制帯中の光は結晶中を透過することができないため、閉じた空間から逃げることができなくなる。そのためフォトニック結晶は、シリコン基板上の導波路^{[9][10]}や共振器として用いられることが多い。また、フォトニック結晶のもう一つの利点は、その微小な構造にある。周期構造が数百nmのため、フォトニック結晶構造自体が非常に小さくなるため、回路の集積と非常に相性が良い。

作製方法として主に電子線描画 (electron-beam lithography: EB lithography) が用いられるが、フォトリソグラフィでも作製は可能である。フォトリソグラフィの場合、CMOS互換プロセスで作製できるため、安価に大量生産できる。一方EBリソグラフィの場合、生産面ではフォトリソグラフィに劣るが、高い精度を保つことが出来るため、製造誤差を小さくすることが出来る。なお、本研究で用いたフォトニック結晶導波路は全てフォトリソグラフィで作製されている。

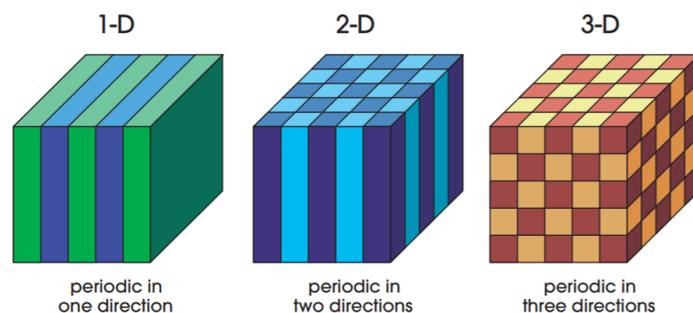


Fig. 1.6. Simple structure of photonic crystal. The different color represents different dielectric materials. (From Joannopoulos, John D., et al., "Photonic Crystals: Molding the Flow of Light," Princeton university press, (2008))

▷ 光導波路

フォトリック結晶の最もオーソドックスな応用例は、フォトリック結晶を用いた光導波路である。Figure 1.7. は、フォトリック結晶導波路の走査型電子顕微鏡 (Scanning electron microscope: SEM) 画像である。フォトリック結晶の周期構造のうち、空孔の一行だけを埋めた構造を設計することにより、バンドギャップ中の光はその部分のみ伝搬できるため、導波路として機能する^[11]。このような導波路を線欠陥型フォトリック結晶導波路 (PCW: Photonic Crystal Waveguide) という。PBG による閉じ込めは非常に強力で、なおかつ自在に設計できる。また、バンドギャップ付近の光は導波路を伝搬中に群速度が非常に遅くなる。このような分散制御を用いて、スローライト導波路のような、群速度を非常に遅くすることによって、バッファのような働きを持たせた導波路も存在している^[12]。

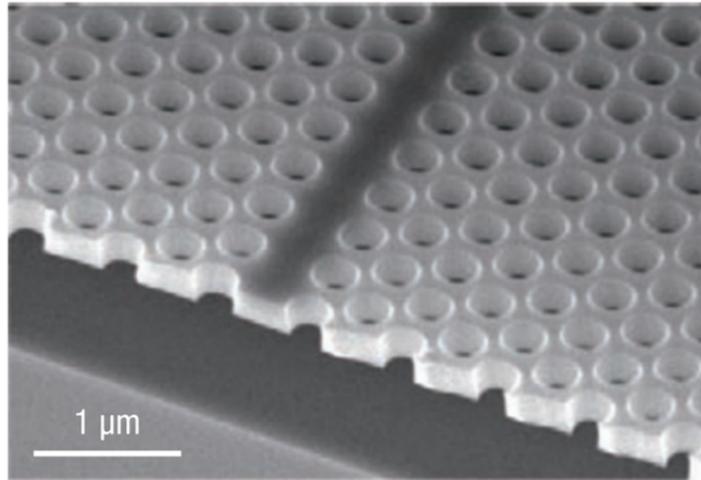


Fig.1.7. Scanning electron microscope image of a silicon PCW.(From Baba.T *et al.*, "Slow light of photonic crystals," *Nature Photon* 2, 465-473 **2008**)

▷ 光共振器

光共振器とは，光を閉じ込められる構造を用いて非線形な効果を起こす素子をいう．最も単純な共振器構造はミラーを向かい合わせに配置し，利得媒質中を往復させるものである．微小な光共振器としては，whispering-gallery mode(WGM)と呼ばれる，円盤型の構造の壁面を光が周回する現象を利用したトロイド共振器やロッド共振器，シリコン・シリカ系でない結晶材料を用いた結晶材料共振器などがある．これらの微小な構造の共振器は，モード体積が小さいため非線形光学効果を起こしやすく，レーザー発振^[13]，光スイッチ^[14]，光 Kerr コムの発生^[15]など幅広い応用例が存在する．また，フォトニック結晶のバンドギャップを利用した光共振器も存在している^{[16][17]}．Figure 1.8. はフォトニック結晶共振器のイメージ画像である．フォトニック結晶導波路の一部分のみ空孔を外側にシフトさせ，導波路幅を変化させている．微小共振器の基本的性能の指標として， Q 値とモード体積 V が知られている． Q 値は共振器内の光子寿命の逆数であるため一般的には高いほうが性能が優れており，モード体積 V は小さいほど光を小さな範囲に強く閉じ込められているため良いとされる．フォトニック結晶共振器の優位点は，モード体積が小さいことにある．また，空孔の位置を自由に設定することができるため，設計の自由度が高い．その他，シリコン基板上に作製できるためオンチップも可能のため，集積回路に組み込むことで様々なアプリケーションが期待されている^[18]．

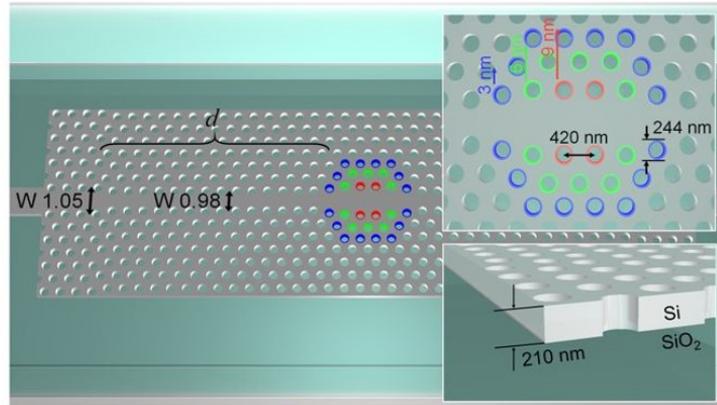


Fig. 1.8. Schematic illustration of a two-dimensional width-modulated line defect PhC nanocavity. Air holes only at the centre of the structure are slightly shifted toward the outside of the waveguide from their original position. The silicon slab is covered with SiO₂. (From Ooka.Y *et al.*, "CMOS compatible high-Q photonic crystal nanocavity fabricated with photolithography on silicon photonic platform," Sci Rep 5, 2, **2015**)

▷ 分光器

フォトリソグラフィを用いた分光器の先行研究は多く存在している。このいくつかを紹介する。一つ目の先行研究は、シリコン導波路にバス型にフォトリソグラフィ共振器が繋がっている分光器である^[21]。バス型のフォトリソグラフィ共振器を用いた分光法は最もオーソドックスな手法であり、先行研究も数多く存在する^{[19][20]}。この場合に用いられるフォトリソグラフィ共振器はL3共振器と呼ばれ、フォトリソグラフィ共振器構造の空孔3つを埋めた共振器構造をしている。L3共振器の共振周波数は左右の空孔の位置を外側にシフトさせることで可変であるため、設計次第で様々な共振周波数をもつ共振器を製造することが出来る。Figure 1.9.(a)において、左側から入った入射光は中央の導波路部分を透過していく。導波路の側方にはフォトリソグラフィ共振器がバス型に繋がっており、それぞれ共振周波数を少しずつずらして設計しているため、各々の周波数に対応する光のみが共振器に結合され上方に散乱する。その散乱光を測定し、入力光のスペクトルを再構築するというメカニズムである。しかしこの種の分光器は、構造によって分解能と感度波長範囲が大きく制限される。まず個々の共振器のピーク幅があるため、分解能が10 Gkzほどに制限される。また、解析できる波長数は共振器の数に因るため、感度波長範囲は共振器の数によって制限されるという課題があった。共振器の数を多くすれば幾分か解消できるが、ファブリケーションのコスト面や、分光器のサイズ面からも得策でなく、導波路での損失も大きくなるため実用的でない。以上の課題を克服するため、

この研究は共振周波数の熱シフトに着目している。Figure 1.9.(b) は共振器の熱シフトを利用した分光システムのイメージ図である。熱シフトとは、共振器構造に熱を加えることで共振周波数が変化する現象のことを言う。フォトニック結晶共振器の場合、熱によってシリコンの屈折率が変化することによって起こる^[22]。Figure 1.9.(c) が熱シフトの影響によって共振周波数がシフトすることを示したグラフである。実際のグラフから、 $0.073 \text{ nm}/^\circ\text{C}$ の線形関係があることが分かる。シフトする波長帯域が 1.5 nm の場合が熱による Q 値の変化は約 5% に留まるため、無視することが出来る。上述の先行研究において、バス型でない単一の共振器構造という非常に小さなサイズをもって分解能が 0.02 nm という非常に精巧な分光器を開発した。熱シフトを利用した分光器の課題としては、高温の場合は測定の正確性を損なう可能性があるため、適正の温度幅が 20°C に限られ、即ち波長帯域も 1.5 nm に限られてしまう。

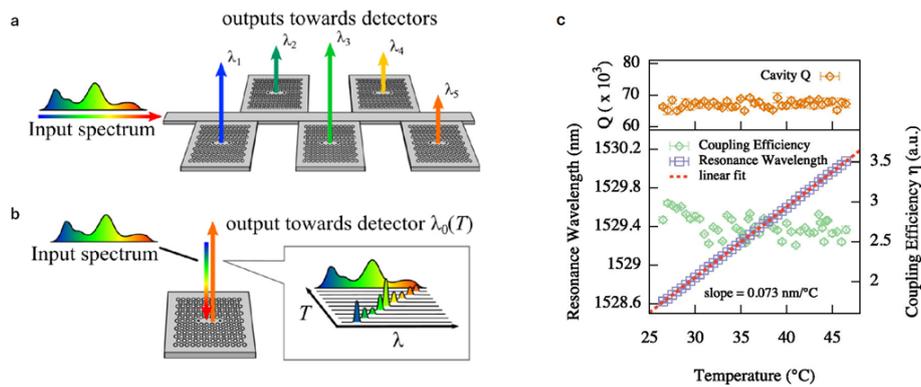


Fig. 1.9. Operating principle of a PhC cavity spectrometer. (a) Spectrometer using an array of sequentially tuned cavities. (b) Spectrometer using a single dynamically tunable cavity. (c) Resonance wavelength, cavity Q, and coupling efficiency μ as functions of temperature for an optimized L3 PhC cavity. (From R.W.Boyd *et al.*, "On-chip spectroscopy with thermally turned high-Q photonic crystal cavities," Appl. Phys. Lett. 108, 021105 2016)

次に紹介するものはランダムフォトリック結晶を用いた分光器である^[23]。フォトリック結晶のランダム性による散乱を分光に用いるという着想は、我々の研究にも近いものがある。Figure 1.10.(a)からも分かるように、分光器は半円の構造をしている。導波路を伝搬した入力光は、半円の中央部分から、空孔がランダムに設置された領域に入りそこで散乱する。散乱光はランダムな層の端にたどり着くと、25本設置されたフォトリック結晶導波路を通り、その先にある受光器で感知される。フォトリック結晶導波路の先に受光器を設置することにより、受光器の設置数を削減し、構造をより簡易なものにすることが出来る。Figure 1.10.(b)は $\lambda = 1500 \text{ nm}$ の光を入力したときのFDTDシミュレーション結果である。またFigure 1.10.(c)は実験結果であり、散乱された光が白い枠の付いた受光器の領域にたどり着いている。散乱し、各受光器で測定されたデータは、透過マトリックスとして行列の形で記録される。つまり透過マトリックスには、どの波長の光がどのような透過率で各受光器にたどり着いているか、というデータが入っている。この受光器に関して、素子構造や受光器のリミットによる分解能は存在しない。つまり、波長の変化と各チャンネルへの分配が変化の関数を表す、スペクトル相関関数 (spectral correlation density: SCD) を考慮する必要がある。分配に相関が見られなくなる、つまり $\text{SCD} = 0.5$ となる波長間が 0.6 nm であるため、この値が分解能となる。実際の測定結果からも、 25 nm の波長帯域で、 0.75 nm の分解能を記録している。

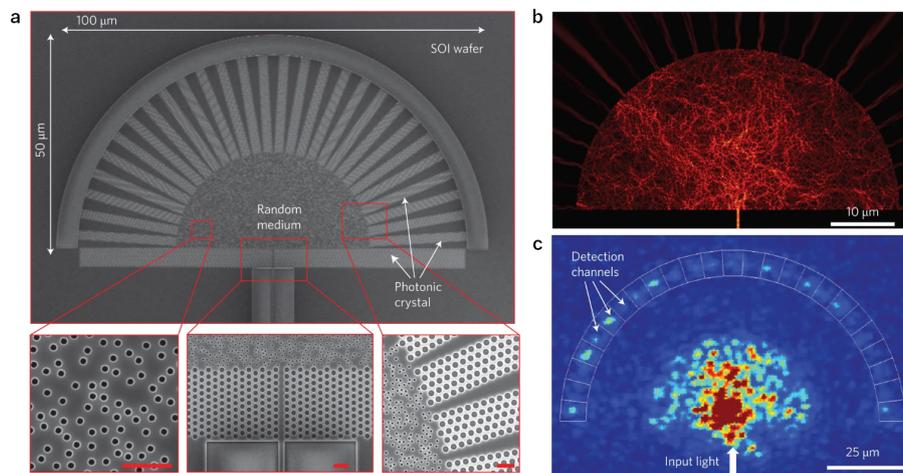


Fig. 1.10. (a) SEM image of the fabricated spectrometer. The distribution of intensities over the detectors is used to identify the input spectrum. (b) Numerical simulation and (c) experimental image of TE polarized light at $\lambda = 1,500 \text{ nm}$ diffusing through the random structure. (From H.Cao *et al.*, "Compact spectrometer based on a disordered photonic chip," *Nat. Photonics* 7, 746-751 2013)

1.3.2 フォトニック結晶における製造誤差とその影響

理想的な設計通りのフォトニック結晶導波路では、シミュレーション通りの透過特性を得ることが出来る。しかし実際には製造上の誤差は避けられず、製造誤差は透過特性に影響を与える。製造誤差による影響について様々な研究が行われている^{[24][25]}。フォトニック結晶共振器においても、Q値の低下などのネガティブな影響を与えてしまう^[26]。特に、製造の乱れは局所的な光の閉じ込め効果を起こす場合があり、この現象は光局在と呼ばれている。さらにPCW構造に乱れがあることで、光が散乱され透過特性に影響を与えたり、バンドギャップ帯の波長が透過する現象が起こる。

フォトニック結晶の作製法のフォトリソグラフィは、マスクパターンの上から照射し、マスクを回折した光をウェハ上で干渉させ露光する。そのため、フォトマスク上からレーザーを照射することで大面積を一気にパターンニングできるため、生産性に優れている。また、レンズで集光して露光させる方法もあり、その場合は生産性の代わりに高い精度を得られる。パターンニングの解像度 R は Eq. (1.3.4) で求められる。

$$R = k \frac{\lambda}{NA} \quad (1.3.4)$$

ここで、 k はリソグラフィのプロセス性能を表す定数である。解像度を上げるためには R を下げれば良いため、レーザー波長を短波長化し、レンズの NA を上げることで実現できる。フォトリソグラフィの場合、製造誤差は大体、2 ~ 5 nm である。またフォトリソグラフィの解像度を上げる研究も行われている^[27]。

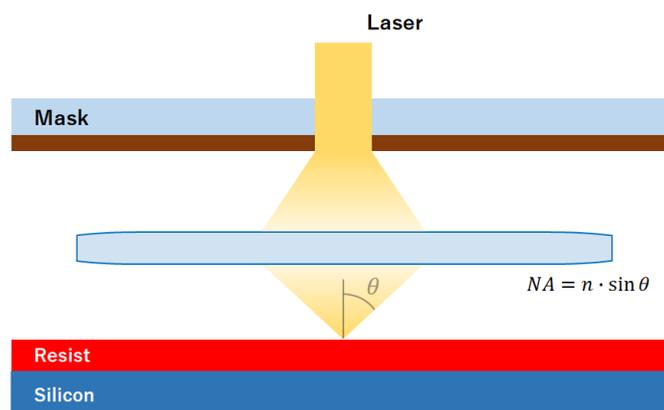


Fig. 1.11. Resolution in photolithography.

光局在については様々な先行研究が存在する [28][29]。Fig. 1.12. は、製造誤差によるフォトニック結晶の動化率の変動を表した図である。Fig. 1.12.(a) はフォトニック結晶導波路の SEM 画像で、空孔の中心に製造誤差による乱れが生じている。それによって光はランダムな散乱を起こす。フォトニック結晶共振器では、意図的に導波路幅をシフトさせることによって共振周波数の光を閉じ込めているが、製造誤差による乱れは小さく、ランダムな場所に表れる。Fig. 1.12.(b) は導波路に沿って強度を計測した結果である。これらの波長はバンドギャップ付近にもかかわらず、ランダムな場所に光がとどまっていることが分かる。このようなピークは導波路構造が理想的なものに近づくほど小さくなっていく。Fig. 1.12.(c) は光がどれ程分散しているかを様々な波長で観測しグラフにしたもので、これは局在の強さを表す指標となる。黒い破線はレイリー分布と呼ばれ、局在が起こっていない場合はこの線にフィッティングする。このことから、製造誤差によって局在が起こることがわかる。

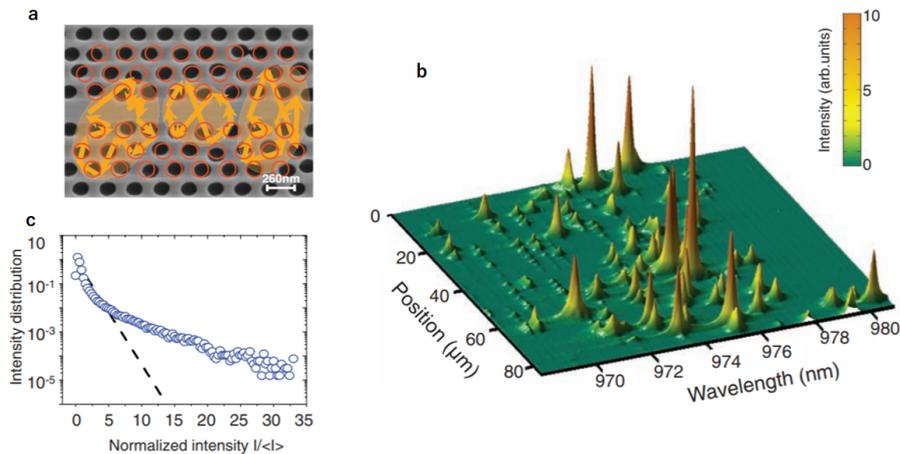


Fig. 1.12. Anderson localization in disordered photonic crystal waveguides. (a) Photonic crystal waveguide with 6% engineered disorder. The red circles represent the hole positions in an ideal structure without disorder. The orange arrows depict the wavevectors of localized modes. (b) High-power photoluminescence spectra collected while the excitation and collection microscope objective was scanned along the waveguide at 10 K for a 3% disordered sample. (c) Measured probability distribution of the normalized photoluminescence intensity extracted from the data presented in (b). The black dashed line represents the Rayleigh distribution. (From P.Lodahl *et al.*, "Cavity Quantum Electrodynamics with Anderson-Localized Modes," *Science* 327(5971), 1352-1355 2010)

1.3.3 本研究の概要

微小でオンチップ可能な分光器の作製は、光集積回路のさらなる普及に貢献できる大きなポテンシャルを秘めたテーマである。そのような分光器を、例えばスマートフォンのような日常的に用いられる電子機器に組み込むことが出来るならば、様々なアプリケーション先ができる可能性を秘めている。本論文のテーマは、そのような分光器をいかにして作製するかという所にある。現在普及している回折格子を用いた分光器は、広い波長帯域をもち、かつ高分解能である。しかし光を分散させなければならないため、空間系を組む必要がある。そのため、高分解能を保ちつつ機器自体のサイズを小さくすることは難しい。フォトリソグラフィによるフォトニック結晶構造は、シリコン基板に空孔を周期的に配置するだけ良く、さらにナノスケール構造であるため、光集積回路と非常に相性が良い。さらに設計次第で様々な波長帯にバンドギャップを作成することが出来るため、応用性に富んでおり、フォトリソグラフィで作製できるため、安価に大量生産ができる。このことから、上記テーマに最も適当なプラットフォームは、フォトニック結晶であると決定づけた。実際、フォトニック結晶を用いた分光器の作製は、前述のとおり先行研究が多く存在している。その中でも本論文では、分光システムに機械学習のソフトウェアを組み込む新しい手法を用いている。バンドギャップ波長帯域において、製造誤差は光局在となって表れる。この局在は波長によって非常に敏感に変化するため、微小な変化を機械学習や焼きなまし法 (Simulated Annealing: SA) と呼ばれる最適化アルゴリズムを用いて解析することにより、チャープフォトニック結晶導波路という単純な構造のまま、分光器の分解能を上げることに成功した。具体的な順序としてはまず、機械学習を用いて単一波長の分析を行っている。用いた導波路画像は FDTD シミュレーション画像と実験画像の両方で確認した。その後、入力を複数波長に変えて確認している。ここで、機械学習で行うには様々な課題があったため、一旦 SA で解析を行った。その後、複数波長での機械学習による解析に取り組んでいく。

第 2 部

理論

2.1 光伝搬の基本的原理

2.1.1 マクスウェル方程式

フォトニック結晶の原理の説明の前に、基本的な光伝搬の原理について説明を行う。フォトニック結晶中の光伝搬を含めたすべての微視的な光現象はマクスウェル方程式に支配されている。マクスウェル方程式は、電場 \mathbf{E} 、電束密度 \mathbf{D} 、磁場 \mathbf{H} 、磁束密度 \mathbf{B} の 4 つのベクトル場が下の 4 式を構成している。

$$\nabla \cdot \mathbf{D}(\mathbf{r}, t) = \rho(\mathbf{r}, t) \quad (2.1.1)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (2.1.2)$$

$$\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) \quad (2.1.3)$$

$$\nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) + \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{D}(\mathbf{r}, t) \quad (2.1.4)$$

マクスウェル方程式におけるベクトル場は一般的に、空間座標 \mathbf{r} と時刻 t の関数で、 $\rho(\mathbf{r}, t)$ [C/m³] と $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$ [A/m²] はそれぞれ電荷密度と電流密度である。誘電率 ε と透磁率 μ を用いると $\mathbf{D}(\mathbf{r}) = \varepsilon_0 \varepsilon(\mathbf{r}) \mathbf{E}(\mathbf{r})$, $\mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{H}$ であり、光伝搬の媒質中に電荷がないと仮定した場合、電荷密度と電流密度は 0 となるため、上式は

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = 0 \quad (2.1.5)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{H} = 0 \quad (2.1.6)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\mu_0 \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} \quad (2.1.7)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \varepsilon_0 \varepsilon(\mathbf{r}) \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \quad (2.1.8)$$

となる。Eq. (2.1.7) と Eq. (2.1.8) より波動方程式が算出できる。Eq. (2.1.8) に対して両辺に回転演算 (curl) を行うと、

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{H} = \varepsilon_0 \varepsilon(\mathbf{r}) \frac{\partial}{\partial t} (\nabla \times \mathbf{E}) \quad (2.1.9)$$

ベクトルの公式と Eq. (2.1.6) から,

$$\begin{aligned}\nabla \times \nabla \times \mathbf{H} &= \nabla \cdot \nabla \cdot \mathbf{H} - \nabla^2 \mathbf{H} \\ &= -\nabla^2 \mathbf{H}\end{aligned}\tag{2.1.10}$$

Eq. (2.1.7) と Eq. (2.1.10) を用いて, Eq. (2.1.9) を変形し,

$$\nabla^2 \mathbf{H} = \varepsilon_0 \varepsilon(\mathbf{r}) \mu_0 \frac{\partial^2 \mathbf{H}}{\partial t^2}\tag{2.1.11}$$

を得る. Eq. (2.1.11) を波動方程式と呼ぶ. 便利のため $\mathbf{H}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{H}(\mathbf{r})e^{-i\omega t}$ とし波動方程式に代入すると, 光速 $c = 1/\sqrt{\varepsilon_0 \mu_0}$ を用いて,

$$\nabla^2 \mathbf{H} = -\varepsilon(\mathbf{r}) \left(\frac{c}{\omega}\right)^2 \mathbf{H}(\mathbf{r})\tag{2.1.12}$$

が得られる. この式は誘電率 $\varepsilon(\mathbf{r})$ が与えられた媒質を通過する磁場 \mathbf{H} の固有方程式である.

2.1.2 ブロッホの定理

ブロッホ定理 (Bloch's theorem) とは, 1次元フォトニック結晶のような誘電率が周期的に変化する媒質中を透過する電磁波の固有モードに対して成り立つものである.

▷ ブロッホの定理

比誘電率 $\varepsilon(x)$ が $\varepsilon(x+a) = \varepsilon(x)$ の関係にある場合, 固有モードは,

$$-\frac{\pi}{a} \leq k \leq \frac{\pi}{a}\tag{2.1.13}$$

である波数 k と,

$$u_{kn}(x+a) = u_{kn}(x)$$

を満たす, k に依存する周期関数 $u_{kn}(x)$ を用いて,

$$E_{kn}(x) = e^{ikx} u_{kn}(x)\tag{2.1.14}$$

で表すことが出来る.

ブロッホの定理の有用性は, 一次元フォトニック結晶のような誘電率が周期的に変化する媒質の固有モードを表す場合にある. Eq. (2.1.14) より, 互いに $2\pi/a$ だけ離れた k では

固有関数が同じ関数となる。したがって、固有関数を指定するには Eq. (2.1.13) の範囲の波数だけを考慮すれば十分である。このような範囲を第 1 ブリルアンゾーンと呼ぶ。

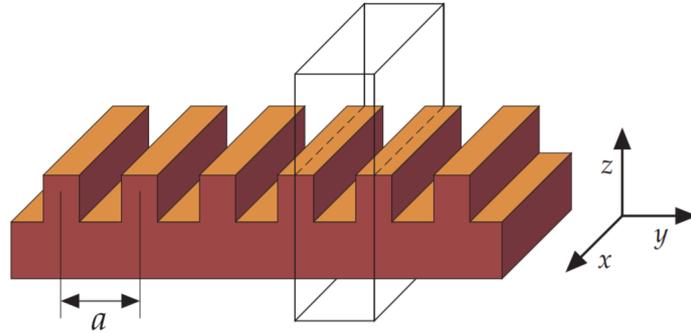


Fig. 2.1. A dielectric configuration with discrete translational symmetry. If we imagine that the system continues forever in the y direction, then shifting the system by an integral multiple of a in the y direction leaves it unchanged. (From Joannopoulos, John D., *et al.*, "Photonic Crystals: Molding the Flow of Light," Princeton university press, (2008).)

2.2 フォトニック結晶の原理

2.2.1 フォトニックバンドギャップ

フォトニック結晶にはフォトニックバンドギャップ (Photonic Band Gap: PBG) と呼ばれる禁制帯が存在している。PBG の導出をするとき必要になる式は、固有方程式 Eq. (2.1.12) とブロッホの定理の公式 Eq. (2.1.14) である。まずは次元フォトニック結晶を例として考える。初めに $1/\varepsilon(x)$ と $u_{kn}(x)$ のフーリエ級数展開を行う。

$$\frac{1}{\varepsilon(x)} = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \kappa_m \exp(iG_m x) \quad (2.2.15)$$

$$u_{kn}(x) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \varphi_m \exp(iG_m x) \quad (2.2.16)$$

ここで、 $G_m = 2m\pi/a$ であり、 κ_m 、 φ_m はフーリエ係数である。よって固有モードは、

$$H_{kn}(x) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \varphi_m \exp\{i(k + G_m)x\} \quad (2.2.17)$$

と表わされる. Eq. (2.2.16) と Eq. (2.2.17) を固有方程式 Eq. (2.1.12) に代入すると,

$$\begin{aligned} & \sum_{m''=-\infty}^{\infty} \sum_{m'=-\infty}^{\infty} \kappa_m(k + G_{m''} + G_{m'})(k + G_{m'}) \\ & \quad \times \varphi_m \exp\{i(k + G_{m''} + G_{m'})x\} \\ & = \frac{\omega^2}{c^2} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \varphi_m \exp\{i(k + G_m)x\} \end{aligned} \quad (2.2.18)$$

$m = m' + m''$ と仮定すると, $G_m = G_{m'} + G_{m''}$ より Eq. (2.2.18) は,

$$\begin{aligned} & \sum_{m=-\infty}^{\infty} \sum_{m'=-\infty}^{\infty} \kappa_{m-m'}(k + G_m)(k + G_{m'}) \varphi_{m'} \exp\{i(k + G_m)x\} \\ & = \frac{\omega^2}{c^2} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \varphi_m \exp\{i(k + G_m)x\} \end{aligned} \quad (2.2.19)$$

これがすべての x について成り立つため, m の係数が両辺で全て等しくなければならない. よって,

$$\sum_{m'=-\infty}^{\infty} \kappa_{m-m'}(k + G_m)(k + G_{m'}) \varphi_{m'} = \frac{\omega^2}{c^2} \varphi_m \quad (2.2.20)$$

Eq. (2.2.20) を分かりやすく表記するために, 以下のように定義する.

$$f_{mm'} = \kappa_{m-m'}(k + G_m)(k + G_{m'}) \quad (2.2.21)$$

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \\ \cdots & f_{-1,-1} & f_{-1,0} & f_{-1,1} & \cdots \\ \cdots & f_{0,-1} & f_{0,0} & f_{0,1} & \cdots \\ \cdots & f_{1,-1} & f_{1,0} & f_{1,1} & \cdots \\ \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (2.2.22)$$

$$\varphi = \begin{pmatrix} \vdots \\ \varphi_{-1} \\ \varphi_0 \\ \varphi_1 \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (2.2.23)$$

このとき Eq. (2.2.20) は,

$$M\varphi = \frac{\omega^2}{c^2}\varphi \quad (2.2.24)$$

Eq. (2.2.24) の固有値は, 一つの k に対して無限に存在するが, 実際のシミュレーションではある有限値 m' を考え, 固有値と固有ベクトルを算出する. 固有ベクトル φ が分かれば, Eq. (2.2.17) より磁場 $H_{kn}(x)$ が定まるため, マクスウェル方程式を用いて電場が求められる.

二次元フォトニック結晶の場合, Fig. 2.2. においてブロッホの定理を用いると, 固有モードは平面方向の波数ベクトル \mathbf{k}_{\parallel} と z 方向の波数ベクトル k_z を用いて,

$$\mathbf{H}_{n,k_z,\mathbf{k}_{\parallel}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}_{\parallel}\cdot\rho} e^{ik_z\cdot z} \mathbf{u}_{n,k_z,\mathbf{k}_{\parallel}}(z) \quad (2.2.25)$$

と表記できる. この場合, 第一ブリルアンゾーンは $-\pi/a < k_z \leq \pi/a$ である. 二次元フォトニック結晶における導出は割愛するが, 上記の一次元フォトニック結晶における導出のように計算を進めると, 波数と角周波数の関係は Fig. 2.3. のようになる. ここで, 角周波数は格子定数 a によって無次元化された値 $\omega a/2\pi c$ である. Fig. 2.3.(b) において, n はモード次数を表しており, 黄色の領域はどのモードも通ることのできない禁制帯が存在している.

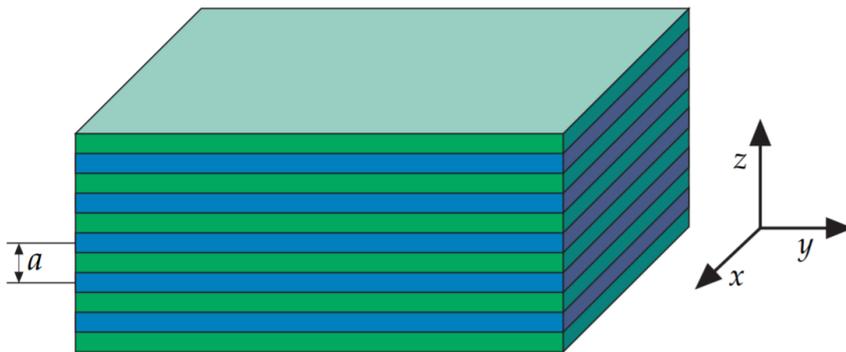


Fig. 2.2. A dielectric configuration with discrete translational symmetry. If we imagine that the system continues forever in the y direction, then shifting the system by an integral multiple of a in the y direction leaves it unchanged. (From Joannopoulos, John D., *et al.*, "Photonic Crystals: Molding the Flow of Light," Princeton university press, (2008).)

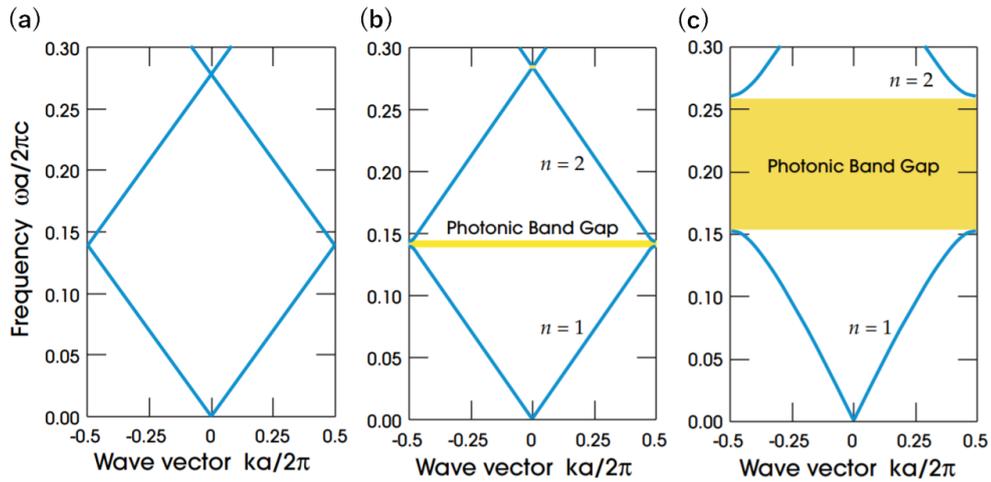


Fig. 2.3. The photonic band structure for on-axis propagation. Each layer has a width $0.5a$. (a) Every layer has same dielectric constant $\varepsilon = 13$. (b) Layers alternate between ε of 13 and 12. (c) Layers alternate between ε of 13 and 1. (From Joannopoulos, John D., *et al.*, "Photonic Crystals: Molding the Flow of Light," Princeton university press, (2008).)

フォトニックバンドギャップは $n = 1$ と $n = 2$ のモードに囲まれた領域だが、これらのモードにおいて光がどのような分布となっているか見ていく。 $k = \pi/a$ 、つまり Fig. 2.3. における第一ブリルアンゾーンの端点の場合、波長は格子定数の二倍の $2a$ となる。強度分布は格子定数に関する周期関数となるため、Fig. 2.4. のような二通りが考えられる。 Fig. 2.4. は、Fig. 2.3.(b) のモードの強度分布である。 Fig. 2.4.(a) は下の $n = 1$ モードに対応しており、誘電率が高い領域に強度が偏っている。 反対に Fig. 2.4.(b) は上の $n = 2$ モードに対応しており、誘電率が低い領域に強度が偏る。 この例では誘電率が 13 と 12 の場合だが、基本的なフォトニック結晶は空孔、すなわち誘電率が低い領域は空気 $\varepsilon = 1$ のため、上のモードは、真空中の周波数と波長の関係を表す、 $\omega = ck/n$ に対応する、ライトラインと呼ばれる直線となる。 なおフォトニック結晶では、TE, TM の定義は周期構造となっている軸が基準となっており、結晶構造によっては TM モードのみバンドギャップが存在しない場合もあり、その逆もある。

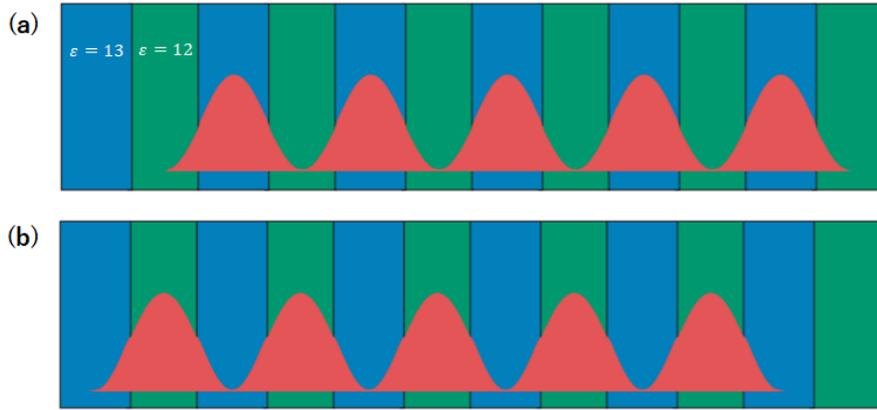


Fig. 2.4. The modes associated with the lowest band gap of the band structure plotted in Fig. 2.3.(b), at $k = \pi/a$. (a) Electric-field energy density $\varepsilon|\mathbf{E}|^2/8\pi$ of band 1. (b) Electric-field energy density $\varepsilon|\mathbf{E}|^2/8\pi$ of band 2. (From Joannopoulos, John D., *et al.*, "Photonic Crystals: Molding the Flow of Light," Princeton University Press, (2008).)

2.2.2 フォトニック結晶導波路

フォトニック結晶導波路は、フォトニック結晶の空孔を一行埋めた、線欠陥型導波路が一般的である。Fig. 2.5. は最も単純な、二次元フォトニック結晶の線欠陥型導波路である。

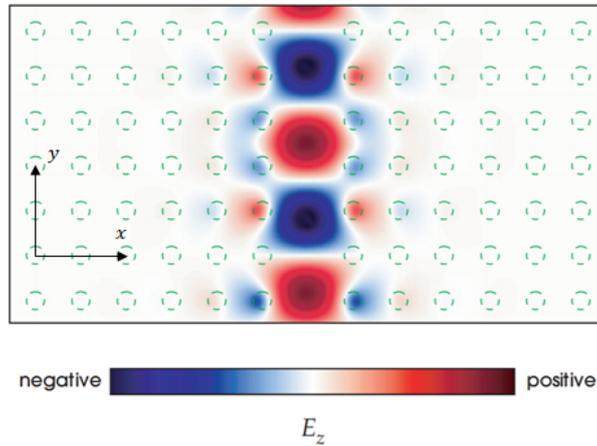


Fig. 2.5. Electric-field E_z pattern associated with a linear defect formed by removing a column of rods from an otherwise-perfect square lattice of rods in air. (From Joannopoulos, John D., *et al.*, "Photonic Crystals: Molding the Flow of Light," Princeton University Press, (2008).)

上図の線欠陥型導波路では y 方向に向かって、バンドギャップ帯の光は結晶中に漏れることなく伝搬するため、導波路としての働きを持っている。Fig. 2.5. では y 方向の周期構造は残したまま、 x 方向の周期構造を意図的に崩している。そのため、 k_y は変わらない。Fig. 2.6. は k と ω の分散関係で、黄色い部分がバンドギャップである。線欠陥により TM 波のバンドギャップ中に赤線のモードが出来ている。赤のモードはバンドギャップ中にあるため結晶に漏れ出すことはできず、欠陥部分に閉じ込められる。周りの周期構造はそのままに、導波路幅を変えることによってモードの位置を上下させることも可能である。また一列の線欠陥では、Fig. 2.6. のようにシングルモードになるが、複数列の線欠陥ではマルチモード導波路となる。

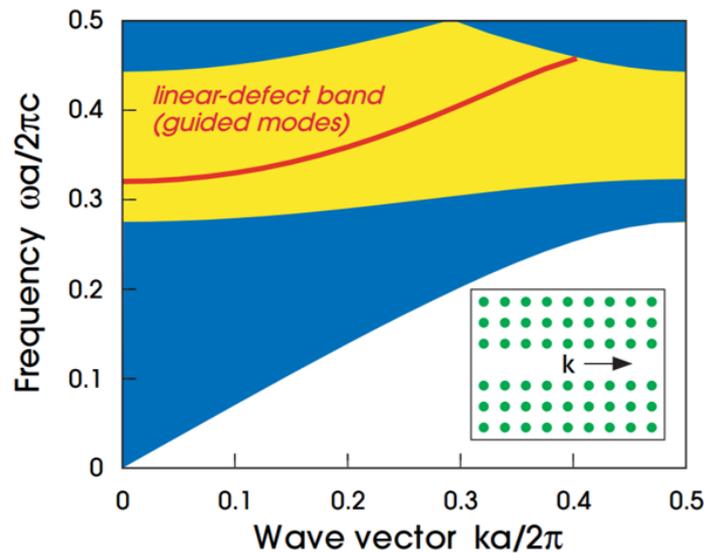


Fig.2.6. The projected band structure of the line defect (inset) formed by removing a row of rods, plotted versus the wave vector component (k) along the defect. The extended mode in the crystal become continuum regions (blue), whereas inside the band gap (yellow) and defect band (red) is introduced corresponding to a localized state. (From Joannopoulos, John D., *et al.*, "Photonic Crystals: Molding the Flow of Light," Princeton, university press, (2008).)

またフォトリック結晶導波路では光の群速度が非常に遅くなることが知られている^[30]。群速度は、包絡線の進む速度を言い、群屈折率 n_g は分散関係のグラフを用いて以下の式で表すことが出来る。

$$n_g \equiv \frac{c}{v_g} = c \frac{dk}{d\omega}$$

Fig. 2.7. は線欠陥型フォトニック結晶導波路の分散関係のグラフである。青い領域はフォトニックバンドギャップを表しており、黒い実線はモードを示している。群屈折率はすなわち、実線の傾きである。バンドエッジの部分では傾きが0に近づくため、群屈折率は発散する。つまり光は透過できなくなることを意味している。

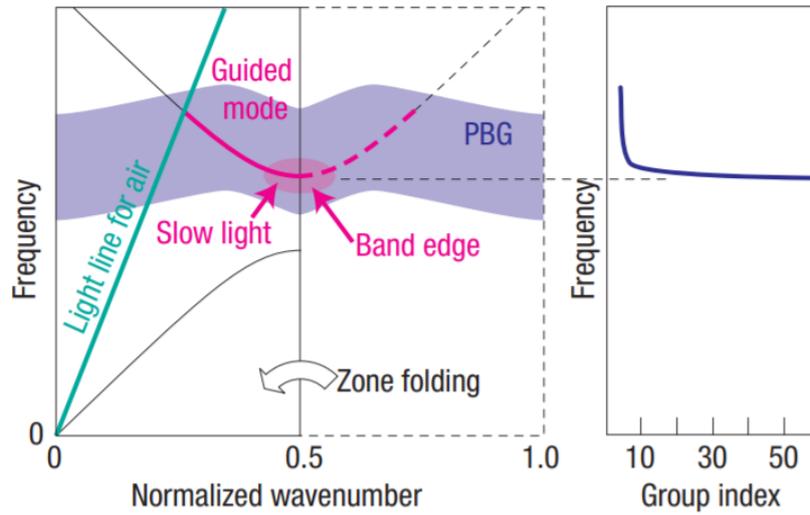


Fig. 2.7. Waveguides, photonic bands and group-index characteristics. schematic band and group-index spectrum of a silicon PCW with respect to the absolute frequency. (From T.Baba, *et al.*, "Slow light in photonic crystals," *Nature Photon* 2, 465-473 (2008))

2.2.3 フォトニック結晶における局在

フォトニック結晶の製造誤差による影響に関しては前章でも触れたが、この章ではもう少し掘り下げる。詳細には局在には二つのメカニズムが存在し、それぞれが異なる局在を見せる。まず局在の様子をシミュレーションで撮った画像が Fig. 2.8.(a)(b) である。光源は導波路の中央部分に設置しており、格子定数は $a = 260 \text{ nm}$ である。光強度は 1 で規格化されている。また製造誤差に見立てて、 $\sigma = 0.04a$ の乱数を空孔の中心に振っている。Fig. 2.8.(a) は導波路を伝搬する波長、Fig. 2.8.(b) は伝搬することのできないバンドギャップの波長でのシミュレーション画像である。また、Fig. 2.8.(c) の結果から局在長 ξ を定義する。局在長 ξ は格子定数で規格化された距離と対数を取った光強度のグラフの傾きの逆数である。

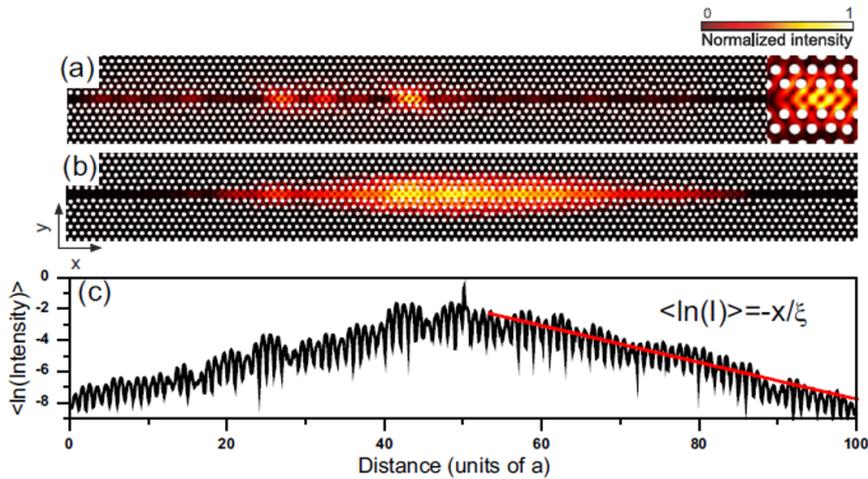


Fig. 2.8. (a) Electromagnetic field intensity at propagating wavelength. (b) Steady-state electromagnetic-field intensity in a disordered PCW perturbed by $\sigma = 0.04a$ calculated near the cutoff frequency. (c) Ensemble-averaged electromagnetic-field intensity profile along the waveguide direction. The localization length can be extracted from slope of the exponential decay. (From P.Lodahl, *et al.*, "Two mechanisms of disorder-induced localization in photonic crystal waveguide," *Phy. Rev. B*, 96 (14) **2017**)

局在長はその定義から、光強度が分散しているほど高い数値を取る。次に波長と局在長の関係を表したグラフが、Fig. 2.9.(a) である。それぞれ、バンドギャップ (灰) と短波長な伝搬する領域 (赤) と、長波長な伝搬できない領域 (青) に分けられている。また黒線はカットオフ周波数であり、プロットとは観測点である。Fig. 2.9.(b) は波長と光子密度 (DOS: Density of state) のグラフで、カットオフ周波数付近では光が透過できないため、光子密度が発散している。Fig. 2.9.(a)(b) から局在長 ξ は伝搬領域では DOS^{-2} に、エバネッセント領域 (青) では $[m(\omega_0^2 - \omega^2)]^{-1/2}$ にフィッティングされる。 m は有効光子質量と呼ばれ、 $m = \partial^2\omega/\partial k^2$ で定義される、バンド構造によって決まる定数である。つまり m は分散関係の曲率の逆数である。それぞれ ω_0 と ω は製造誤差がない場合とある場合のカットオフ周波数である。

Fig. 2.9.(c)(d) はそれぞれ伝搬領域とエバネッセント領域における、製造誤差の大きさと局在長の関係を示したグラフである。Fig. 2.9.(c) において、 $1/\rho\Sigma$ にフィッティングされている。 ρ と Σ はそれぞれ散乱密度と散乱面積を表しており、 ρ は Fig. 2.9.(c) の挿入図の黒い領域の面積を表す。これは空孔の理想の位置からずれた面積である。また、 Σ は散乱する確率を表しており、光子密度が大きいほど散乱する確率は高くなる。関係式は、 $\Sigma \propto \text{DOS}^{-2}$ となる。つまり ρ と Σ はどちらも散乱に関連している。そのため、伝搬領域における製造誤差の影響は主に散乱だということが分かる。一方 Fig. 2.9.(d) から分かるように、製造誤差によって局在長が大きく変わることはない。これは、エバネッセント領域では製造誤差によるトンネル効果が起こることで局在が起こるため、製造誤差が大きくなることで局在長が劇的に変化することはないためである。

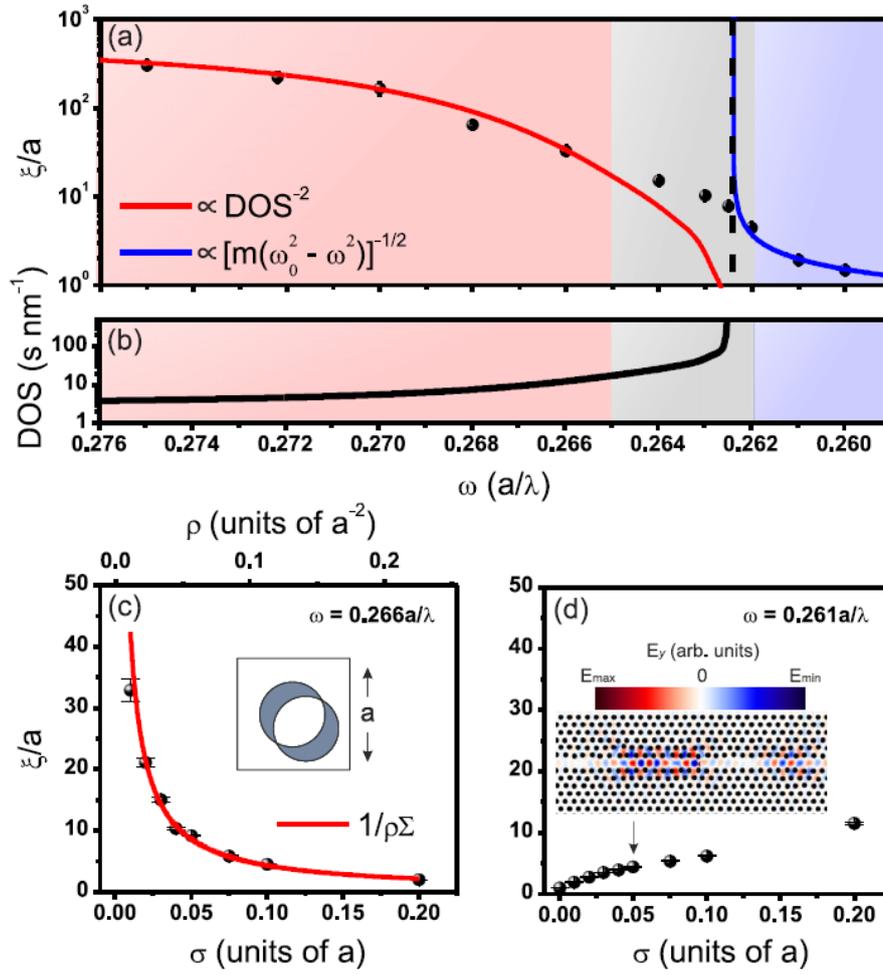


Fig. 2.9. Two regimes of disorder-induced localization. (a) Localization length calculated in a photonic-crystal waveguide with a lattice constant $a = 260\text{nm}$ and a hole radius $0.29a$ perturbed by $\sigma = 0.01a$ (black dots). The dashed line pinpoints the cutoff frequency of the propagating Bloch mode in the ideal structure. Two different scalings are observed. In the band region of a propagating waveguide mode, the red line shows $\xi \propto \text{DOS}^{-2}$, while the blue line is $\xi \propto m - 1/2$ in the band gap region. (b) The black line plots the corresponding density of optical states (DOS) of a perfect photonic-crystal waveguide. (c) and (d) Plot the localization length vs disorder at $\omega = 0.266a/\lambda$ [(c) inside band] and at $\omega = 0.261a/\lambda$ [(d) inside band gap], respectively. The red line in (c) shows the scaling $\xi \propto 1/\rho$. The inset shows the effective scattering (shaded) area when a hole is displaced from its ideal position. Finally, the inset in (d) shows the electric-field component perpendicular to the waveguide at $\omega = 0.261a/\lambda$ and for $\sigma = 0.05a$. (From P.Lodahl, *et al.*, "Two mechanisms of disorder-induced localization in photonic crystal waveguide," *Phy. Rev. B*, 96 (14) **2017**)

2.3 FDTD 法

時間領域差分法 (Finite Different Time Domain method :FDTD 法) とは, 電磁波シミュレーションを行うときによく用いられる数値解析のアルゴリズムである. 従来の差分法を時間領域まで拡張した FDTD 法は, マクスウェル方程式を時間と空間の漸化式として逐次計算を行っていくことにより, 電磁波の伝搬の様子をシミュレーション上で観察することが可能である. ここでは FDTD 法の基本的な内容を説明していく.

まずは二次元 xy 平面上の TE 偏波を想定したマクスウェル方程式より, 以下の三式を導き出せる.

$$\varepsilon_0 \frac{\partial E_x}{\partial t} = \frac{\partial H_z}{\partial y} \quad (2.3.26)$$

$$\varepsilon_0 \frac{\partial E_y}{\partial t} = \frac{\partial H_z}{\partial x} \quad (2.3.27)$$

$$\varepsilon_0 \frac{\partial H_z}{\partial t} = \frac{\partial E_x}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial x} \quad (2.3.28)$$

TE 偏波を仮定しているため, 磁界は z 成分, 電界は x, y 成分のみであり, $\partial/\partial z = 0$ である. この三式を空間的に差分化するために, 大きさが $\Delta x \Delta y$ のセルを考え, E_x を Fig. 2.10. のように定義する. 上式より, \dot{E}_x は H_z の中央差分で表され, \dot{E}_y は H_z の中央差分で表され, \dot{H}_z は E_x と E_y の中央差分で表される. なお, \cdot (ドット) は時間微分 $\partial/\partial t$ を表している. Eq. (2.3.29) ~ Eq. (2.3.31) は Eq. (2.3.26) ~ Eq. (2.3.28) を差分化した方程式である.

$$\varepsilon_0 \dot{E}_x \left(i + \frac{1}{2}, j \right) = \frac{H_z(i + \frac{1}{2}, j + \frac{1}{2}) - H_z(i + \frac{1}{2}, j - \frac{1}{2})}{\Delta y} \quad (2.3.29)$$

$$\varepsilon_0 \dot{E}_y \left(i, j + \frac{1}{2} \right) = -\frac{H_z(i + \frac{1}{2}, j + \frac{1}{2}) - H_z(i - \frac{1}{2}, j + \frac{1}{2})}{\Delta x} \quad (2.3.30)$$

$$\begin{aligned} \mu_0 \dot{H}_z \left(i + \frac{1}{2}, j + \frac{1}{2} \right) &= \frac{E_x(i + \frac{1}{2}, j + 1) - E_x(i + \frac{1}{2}, j)}{\Delta y} \\ &\quad - \frac{E_y(i + 1, j + \frac{1}{2}) - E_y(i, j + \frac{1}{2})}{\Delta x} \end{aligned} \quad (2.3.31)$$

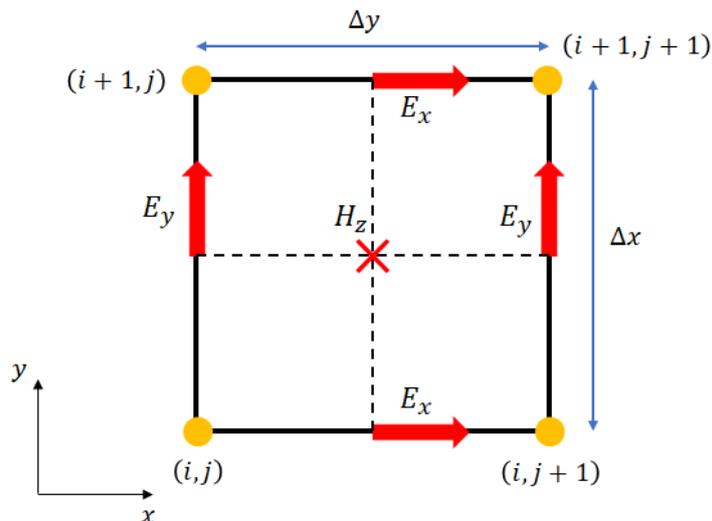


Fig. 2.10. Space relationship between \mathbf{E} and \mathbf{H} in FDTD method. The coordinate (i, j) corresponds to the place $(i\Delta x, j\Delta y)$

以上が時間領域を考慮しない差分化であるが、実際の FDTD 法では時間領域まで拡張した差分化を行っている。そこで、時間領域においても時間ステップ Δt に分け、差分化を行う。

$$E_x^n = E_x(t = t_0 + n\Delta t) \quad (2.3.32)$$

n は繰り返し回数である。したがって、Eq. (2.3.29) は Eq. (2.3.33) のように書き換えることができる。

$$\begin{aligned} & \epsilon_0 \frac{E_x^n(i + \frac{1}{2}, j) - E_x^{n-1}(i + \frac{1}{2}, j)}{\Delta t} \\ &= \frac{H_z^{n-\frac{1}{2}}(i + \frac{1}{2}, j + \frac{1}{2}) - H_z^{n-\frac{1}{2}}(i + \frac{1}{2}, j - \frac{1}{2})}{\Delta y} \end{aligned} \quad (2.3.33)$$

Eq. (2.3.33) より、繰り返し時間 n における電場 E^n は、 $H^{n-\frac{1}{2}}$ と E^{n-1} から求められることが分かる。さらに、Eq. (2.3.31) を時間領域で差分化した式によって、 $H^{n+\frac{1}{2}}$ は、 $H^{n-\frac{1}{2}}$ と E^n から求められる。このように、電場と磁場を交互に逐次解いていくことにより、時間領域においても差分化している。

第3部

FDTD 法によるシミュレーション

3.1 MEEP の設定

フォトニック結晶導波路の局在のシミュレーション画像を出力するため、MEEP という FDTD 法による電磁波シミュレーションを行う、オープンソースアプリケーションを用いた。光源や、構造などの情報を記述したコントロールファイル (.ctl) を MEEP に送ることにより FDTD 計算を逐次行ってくれる。コントロールファイルのプログラミング言語は、C++, python, Scheme がインターフェースとして選択できるが、本研究では Scheme を用いた。なお、構造を記述するためには非常に多くの孔を設置しなくてはならず、かつ様々なパラメータを変えてシミュレーションを行う必要もあるため、Scheme を記述するために C++ を用いている。

また MEEP 上の計算や時間、長さはすべて無単位で、その基準はすべて記述者に委ねられる。今回のシミュレーションにおいて、長さはフォトニック結晶の格子定数 $a = 420 \text{ nm}$ を 1 "MEEP length" としている。これによって時間も規格化され、真空中において光速で 1 "MEEP length" 進むために必要な時間が 1 "MEEP time" と定義される。以下に構造を作成する上で重要となるコマンドを記述しておく。

▷ (set-param! resolution *number*)

計算の分解能を設定している。今回の解析では 15 に設定しており、具体的には $420/15 \text{ nm}$ で 28 nm である。

▷ (set-param! r1 *r*); sigma = Δr

フォトニック結晶の空孔の半径を設定している。"sigma" は半径にランダムな値を加えており、実際の半径は $r - \Delta r \leq r \leq r + \Delta r$ をとる。

▷ (set-geometry (append))

シミュレーション上の構造を設定、配置する。記述した順番に配置していくため、まずは計算領域を定義する。計算領域の定義は geometry-lattice クラスの (make lattice ...) を用いる。

▷ (list ...)

append 内に記述することで、空孔の設置を一挙に行うことが出来る。

▷ (make cylinder (center $x y z$)(radius r)(height h)
(material (make dielectric (epsilon ϵ))))

誘電率 ϵ の円筒を配置する。座標, 半径, 高さを設定することが出来る。

▷ (set! source (list
(make source (src (make gaussian-src (frequency f)(fwidth df)(cutoff cf))
(component E_y)(center $x y z$)(size $X Y Z$))))

光源に関する情報を記述する。ガウシアンパルスの光源を用いる場合は, 中心周波数 (波長) や線幅を定める必要がある。場合によっては強度やカットオフを定めることもできる。代わりに連続波 (CW: continuous wave) を設置することもできる。

▷ (run source+ *time* ...)

シミュレーションの継続時間を run 関数で決定する。上のコマンドの場合, 全ての光源が切れてから "*time*" MEEP time 経過するまで継続する。

上記のコマンドを組み合わせることで FDTD 計算を行う構造を作成する。二次元の誘電体マップを作成した後, 光源を設置しスペクトルを測定したり, 電界分布や光強度分布を出力した。

3.2 計算結果

3.2.1 誘電体マップ

▷ (at-beginning output-epsilon)

以上のコマンドから作成した誘電体マップは, プログラムが開始されて初めに, h5 ファイルとして出力される。誘電体マップは, 白い空孔部分はシリカ (屈折率 $n_{silica} = 1.44$) に, 周りの黒い領域のシリコン (屈折率 $n_{eps} = 2.81$) に見立てている。MEEP 上の計算では比誘電率を用いるため, 屈折率と比誘電率の関係から, 実際に与える定数はこれらの二乗である。真ん中の一列の空孔を取り除き導波路を作成している。そのため, 導波路幅の初期値は $420 \times \sqrt{3} = 727 \text{ nm}$ となる。実際は z 方向にも厚みがあり, シリカのスラブ構造になっているが, 実効屈折率を考えることによって 2 次元計算で近似することが可能である^[31]。これによって計算時間を大幅に短縮できる。

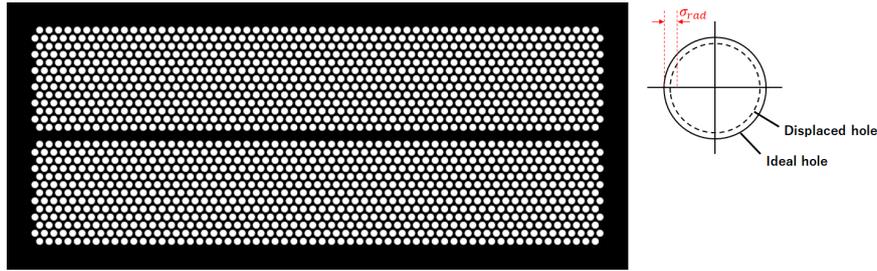


Fig. 3.1. The profile of refractive index of structure. The hole diameter is perturbed by σ_{rad} .

3.2.2 スペクトル測定

次に導波路構造のパラメータを変えながら透過特性を調べた。変化させるパラメータは三つあり，周期長さ (period)，導波路幅 (waveguide width)，そして半径のランダム性 (randomness) である。ガウシアン光源を導波路の左端に設置し，右端に透過してきた光を測定する。光の測定を行うためには "flux-region" を設ける必要がある。

```

> (define object-name
  (add-flux fcen df nfreq)
  (make flux-region (center x y z)(size X Y Z)))

```

このコマンドはオブジェクト名を与えられた周波数領域を設定し，ある場所をシミュレーション終了までに透過する光強度を，与えられた周波数領域で測定する。中心周波数や周波数帯域，周波数分解能を定めることが出来る。(display-fluxes "object-name") でエクセルデータとして出力することが出来る。

Fig. 3.2. は導波路幅のみを変化させた場合の透過スペクトルの推移を比較した結果である。周期構造の長さと半径のランダム性は固定してある。導波路幅が 744 nm の場合のバンドエッジは 1593 nm 辺りであるのに対し，764 nm の場合のバンドエッジは 1610 nm 辺りまで長波長側にシフトしている。この結果から導波路幅が広くなると，透過モードのバンドエッジが長波長側に移動していくことが分かる。また，導波路幅が大きくなるにつれバンドエッジが不明瞭になっている原因としては，モードが長波長側に推移してしまうため，バンドギャップにかぶってしまう周波数帯が多くなるためだと思われる。

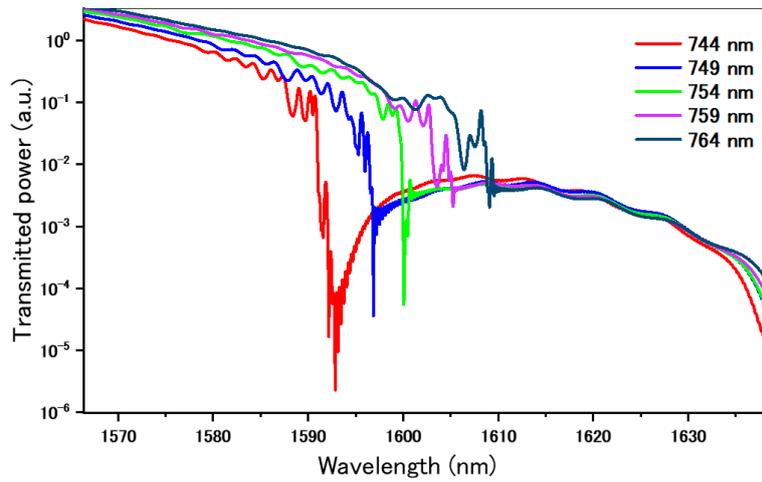


Fig. 3.2. Transmittance spectrum of a PhC waveguide. Waveguide width is changed from 744 nm to 764 nm by 5 nm. The periods of structure is 60 and randomness of hole diameter is 2 nm.

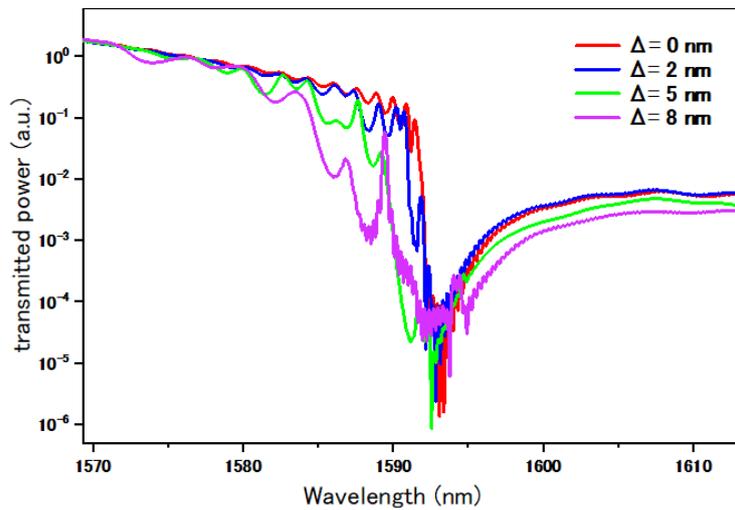


Fig. 3.3. Transmittance spectrum of a PhC waveguide. Randomness is The diameter of holes is changed from 0 nm to 8 nm. The periods of structure is 60 and PCW width is 744 nm.

Fig. 3.3. は半径のランダム性を変化させている。周期構造の長さは $p = 60$ ，導波路幅は 744 nm で固定されている。ランダム性のない赤線と比べ，ランダム性 Δr を大きくするにつれ，透過スペクトルが崩れていることが分かる。これは，導波路を透過する光が構

造の乱れによって散乱されるためである。また $\Delta r = 8 \text{ nm}$ において、 1590 nm あたりに局在が見えている。

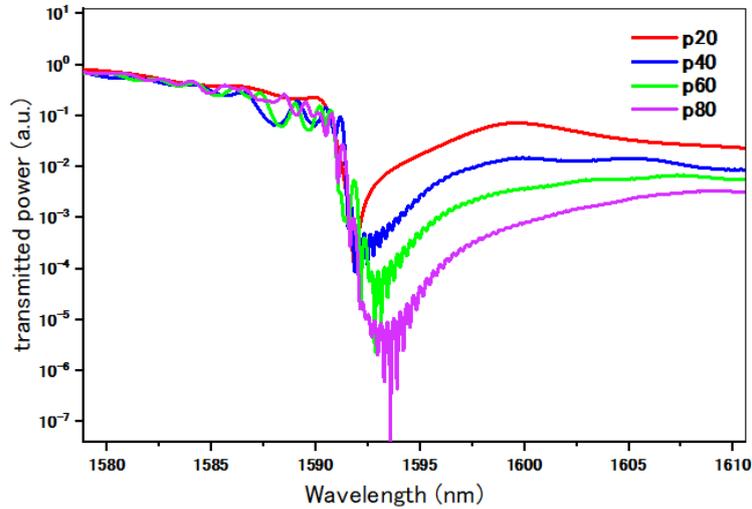


Fig. 3.4. Transmittance spectrum of a PhC waveguide. The period of PCW structure is changed from 20 to 80 by 20 periods. Randomness of hole diameter is 2 nm and PCW width is 744 nm.

Fig. 3.4. は構造長さを変化させ、透過スペクトルを測定した結果である。半径のランダム性は $\Delta r = 2 \text{ nm}$ 、導波路幅は 744 nm で固定されている。この結果から、構造を長くするほどバンドギャップがより深いディップとして見えることが分かる。

3.2.3 プロファイルの出力

シミュレーション中の導波路の電場や磁場の分布を出力するためには、次のコマンドを付け加える。

- ▷ (output-efield-y)
- ▷ (output-hfield-z)

このコマンドにより、電磁界分布データを png 画像として出力することが出来る。このコマンドの前に at-time や at-every をつけることで、ある特定のタイムステップの画像データを出力することができる。また画像データを出力するときは、光源を連続波に変えて行った。連続波では波長の他に、開始時間や励振終了時間などを設定することが出来る。Fig. 3.5. は時間ステップの異なる、電場 E_y と磁場 H_z のプロファイルである。

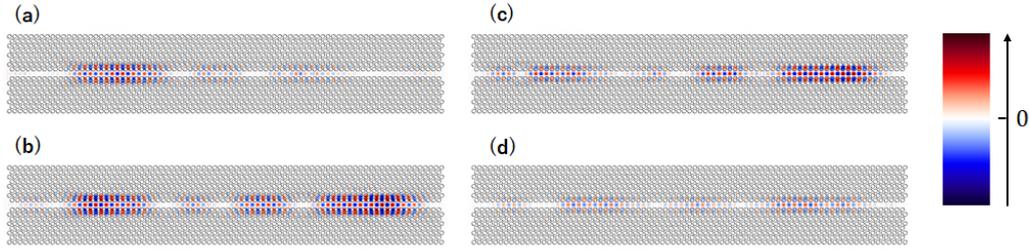


Fig. 3.5. Profiles of waveguide, which has 80 period, 744 nm waveguide width and 4 nm randomness. Light sources of all profiles are excited at 1590.9 nm (a) and (b) are the y component of field E and each is taken 170, 300 MEEP time after light source is off respectively. (c) and (d) are the z component of field H and each is taken 170, 300 MEEP time after light source is off respectively.

半径のランダム性は $\Delta r = 4$ nm, 導波路幅は 744 nm, 構造長さは 80 である. また構造は全て同じものを使っており, 波長も 1590.9 nm で統一している. これは, 透過スペクトルから局在が確認できた波長である. 連続波の光源は導波路構造の左端に設置してある. 強度分布をカラーマップにあてはめるとき, 最も高い強度を基準に規格化するため, 光源が励振させたままプロファイルを取ってしまうと, 全体的に色が薄れてしまう. そのため, 0 から 20000 MEEP time まで励振し続け, 上のようなプロファイルを取得する前に励振を切っている. Fig. 3.5.(a)(b) は E_y , Fig. 3.5.(c)(d) は H_z の強度分布である. また, Fig. 3.5.(a)(c) は励振を切ってから 170 MEEP time, Fig. 3.5.(b)(d) は 300 MEEP time 後に取得している.

この画像を比較すると, 異なる時間の場合, 電場と磁場でエネルギーが偏っている場所が異なっていることが分かった. これは, 電磁波エネルギーを電場と磁場で分け合っており, 時間によってエネルギーの依り方が異なっているからだと考察した. そのため, 次に電磁波エネルギーの強度分布を出力した.

- ▷ (output-tot-pwr)
- ▷ (synchronized-magnetic output-tot-pwr)

上のコマンドは, 純粋に次式を用いて電磁波強度分布を出力する.

$$P_{total}(t) = \frac{1}{2}\epsilon\|E(t)\|^2 + \frac{1}{2}\mu\|H(t - \Delta t/2)\|^2$$

厳密には電場と磁場の値は時間的, 空間的に半ステップずつずれているため, ポインティングベクトルや電磁波強度を算出する場合は, 完全に正確な値ではない. そのため下のコマンドのように, "synchronized-magnetic" を前に加えることによって, その差を小さくすることが出来る. 機能的には $H(t)$ を近似的に求めるために, $H(t - \Delta t/2)$ と $H(t + \Delta t/2)$

の平均をとる。そのため、一つ前の時間の磁界強度を取っておく必要があるため、計算時間が約 1.2 倍ほど伸びた。本研究においては、この二つの方法の間に差は見られなかったため、基本的には上のコマンドを用いた。Fig. 3.6. は電磁波強度分布のプロファイルである。なお構造は Fig. 3.5. と同じである。Fig. 3.6. の (a) と (b) は異なる時間での強度分布だが差はほとんど見られなかった。この結果から、波長分析に用いるデータは電磁界強度分布が良いことが分かった。

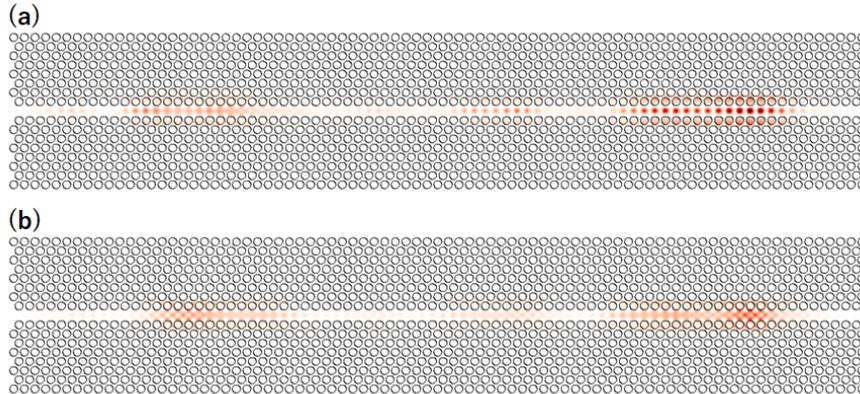


Fig.3.6. Profiles of the total electric and magnetic energy density in waveguide. (a) and (b) are taken 170 and 300 MEEP time after light source is off respectively.

3.3 チャープ導波路における測定

チャープ導波路とは、一定周期ごとに導波路幅を狭めている構造をしている。導波路が狭くなるにつれてバンドギャップが短波長側にシフトすることを利用し、それぞれのセクションで局在のおこる波長が異なる。そのため乱れを加えたチャープ導波路にすることによってより広い波長帯域で局在を観測することが出来る。Fig. 3.7. は、一般的なチャープフォトニック結晶導波路のイメージ図である。チャープフォトニック結晶導波路は、各セクションにおいて散乱する波長が異なるため、波長により光情報を分割する Demux^[32] やパルスの分散を抑えたファイバ^[33] などに応用されている。

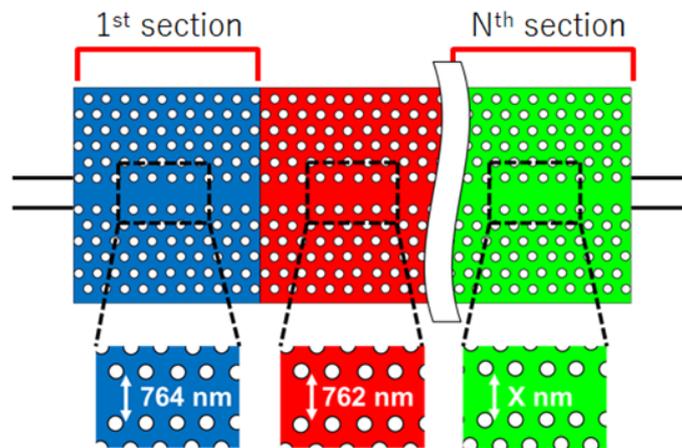


Fig. 3.7. Image of chirp structure. The WG width decreases from left to right. Light is input from the left. As a result, the mode-gap frequency shifts toward a lower frequency as light propagates along the WG, which allows lights with different wavelengths to scatter at different positions. Also, randomness is inherent in this system.

今回のシミュレーションにおいて3セクションのチャープ導波路を作成してシミュレーションを行っており、様々な幅変化でスペクトルを測定した結果、幅 $W = 764, 759, 752 \text{ nm}$ と変化する場合が最も適していると考え、その構造を採用した。Fig. 3.8. はスペクトルの測定結果である。各セクションは40周期で構成されており、半径のランダム性は $\Delta r = 2 \text{ nm}$ である。またスペクトルは、各セクションの左端に光源を設置し、右端まで透過してきた光を測定した結果である。Fig. 3.8. より、導波路幅が変化することでバンドギャップが変化していることが分かる。幅がそれぞれ $764, 759, 752 \text{ nm}$ のセクションでバンドギャップは $1610, 1605, 1600 \text{ nm}$ 辺りで見られる。局在をセクションごとに

正確に分けるためには、バンドギャップがかぶると都合が悪いため、バンドギャップが5 nm ずつ程ずれるように設計している。また Fig. 3.8. の棒グラフはそれぞれの波長での光強度の最大値である。このことから局在によって光の閉じ込めが起きていることが確認でき、それによって電磁波強度の最大値が高い値を取っている。また Fig. 3.9. は局在の起こるセクションの異なる、波長の比較である。この画像はそれぞれの最大値で規格化されているため、電磁波強度の情報は失われている。

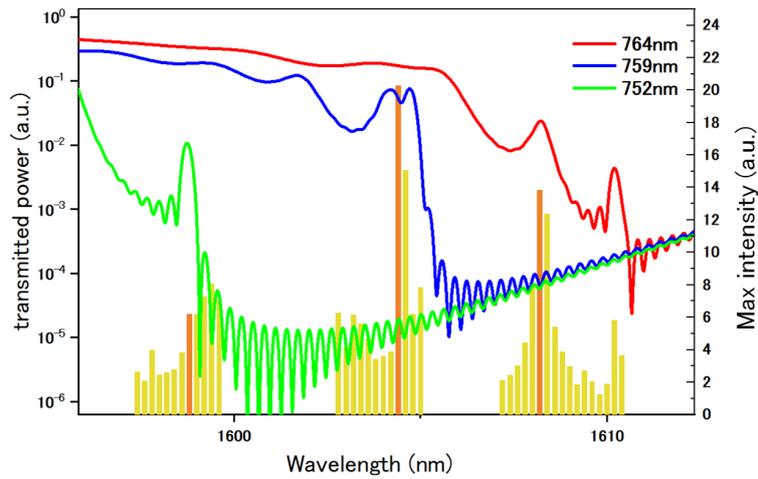


Fig. 3.8. Transmittance spectrum of a PhC waveguide. The width of PCW structure of each section is 764, 759, 752 nm. Randomness of hole diameter is 2 nm. The light source is located at the left end of each section and measure at the right end of each section.

The bar graph represents the maximum of energy density in PCW. The wavelengths in Fig. 3.9. are highlighted.

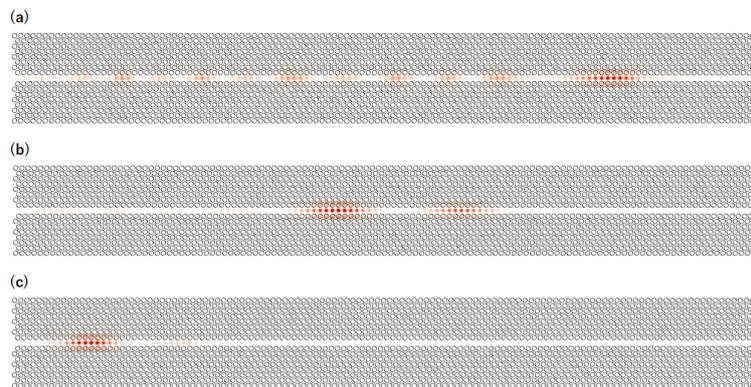


Fig. 3.9. Profiles of chirp PCW. Each wavelength is (a) 1598.8 (b) 1604.4 (c) 1608.2 nm. These intensity are normalized.

3.4 マルチモードの局在の確認

次に構造は同じままで入力光源をマルチモードにした場合のプロファイルを取得した。Fig. 3.10. は、様々な組み合わせを比較した結果である。局在が起きているセクションは色つけて表現している。Fig. 3.10. からマルチモードの入力を入れた場合、局在の起こるセクションが異なる波長では電磁界強度の足し合わせであることが確認できた。また、波長によって局在の強弱が異なるため、複数波長の入力にした場合はその影響が表れていることが分かる。Fig. 3.11. は入力波長が 1604.4 nm と 1608.2 nm における理論的な強度分布と、実際の強度分布を比較したものである。理論的な強度分布とは、二波長による強度分布が、一波長の強度分布の単純な重ね合わせと考えた場合の結果である。Fig. 3.11. において二つのグラフに大きな差は見られなかった。これらの結果から、波長によって局在するセクションが異なる場合は強度の足し合わせであることが確認できた。

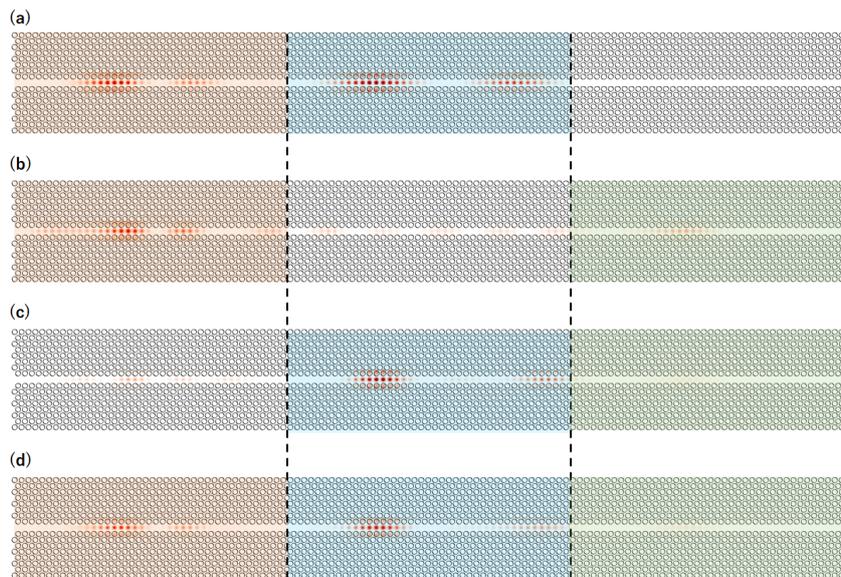


Fig.3.10. Profiles of multiple wavelengths while propagating in chirp PCW. (a) is 1604.4 and 1608.2 nm, (b) is 1598.8 and 1608.2 nm, (c) is 1598.8 and 1604.4 nm, (d) is 1598.8, 1604.4 and 1608.2 nm. These intensity are normalized.

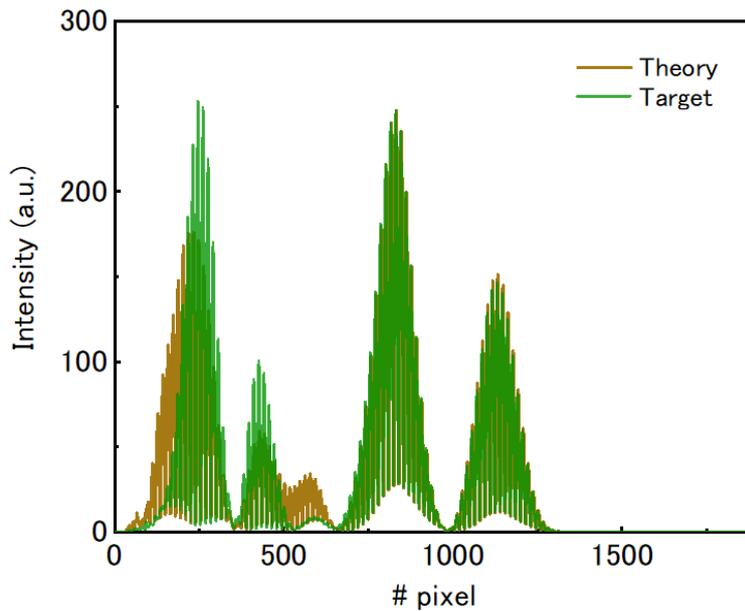


Fig. 3.11. A comparison between target data of two wavelengths input, 1604.4 and 1608.2 nm, versus theoretical result that means superposition of single wavelength datas.

次に同じセクションで局在が起こる，すなわち波長同士があまり離れていない場合を考える．目視で確認しやすくするために，単純な導波路を用いて検証を行った．Fig. 3.12. は二波長を入力とした場合の比較結果である．用いた構造は，幅 $W = 764, 759, 752$ nm で変化するチャープ PCW で，120 の周期構造をもち，空孔の直径に 2 nm のランダム性を持たせている．

下図を含むすべてのシミュレーション画像は最大電磁界強度を基準に規格化されているため，純粋な画像の足し合わせとは異なるが，Fig. 3.12. を見ると，明らかに局在箇所が変化していることが分かる．なお Fig. 3.12.(a) の最大電磁界強度は 6.69 で，(b) の最大電磁界強度は 6.79 であるため，基準はほとんど同じである．Fig. 3.12.(c) の最大電磁界強度は 15.51 である．さらに厳密に考察するために，先ほどと同じような方法で，画像にする前の一波長の電磁波強度分布のデータを足し合わせた理想の結果と，二波長入力 Fig. 3.12.(c) を比較した結果を Fig. 3.13. に示す．

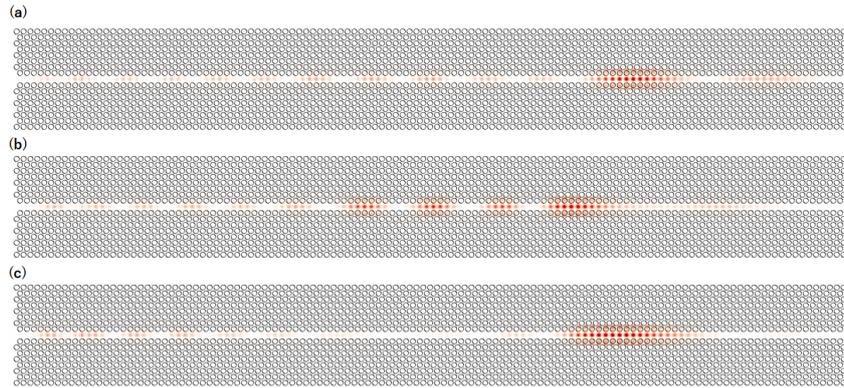


Fig.3.12. Profiles of steady-state electromagnetic-field intensity propagating in chirp PCW. (a) is 1597.8 nm, (b) is 1599.6 nm, (c) is multiple inputs, 1597.8 and 1599.6 nm. These intensity are normalized.

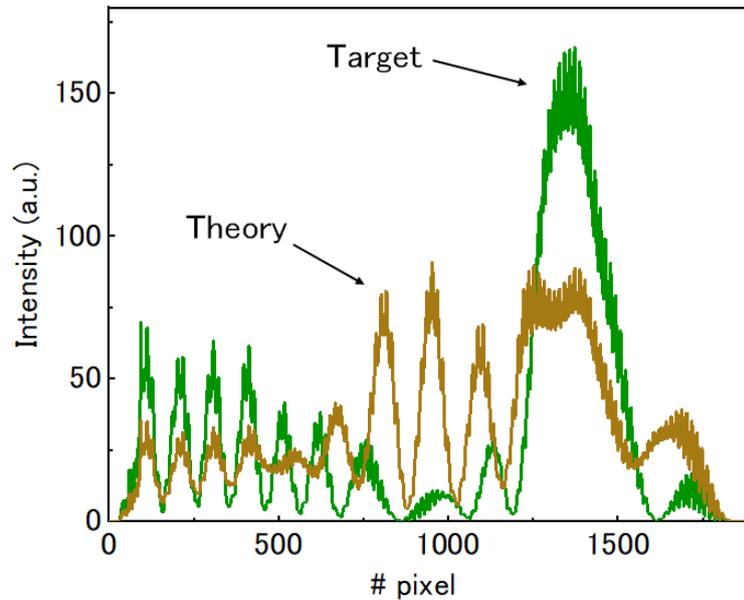


Fig.3.13. A comparison between target data of two wavelengths input, 1597.8 nm and 1599.6 nm, versus theoretical result that means superposition of single wavelength datas.

以上の結果から、局在の領域がかぶっている場合は、単純な一波長入力による電磁波強度分布のデータの足し合わせでは、複数波長の電磁波強度分布を表すことはできないことが分かった。

この原因として考えられるのは、位相による影響である。理論的な単一波長の電磁波強度分布の足し合わせは、ある二つの波長の電場 $E_1 = A_1 \exp(j\phi_1)$ と $E_2 = A_2 \exp(j\phi_2)$ を用いて、 $\varepsilon_0 (A_1^2 + A_2^2) / 2$ で表される。しかし実際の強度は位相の情報が入っており、 $\varepsilon_0 \{A_1^2 + A_2^2 + 2(A_1 A_2 \cos \phi)\}$ で表される。なお、 ϕ は位相差 $\phi_2 - \phi_1$ である。このことから、単純な単一波長の足し合わせでは位相の影響、干渉を考慮していない。一方、実際の結果では位相差 ϕ が強度計算に組み込まれているため、それが影響しているものだと考えられる。先程の結果からも、局在のセクションが異なっている場合は、光の干渉による影響をあまり受けないため、理論と実際の結果がそれほど乖離していなかった。一方、局在のセクションが同じか重なっている場合は、光の干渉による影響が強くなるため、理論と実際の結果が大きくずれてしまっていた。このことから位相による影響は、深層学習や SA で複数波長での分析を行う上で大きな課題となりうる。

第 4 部

深層学習を用いた波長分析

4.1 学習アルゴリズム

第 3 部で出力した導波路の強度分布画像は、波長分析のために使用される。異なる時間において、様々な波長のシミュレーション画像を出力する。今回の学習アルゴリズムの言語は python を使用しており、Anaconda の Spider というエディタを用いた。python の TensorFlow はディープラーニングのための便利なライブラリが多数取り揃えてあり、その中の Keras を用いてネットワーク構築を行っている。波長分析に用いる画像データは、第 3 部にも出てきた導波路の光強度分布データである。それぞれの画像は、波長のデータとラベリングされ、用いる二次元画像データはランダムに 7 : 3 に分けられる。用いられるデータはそれぞれ、取られた時間や強度が異なっているため、それぞれの画像が少しずつ異なっている。7 割はトレーニングデータで残り 3 割はテストデータとなる。二次元データはその波長の情報とともに同じリストに入っている。

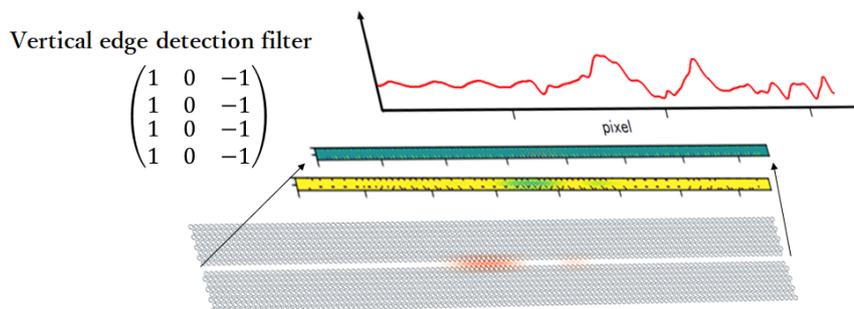


Fig. 4.1. Data processing before deep learning.

Fig. 4.1. は深層学習の前準備の一連の流れを示したイメージ図である。アルゴリズムに落とし込む前に、二次元画像をモノクロにして中央部分を切り抜かれる。導波路部分を切り取った白黒画像は、1 pixel ごとに 0 (黒) から 1 (白) までの値があり、それらがリストに収納されている。そのリストはエッジを検出する行列にかけられる。エッジ検出フィルタとは、水平方向の数値の勾配を検出する画像処理を行うものである。その後、縦方向のピクセルの値の平均を取り、一次元のリストに直される。それによってプログラムの計算時間を飛躍的に削減することが出来る。これらのプロセスによって一次元化されたデー

タは、深層学習のアルゴリズムに投入される。Fig. 4.2. は深層学習のアルゴリズムのイメージ図である。

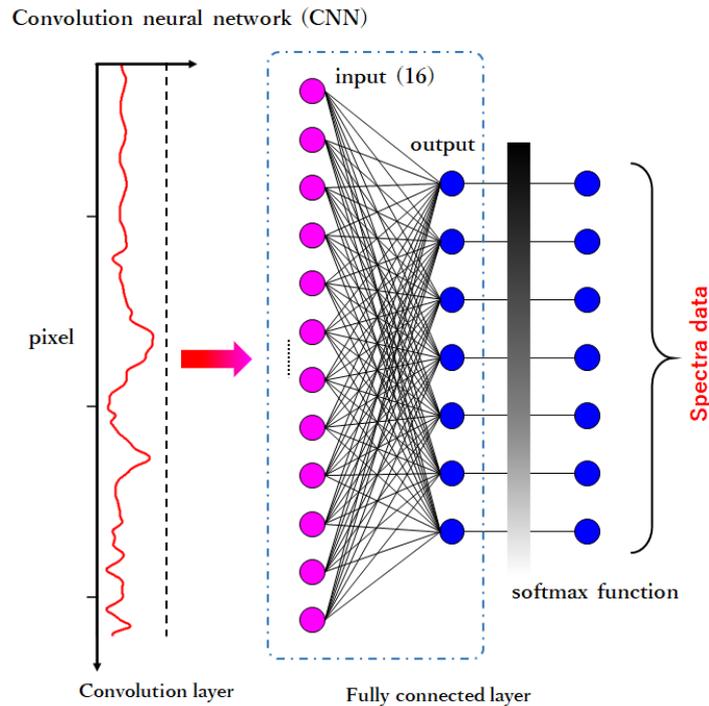


Fig. 4.2. Deep learning algorithm we use for data processing.

学習の前段階として画像を一次元グラフに直した後、そのデータは学習アルゴリズムに用いられる。学習アルゴリズムとしては畳み込みニューラルネットワーク (Convolutional Neural Network: CNN) を使用している。CNN は大きく分けて二つの層があり、一つ目がデータの畳み込みを行う Convolutional layer である。一次元データは画像のピクセルひとつずつが数値となりリストに入っている。Convolutional layer は複数枚のレイヤーが重なり合っており、活性化関数 (Relu) によって繋がっている。レイヤーでは、隣り合った3つのピクセルを一つの特徴量として抽出する。それを繰り返して特徴量の数が16になるまで圧縮する。このように畳み込む利点としては、データを点ではなく領域で特徴をつかむことが出来るため、画像の移動や変形などに堅固になる。また学習コストを削減することが出来る。

Fully connected layer は学習を行い、学習結果を出力する層である。すべての特徴点とアウトプット (波長) は繋がっており、重みがつけられている。出力結果が正解のデータに近くなるように重みを変化させていく。活性化関数は Softmax を用いている。

4.2 学習結果

前述した学習アルゴリズムを用いて入力単一波長の場合の分析を行った。画像の収集は、先ほどのチャープ導波路におけるシミュレーション画像を用いた。波長帯域は、1597.8 ~ 1599.6 nm, 1603.2 ~ 1605.0 nm, 1607.8 ~ 1609.6 nm で波長分解能は 0.2 nm であるため、波長のクラスは 30 である。1 クラスにつき 20 枚のデータを準備したため、計 600 枚のシミュレーション画像を用意した。画像は取得する時間を 10 MEEP time ずつずらすことによって、強度分布に変化を持たせている。計 600 枚の画像データは 480 枚のトレーニングデータと、120 枚のテストデータに分けられて学習が行われる。半径のランダム性が 2 nm の場合と 4 nm の場合で比較を行い、その結果を Fig. 4.3. に示す。

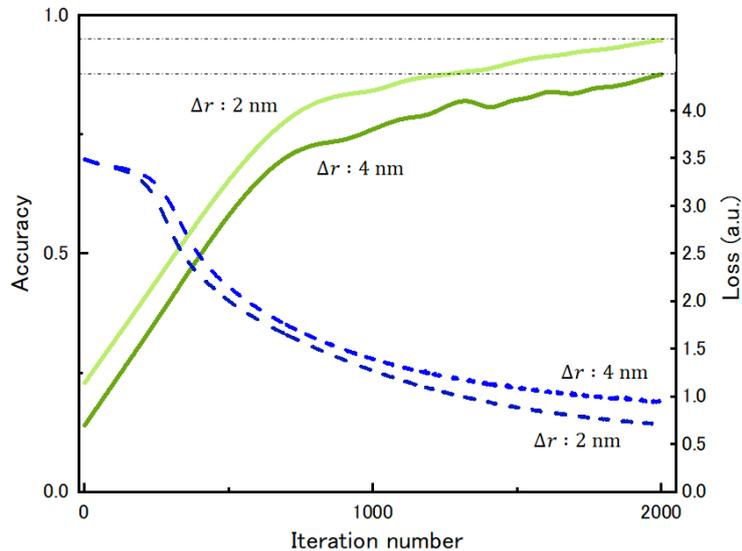


Fig. 4.3. The results of Accuracy and loss function. Solid line represents "Accuracy" and Dashed line represents "Loss" function. The holes diameter are perturbed by 2 nm and 4 nm.

Fig. 4.3. の横軸は学習の試行回数である。実線のグラフは"Accuracy"を表しており、これは学習結果の正答率を表している。また破線のグラフは損失関数"Loss"の推移を表しており、損失関数は一般的に平均二乗誤差で求められる。すなわち、入力 x_n で得られ

た出力 y_n と，実際の答え t_n を用いて次式で与えられる．

$$E = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^N \|t_n - y_n\|^2$$

上式の損失関数の定義から誤答が多いほど，または正解とは大きく外れた値を出力してしまっただけに大きくなるのが分かる． Fig. 4.3. より，学習回数が 2000 においてランダム性が 2 nm の場合は 93 % 程の正答率を記録したことに対し，ランダム性が 4 nm の場合は 80 % 前半にとどまってしまった．このことから，製造誤差が大きいほど正答率が上がるわけではないことが分かった．

次に実際の実験データでの学習を試みた． Fig. 4.4. は実験データの画像である．



Fig. 4.4. Experimental data of PCW.

用いた波長帯域は 1561.5 ~ 1564.5 nm であり，波長分解能は 0.1 nm である．そのため波長クラスは 31 あり，1 クラス 8 枚ずつ用意しており，それぞれ入射光の強度が異なっている．今回の検証はトレーニングデータとテストデータを半分に分けて行った． Fig. 4.5. は学習結果である．このことから，実験結果において 95 nm という高性能な単一波長の分析を行うことが出来た．

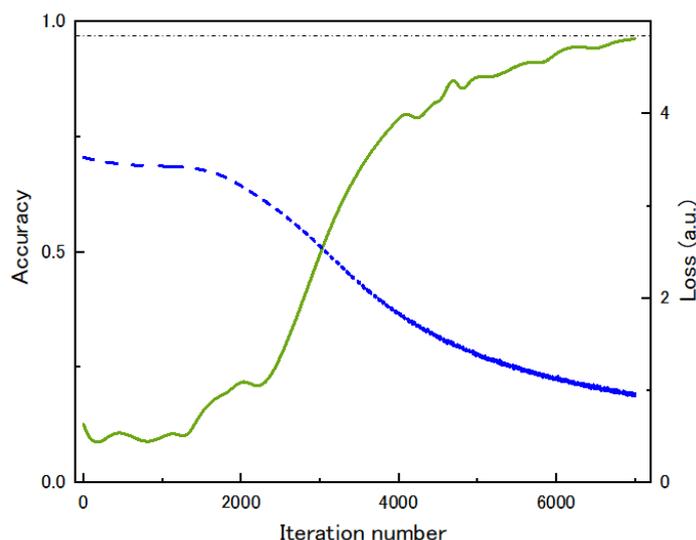


Fig. 4.5. The result of Deep learning algorithm using experimental profiles.

4.3 深層学習による波長分析に関する考察

以上の結果から、シミュレーション画像または実験画像において、単一波長での分析は可能であり、なおかつ高い正答率を記録しうることが分かった。しかし構造ないし空孔の乱れによっては高い正答率が見られないこともあった。さらに同じ構造においても複数回検証を行った場合、正答率が上がってこないこともしばしば見られた。特に、ランダム性が大きい場合 ($\sigma = 8 \text{ nm}$) は正答率が上がらないことが多くなっていた。この原因として考えられるのは、製造誤差による局在が強力になりすぎるため、光がうまく透過できなくなるからだと考えられる。Fig. 4.6. は半径のランダム性が $\sigma = 8 \text{ nm}$ の PCW の電磁波強度のプロファイルである。Fig. 4.6. の (a) と (b) は、それぞれ連続波光源の励振を止めて 200 Meep time と 300 Meep time 後の画像である。これを比較すると、目で確認できるほどの変化が起きていることが分かる。これは導波路手前の局在が強すぎるために、励振を切った後も残り続け、残った光が遅れて導波路構造の奥側に透過していくため、その変化が見て取れるからだと考えられる。またこの構造での学習結果を Fig. 4.7. に示しておく。波長帯域は $1588.6 \sim 1591.0 \text{ nm}$ で波長分解能は 0.1 nm である。そのため波長クラスは 25 である。すなわち Fig. 4.7. における正答率は 4% であるため、ランダムなまままで学習が出来ていないことが分かる。

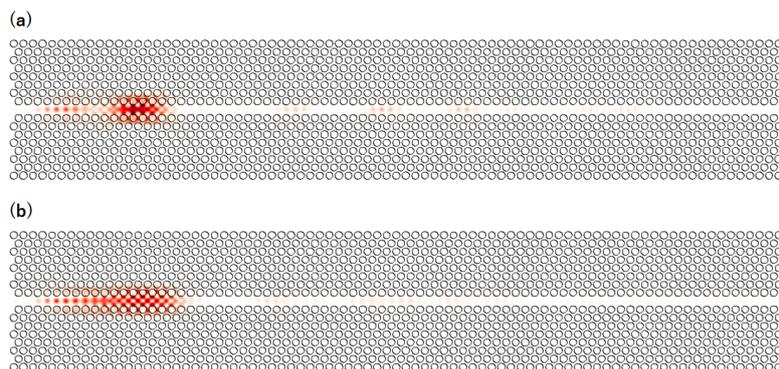


Fig. 4.6. The profiles of PCW perturbed by $\sigma = 8\text{nm}$. (a) and (b) are taken 200 and 300 MEEP time after light source is off respectively.

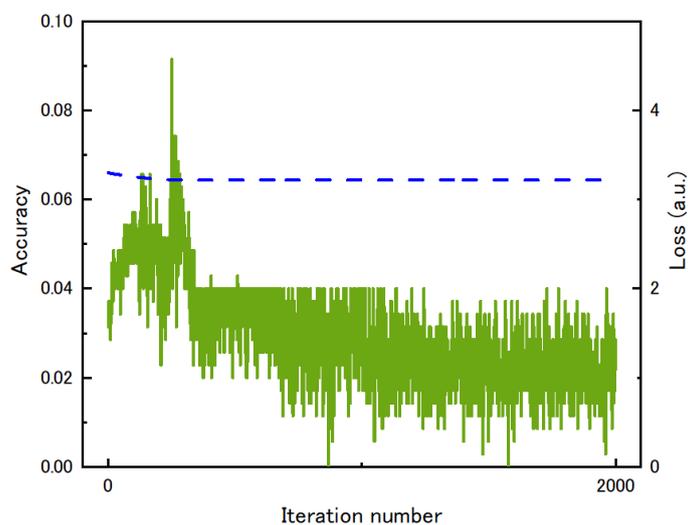


Fig. 4.7. The result of Deep learning with Fig. 4.6. structure. The number of class is 25, so the result is absolutely random.

また、深層学習による波長分析の一番の課題は、複数波長やブロードバンドなスペクトルの解析である。深層学習のシステム上、出力するためにはクラスをそれぞれ作らなければならないため、複数波長では出力するクラスが組み合わせ式で爆発的に増えていく。波長によって強度が異なっている場合や、より多くの波長の解析には膨大な計算量がかかるため、並みのコンピュータでは動作が困難となる。それでは初期に設定していたゴールにたどり着くのは難しいため、アルゴリズムの模索が必要となる。

第 5 部

最適化アルゴリズムを用いた波長分析

5.1 焼きなまし法のアルゴリズム

焼き鈍し法 (Simulated Annealing: SA) とは広域での最適解を見つけるためによく用いられるアルゴリズムである。金属のような物質を融解するまで熱を加え、徐々に冷却することをアニーリングというが、SA はそのような物理現象から着想を得ている。一般的に最適化アルゴリズムは、ターゲットに最も近くなる最適解、即ちコスト関数が小さくなる方向に向けて、パラメータを逐一変化させていく。一方 SA ではシステム温度というものが定義されており、温度が高いときはコストが悪化する変化でも受け入れることで広域での探索を行う。システム温度はゆっくりと冷まされていくため、コストが悪化する変化を次第に受け入れなくなる。すなわち局所での探索を行うことになる。この特性から SA は、他の最適化アルゴリズムに比べて局所解に捕捉される問題が起こりにくく、広域での最適解を求めることに向いている。しかし SA による結果は温度に関するパラメータに非常に敏感であるため、チューニングが難しく、最適解を得るのに計算量も多くなる。Fig. 5.1. は SA アルゴリズムの模式図である。

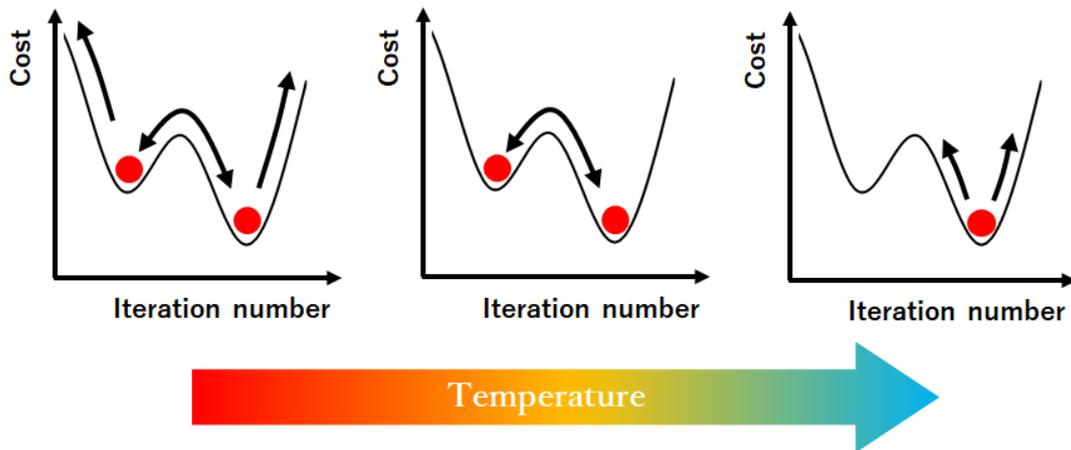


Fig. 5.1. Schematic image of simulated annealing algorithm.

SA のフローチャートを Fig. 5.2. に示す。まず初めに温度を含めたパラメータの初期設定を行う。SA の最終目標はコストが最も小さくなる最適解を見つけることであるため、

これらのパラメータは SA アルゴリズムに則り変化していく。

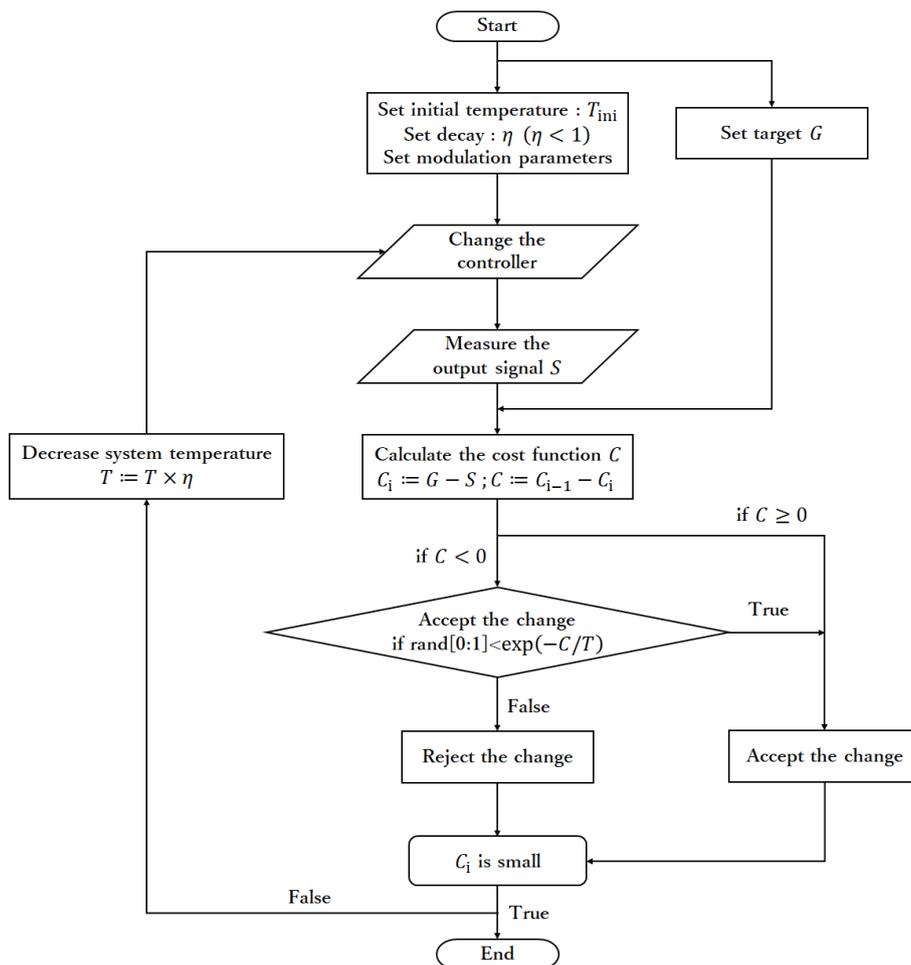


Fig. 5.2. Flowchart of a simulated annealing algorithm.

Fig. 5.2. においてコスト関数は C_i と定義されており、ターゲットとの差 $G - S$ を表している。 i はイテレーションの回数である。その後、パラメータを変える前 C_{i-1} と後 C_i の差 C を算出する。つまり C が 0 を下回ると、パラメータが改悪されたことになる。 $C \geq 0$ の場合はパラメータが改善されているため、そのような変化は全て受け入れられる。一方 $C < 0$ の場合は全てがリジェクトされるわけではなく、一定の確率で受け入れられパラメータが改悪される。これが焼きなまし法の特徴でもある。パラメータの改悪はシステム温度 T が高いほど起こりやすく、その基準は、

$$A = \exp\left(-\frac{T}{C}\right)$$

で与えられる。0 から 1 までの範囲からランダムに選ばれた値と基準となる A を比較し、

その値よりも A が上回っていた場合は、改悪する変化も許容する。またシステム温度が高いだけでなく、改悪の度合いが小さいほど起こりやすくなることも、上式からいえる。システム温度はアルゴリズムを繰り返すたびに温度は低くなるため、改悪となる変化は起こりにくくなる。

5.2 SA による波長の分析結果

上記のアルゴリズムを用いて、まずは単一波長での分析を行った。用いた構造は深層学習でも用いたチャープ構造で、幅が 764 nm, 759 nm, 752 nm で変化している。また空孔の穴径に $\sigma = 2$ nm のランダム性を付与している。Fig. 5.3. は様々な単一波長入力における SA アルゴリズム解析による結果である。システムのパラメータは統一しており、初期温度は 5×10^5 であり減数係数は 0.9995 である。波長帯域は 1597.8 ~ 1599.6 nm, 1602.4 ~ 1605.0 nm, 1607.2 ~ 1609.6 nm で波長分解能は 0.2 nm である。

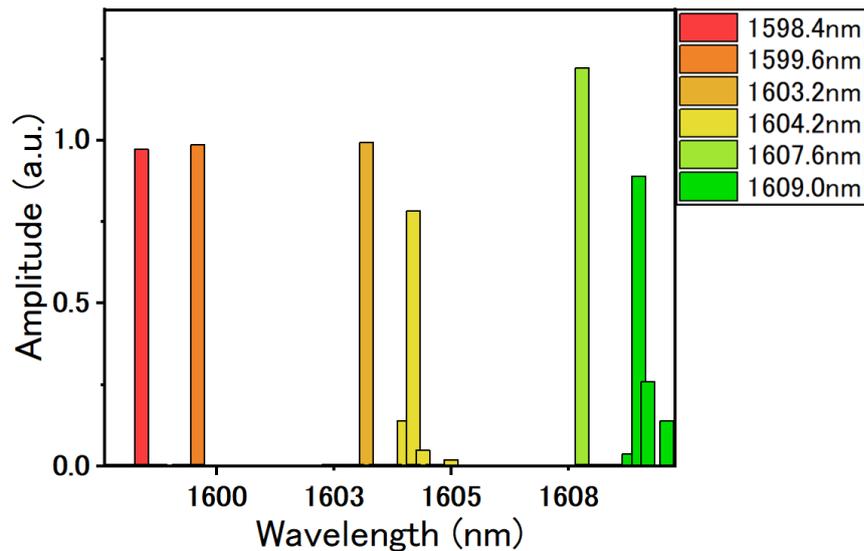


Fig. 5.3. Spectrum coefficients obtained with SA. The light input is simple wavelength.

Fig. 5.3. より、単一波長のスペクトル再構築は確認できた。また長波長側の分析よりも短波長側の方がより精度が高くなる傾向があった。この要因として考えられるのは、波長が短いほどより構造の奥まで透過するため、光強度分布の情報をより多く保持しているからだと思われる。長波長の場合は構造の手前側で散乱するため、そこまでの強度分布しか

抜き出すことが出来ない。

次に異なるセクションで局在の起こる二波長を入力として用いた場合のスペクトル再構築を行った。Fig. 5.4. にその結果を示す。なお光源の強さは全て一定である。

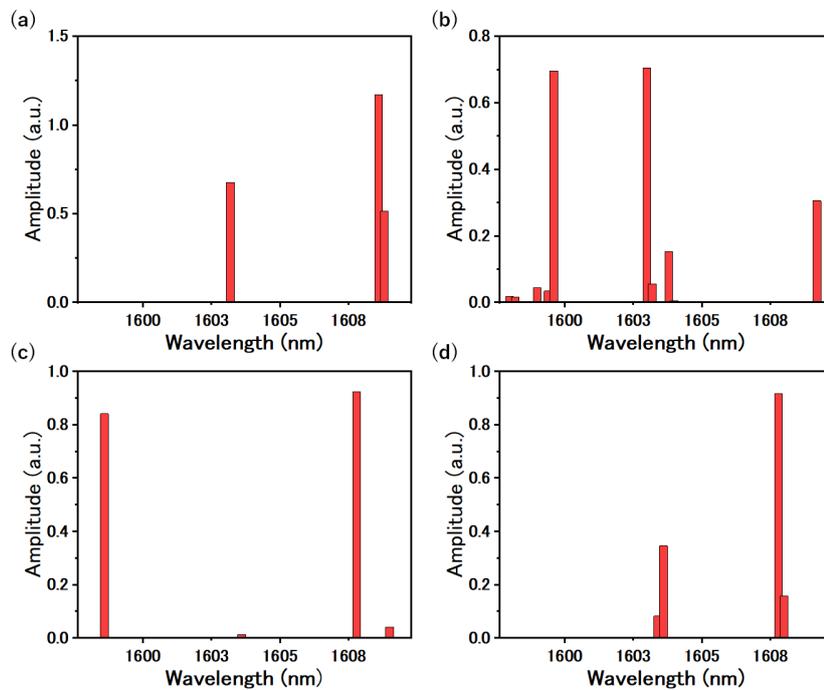


Fig. 5.4. Spectrum coefficients obtained with SA. The inputs are two wavelengths. (a) Inputs are 1603.2 nm and 1608.8 nm. (b) are 1599.6 nm and 1603.0 nm. (c) are 1598.6 nm and 1607.8 nm. (d) are 1603.6 nm and 1607.4 nm

Fig. 5.4. より二波長入力の場合でも、局在するセクションが異なる場合はスペクトル再構築が可能であった。これは第三部でも述べた通り、波長が離れてる場合は強度分布が単純な足し合わせとみなすことが出来るため、最適化アルゴリズムで再構築が可能であった。次に局在が同じセクションで起きている場合に再構築が可能であるか検証した。Fig. 5.5. にその結果をまとめた。

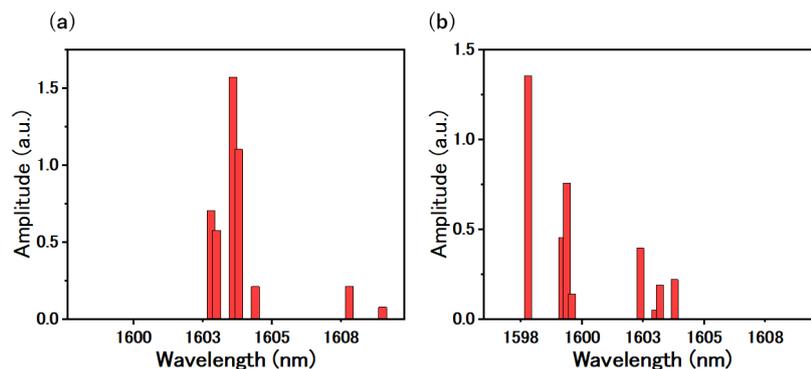


Fig. 5.5. Spectrum coefficients obtained with SA. The inputs are two wavelengths and localization occurs in same section. (a) Inputs are 1603.0 nm and 1603.6 nm. (b) are 1597.8 nm and 1599.4 nm.

以上の結果は同じセクションでスペクトル構築が成功した例である。しかし同じセクションで局在が起こる二波長入力のスペクトル再構築はうまくいかないことも多く、パラメータを変えて行ってもうまく動作するようになることもあまり見られなかった。その原因として考えられる要因としては、光局在の強弱によるものと、局在がかぶることによる影響が考えられる。まず光局在の強弱による影響を考察するために、強い局在が起こる波長と起こらない波長を同時に入力する場合を考える。Fig. 5.6. は強い局在が起こる1607.6 nm と起こっていない1608.0 nm を入力光として入れ、スペクトル再構築を行った結果である。

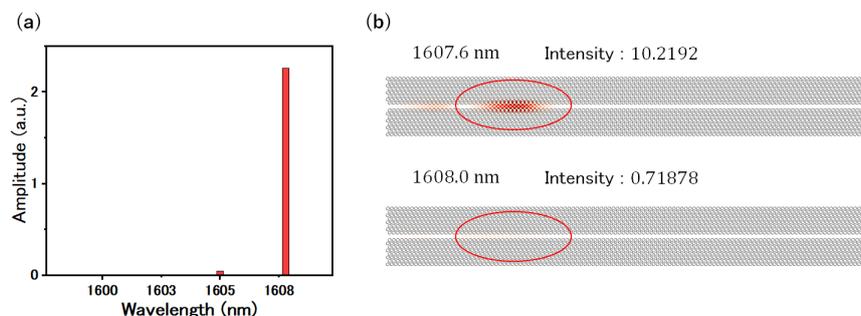


Fig. 5.6. (a) Spectrum coefficients obtained with SA. The inputs are two wavelengths and localization occurs in same section. Inputs are 1607.6 nm and 1603.6 nm. (b) Comparison of the profile of these two wavelengths.

Fig. 5.6.(a) から、1608.0 nm の波長しか再構築できていないことが分かる。また、振幅が元の2倍の値を取っている。Fig. 5.6.(b) から二つの局在位置は重なっていることも確認できた。このことから、局在の強弱が異なり、位置がかぶっている場合は、一方の

波長しか観測されず，振幅を変化させることでコストを下げる動作をしていることが分かった。

次に波長分解能について考察するために，ある波長 1599.4 nm を固定し，もう一方の波長を 1597.8 nm から 1599.2 nm の範囲を 0.2 nm ずつずらして再構築を行った．なおすべての場合でパラメータは変化させず，初期温度は 5×10^6 ，減衰係数は 0.997 である．まず初めにうまくいかなかった結果を Fig. 5.7. に示す．

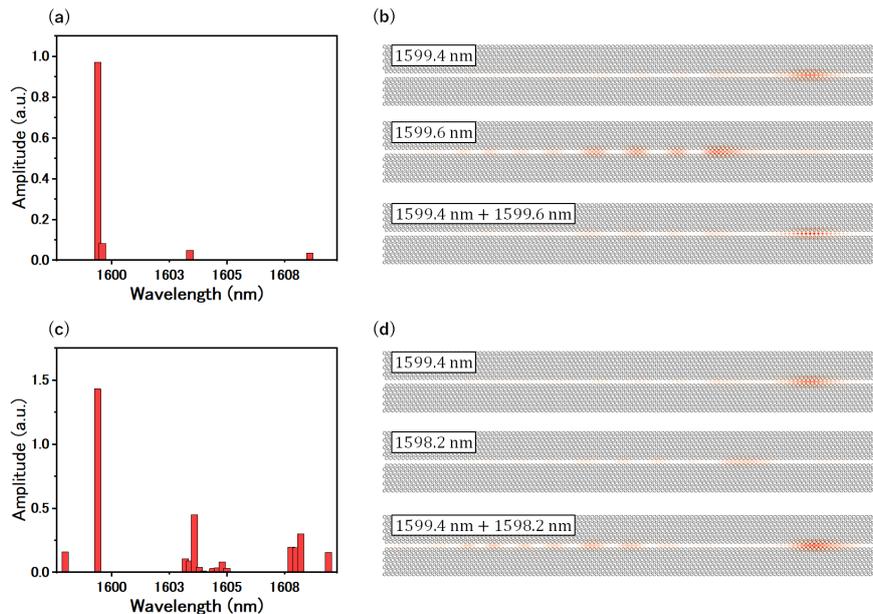


Fig. 5.7. Spectrum coefficients obtained with SA and profiles. (a)(b) Inputs are 1599.4 nm and 1599.6 nm. (c)(d) Inputs are 1599.4 nm and 1598.2 nm.

9通りの組み合わせを行った中で，うまく再構築できなかったパターンは上の2通りだけであった．Fig. 5.7.(a)(b)は1599.4 nmと1599.6 nmという，波長が0.2 nmしかずれていない場合である．このとき，1599.4 nmの成分しか再構築できなかったが，画像を見ると1599.6 nmの強度分布の情報は，足し合わせられる中でほとんど失われていることが分かる．これは波長が近いために干渉が起きてしまったためだと考えられる．Fig. 5.7.(c)(d)は1599.4 nmと1598.2 nmの検証結果である．これらの画像からも1598.2 nmの強度分布の情報が失われていることが分かる．この二つの波長はある程度離れているため，干渉による影響はさほどないと考えられるが，1598.2 nmの局在が弱いため，1599.4 nmの方により大きいピークが立っているものだと考えられる．次にうまくいった組み合わせを Fig. 5.8. に示す．

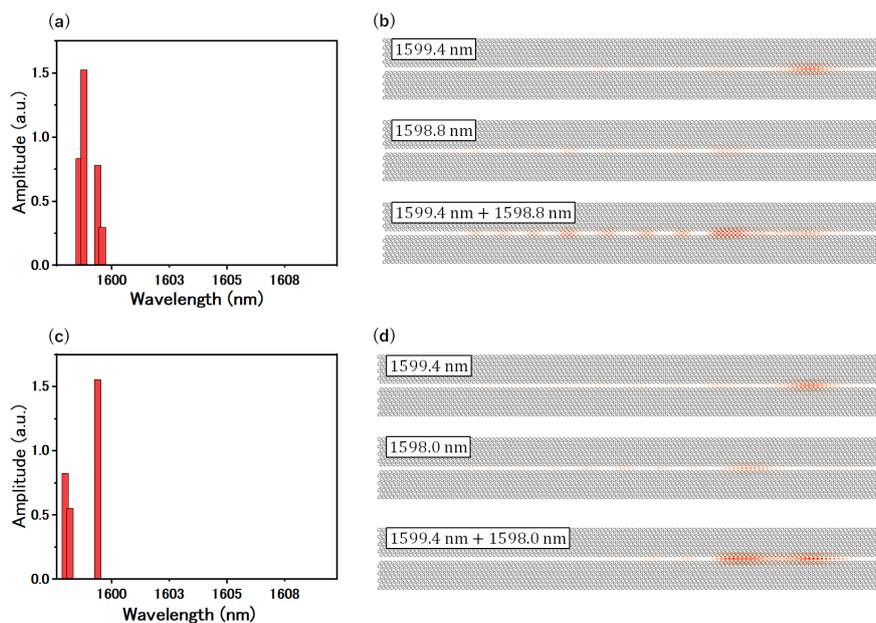


Fig.5.8. Spectrum coefficients obtained with SA and profiles. (a)(b) Inputs are 1599.4 nm and 1598.8 nm. (c)(d) Inputs are 1599.4 nm and 1598.0nm.

Fig. 5.8. に示された 2 例は、スペクトル再構築の成功例である。右の画像からもわかるように、局在の箇所が足し合わされていることが確認できる。そのため SA による再構築が可能であった。

以上のことから、局在が起きるセクションが異なっている場合はスペクトル再構築が可能であった。また局在がおきるセクションが同じ場合でも、局在の箇所が異なっている場合は単純な足し合わせになるため、スペクトル再構築が可能だった。しかし位相の干渉によって強度分布が大きく変わる場合や、互いの強度分布の強弱に差がある場合は有効でないことが分かった。

第6部

結論

本論文では、フォトニック結晶を用いた分光器の高性能化を目指すため、深層学習や最適化アルゴリズムのようなソフトウェアやプログラミングを組み込む手法を提案した。さらにフォトニック結晶の理想特性を失う要因となる、製造誤差による光局在を逆に活用することによって、製造誤差による影響を吸収している。

単一波長の分析は深層学習と最適化アルゴリズムの両方を用いて確認し、正確に動作することが確認できた。しかし複数波長における分析はどちらともに課題がある。深層学習による複数波長の分析には、非常に多くの出力のクラスが必要となるため、計算量が膨大となる。最適化アルゴリズムでは、干渉による光強度分布の変化が大きな課題となっていた。また、局在の強弱も分解能に影響を及ぼすことが分かった。

また、深層学習と最適化アルゴリズムには決定的な違いがある。それは最適化アルゴリズムはあるターゲットが入ってくるごとに計算を行うため、スペクトル再構成に毎回時間がかかることである。一方深層学習によるアプローチでは、一回学習させることが出来れば、スペクトル再構築は短時間で可能となる。そのためこれからの研究は、深層学習の課題克服に尽力していく。

深層学習によるスペクトル再構築が可能になり、このような分光器が有効となれば、微小サイズで低コストでかつ高分解能な分光器の手法として、分光器のさらなる普及に貢献できると信じている。

参考文献

- [1] J. Zou, F. Zhao, and R. T. Chen, “High-performance dense wavelength division multiplexer based on blazed grating and ion-exchanged glass wave guide technique,” in “Photonic Integrated Systems,” , vol. 4998 A. R. Pirich, P. L. Repak, R. T. Chen, J. C. Chon, L. A. Eldada, A. R. Pirich, P. L. Repak, R. T. Chen, J. C. Chon, and L. A. Eldada, eds., International Society for Optics and Photonics (SPIE, 2003), vol. 4998, pp. 194 – 201.
- [2] D. Komisarek, K. Reichard, D. Merdes, D. Lysak, P. Lam, S. Wu, and S. Yin, “High-performance non-scanning fourier-transform spectrometer that uses a wolaston prism array,” *Appl. Opt.* **43**, 3983–3988 (2004).
- [3] H. Zhao, S. Shi, X. Gu, G. Jia, and L. Xu, “Integrated system for auto-registered hyperspectral and 3d structure measurement at the point scale,” *Remote Sensing* **9**, 512 (2017).
- [4] B. I. Akca, “Design of a compact and ultrahigh-resolution fourier-transform spectrometer,” *Opt. Express* **25**, 1487–1494 (2017).
- [5] A. Herrero-Bermello, A. V. Velasco, H. Podmore, P. Cheben, J. H. Schmid, S. Janz, M. L. Calvo, D.-X. Xu, A. Scott, and P. Corredera, “Temperature dependence mitigation in stationary fourier-transform on-chip spectrometers,” *Opt. Lett.* **42**, 2239–2242 (2017).
- [6] M. C. M. M. Souza, A. Grieco, N. C. Frateschi, and Y. Fainman, “Fourier transform spectrometer on silicon with thermo-optic non-linearity and dispersion correction,” *Nature Communications* **9**, 665 (2018).
- [7] F. G. Della Corte, M. Esposito Montefusco, L. Moretti, I. Rendina, and G. Corullo, “Temperature dependence analysis of the thermo-optic effect in silicon by single and double oscillator models,” *Journal of Applied Physics* **88**, 7115–7119 (2000).
- [8] M. R. Escalé, D. Pohl, M. Madi, P. Brotzer, F. Kaufmann, A. Sergeyev, U. Meier, E. Alberti, and R. Grange, “Integrated electro-optic spectrometers on thin-film lithium niobate,” in “Conference on Lasers and Electro-Optics,” (Optical Society of America, 2019), p. SF2J.4.
- [9] S. G. Johnson, P. R. Villeneuve, S. Fan, and J. D. Joannopoulos, “Linear waveg-

- guides in photonic-crystal slabs,” *Phys. Rev. B* **62**, 8212–8222 (2000).
- [10] A. Mekis, J. C. Chen, I. Kurland, S. Fan, P. R. Villeneuve, and J. D. Joannopoulos, “High transmission through sharp bends in photonic crystal waveguides,” *Physical Review Letters* **77**, 3787–3790 (1996).
- [11] S. G. Johnson, S. Fan, P. R. Villeneuve, J. D. Joannopoulos, and L. A. Kolodziejski, “Guided modes in photonic crystal slabs,” *Phys. Rev. B* **60**, 5751–5758 (1999).
- [12] E. Parra and J. R. Lowell, “Toward applications of slow light technology,” *Opt. Photon. News* **18**, 40–45 (2007).
- [13] B. Ellis, M. A. Mayer, G. Shambat, T. Sarmiento, J. Harris, E. E. Haller, and J. Vuckovic, “Ultralow-threshold electrically pumped quantum-dot photonic-crystal nanocavity laser,” *Nature Photonics* **5**, 297–300 (2011).
- [14] T. A. Ibrahim, R. Grover, L. C. Kuo, S. Kanakaraju, L. C. Calhoun, and P. T. Ho, “All-optical and/nand logic gates using semiconductor microresonators,” *IEEE Photonics Technology Letters* **15**, 1422–1424 (2003).
- [15] T. J. Kippenberg, R. Holzwarth, and S. A. Diddams, “Microresonator-based optical frequency combs,” *Science* **332**, 555–559 (2011).
- [16] Y. Akahane, T. Asano, B.-S. Song, and S. Noda, “High-q photonic nanocavity in a two-dimensional photonic crystal,” *Nature* **425**, 944–947 (2003).
- [17] Y. Ooka, T. Tetsumoto, A. Fushimi, W. Yoshiki, and T. Tanabe, “Cmos compatible high-q photonic crystal nanocavity fabricated with photolithography on silicon photonic platform,” *Scientific Reports* **5**, 11312 (2015).
- [18] K. Nozaki, S. Matsuo, T. Fujii, K. Takeda, A. Shinya, E. Kuramochi, and M. Notomi, “Femtofarad optoelectronic integration demonstrating energy-saving signal conversion and nonlinear functions,” *Nature Photonics* **13**, 454–459 (2019).
- [19] Z. Xia, A. A. Eftekhar, M. Soltani, B. Momeni, Q. Li, M. Chamanzar, S. Yegnanarayanan, and A. Adibi, “High resolution on-chip spectroscopy based on miniaturized microdonut resonators,” *Opt. Express* **19**, 12356–12364 (2011).
- [20] X. Gan, N. Pervez, I. Kyriassis, F. Hatami, and D. Englund, “A high-resolution spectrometer based on a compact planar two dimensional photonic crystal cavity array,” *Applied Physics Letters* **100**, 231104 (2012).
- [21] A. C. Liapis, B. Gao, M. R. Siddiqui, Z. Shi, and R. W. Boyd, “On-chip spectroscopy with thermally tuned high-q photonic crystal cavities,” *Applied Physics*

- Letters **108**, 021105 (2016).
- [22] B. Wild, R. Ferrini, R. Houdr 迺, M. Mulo, S. Anand, and C. J. M. Smith, “Temperature tuning of the optical properties of planar photonic crystal microcavities,” *Applied Physics Letters* **84**, 846–848 (2004).
- [23] B. Redding, S. F. Liew, R. Sarma, and H. Cao, “Compact spectrometer based on a disordered photonic chip,” *Nature Photonics* **7**, 746–751 (2013).
- [24] D. Gerace and L. C. Andreani, “Disorder-induced losses in photonic crystal waveguides with line defects,” *Opt. Lett.* **29**, 1897–1899 (2004).
- [25] M. Minkov and V. Savona, “Automated optimization of photonic crystal slab cavities,” *Scientific Reports* **4**, 5124 (2014).
- [26] M. Minkov, U. P. Dharanipathy, R. Houdr 迺, and V. Savona, “Statistics of the disorder-induced losses of high-q photonic crystal cavities,” *Opt. Express* **21**, 28233–28245 (2013).
- [27] M. D. Levenson, N. S. Viswanathan, and R. A. Simpson, “Improving resolution in photolithography with a phase-shifting mask,” *IEEE Transactions on Electron Devices* **29**, 1828–1836 (1982).
- [28] P. D. Garc ıa, G. Kirsanske, A. Javadi, S. Stobbe, and P. Lodahl, “Two mechanisms of disorder-induced localization in photonic-crystal waveguides,” *Physical Review B* **96**, 144201 (2017).
- [29] L. Sapienza, H. Thyrestrup, S. Stobbe, P. D. Garcia, S. Smolka, and P. Lodahl, “Cavity quantum electrodynamics with anderson-localized modes,” *Science* **327**, 1352–1355 (2010).
- [30] T. Baba, “Slow light in photonic crystals,” *Nature Photonics* **2**, 465–473 (2008).
- [31] M. Qiu, “Effective index method for heterostructure-slab-waveguide-based two-dimensional photonic crystals,” *Applied Physics Letters* **81**, 1163–1165 (2002).
- [32] Y. Ooka, T. Tetsumoto, N. A. B. Daud, and T. Tanabe, “Ultrasmall in-plane photonic crystal demultiplexers fabricated with photolithography,” *Opt. Express* **25**, 1521–1528 (2017).
- [33] J. S. Skibina, R. Iliew, J. Bethge, M. Bock, D. Fischer, V. I. Beloglasov, R. Wedell, and G. Steinmeyer, “A chirped photonic-crystal fibre,” *Nature Photonics* **2**, 679–683 (2008).