

GAを用いた偏光変換機能を有するナノ構造光学素子の設計最適化

Optimizing Design of Nanophotonic Polarization Control Element using Genetic Algorithm

嶺脇 隆邦* 三宮 俊**
Takakuni MINEWAKI Suguru SANGU

要 旨

光の波長より小さい金属微細周期構造を持つ「ナノ構造光学素子」は、近接場光の現象を利用して従来にない光機能を発現することができる反面、金属と光の相互作用が複雑で設計が難しいとされてきた。本研究では、FDTD法による計算機シミュレーションと遺伝的アルゴリズム（GA）による最適化を用いて高効率な偏光変換機能を持つ光学素子設計を行った。円形状を初期値とした金属単位構造は、最適化により2つの鋭い端部と滑らかな輪郭構造を持つ特徴的な形状に収束した。この結果により、本設計手法の有効性を示した。

ABSTRACT

We present an efficient designing process of nano-photonic polarization control elements using Genetic Algorithm (GA). Photonic nanostructures, which have a periodic metallic pattern pitching smaller than light wavelength, can produce unique optical functions such as polarization transformation by the near-field light effect. Because of the complex interaction between the light and metal, it is essentially difficult to optimize the nanostructure, thus no systematic design procedure is currently in operational. To tackle this problem, we utilize the finite-difference time-domain (FDTD) method to simulate and evaluate the polarization transformation efficiency and apply GA to optimize it. To drive the GA optimization procedure, a periodic 2D nanostructure is deformed by mutation. Started from a circular shape, the metallic pattern comes into a specific shape, which has two sharp tips and smooth S-shape outline curve. The optimization procedure takes approximately 20 days to reach a local minimum. Experiment results show efficacy of the proposed design procedure based on FDTD and GA.

* 研究開発本部 基盤技術開発センター

Core Technology Development Center, Research and Development Group

** 研究開発本部 機能デバイス技術開発センター

Device Technology Development Center, Research and Development Group

嶺脇隆邦、三宮俊: GAを用いた偏光変換機能を有するナノ構造光学素子の設計最適化、進化計算学会論文誌, Vol.4, No.1, pp.38-45 (2013). 本著作物の著作権は進化計算学会に帰属します。著作権者である進化計算学会の許可のもとに掲載するものです。

1. はじめに

カメラレンズ、光ディスク（CD / DVD / BD）用ピックアップ、液晶ディスプレイ等、光学素子は我々のまわりで数多く利用されている。機器の小型化・高集積化に伴い、平面ならびに光学素子表面における光機能の実現が期待されている¹⁾。近年の微細加工技術の進展によって、半導体プロセスに準拠した光の波長より小さいサブ波長構造（Sub Wavelength Structure: SWS）を用いた光学素子の開発が盛んに行われている。例えば、回折現象を利用して望みの光学機能を実現する機能素子、偏光ビームスプリッタ（PBS）や集光レンズなどがあげられる²⁾。

このような「平板型光学素子」は、基板表面に設けたナノサイズの構造体により機能を発現しており、幾何光学における波長を無限小とする近似が成り立たない。したがって、Maxwell方程式を純粹に解く必要があり、最適設計が大きな課題となる。

本研究では、金属微細構造を用いた「ナノ構造光学素子」に着目し、その設計最適化を検討する。ナノ構造光学素子では、「近接場光」を介在した金属中の電子と光の共鳴的な相互作用の結果、ナノ構造に起因した大きな変調効果が得られ、従来の光機能を微小体積で実現したり、従来実現できなかった機能を実現したりできる³⁻⁵⁾。一方で、金属材料および形状に依存した自由度の増加により、最適設計の難易度は高くなる。具体的には、ナノ構造光学素子による偏光変換機能の実現を目指す。

自由度が高く非線形な特性を持つ対象にも適用が可能とされる、遺伝的アルゴリズム（Genetic Algorithm: GA）を最適化手法として適用する⁶⁾。これによって、偏光変換機能を実現する光学素子構造を効率的に探索するツールとしてのGAの有効性を検討する。GAを適用することにより、事前の知識が少ない対象にも所望の機能を持つ最適な設計が見つかることが期待される。また、多点探索の性質から、多様な構造が多数生成されることを利用して構

造と性能の相関関係等を可視化し、それによって新たな設計知識が発見されることが期待される。

ここで偏光変換機能とは、入射する無偏光の光を直線偏光に変換する機能、すなわち直交する2つの偏光成分を非対称に回転させる機能を意味しており、著者らの知る限り、单一平面から成る光学素子において、このような機能を実現する光学素子の報告例はない。高効率の偏光変換機能が実現できれば、光利用効率の向上が期待でき、液晶プロジェクタや液晶ディスプレイ等への応用が期待できる。

本論文では、ナノ構造光学素子の設計最適化にGAを適用し、所望の偏光変換機能を実現する設計解およびその性能安定性に関する知見を得た。その実装方法や解析方法について以下に説明する。

2. ナノ構造光学素子

ナノ構造光学素子は、半導体プロセスを利用して作製される。断面構造をFig.1に示す。ガラス基板（SiO₂）の上に金属材料（Al）によるパターンを形成し、スピンドルオングラス材料（SOG, n=1.38）を積層している。

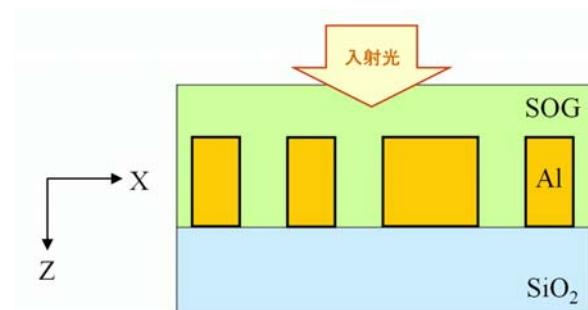


Fig.1 Cross-section view of nano-photonic element.

金属細線が等間隔に並んだワイヤグリッド構造を持つ（非共鳴）偏光子が知られている。また、金属と光の共鳴波長近傍において大きな位相シフト（複屈折）特性が得られることが報告されている⁷⁾。

より自由度の高い構造を利用して多様な機能を実現する光学素子の設計が望まれるが、現状では技術者の直感に頼った構造設計を基本にしていることは否めない。

3. 実験モデル

3-1 変数設定

$16\text{nm} \times 16\text{nm}$ サイズの矩形を最小単位の「セル」とする。セルは、材質を金属とする(1) かまたはガラスとする(0) かの2値の値を取る変数である(バイナリ・コーディング)。

セルは厚さ H を持ち、 H は実数値の変数である。

セルをX方向に X_{size} 個、Y方向に Y_{size} 個並べた $X_{size} \times Y_{size}$ の「2次元形状」(2次元ビット配列)を「単位構造」とする(Fig.2 (c))。 X_{size} , Y_{size} は整数値の変数である。

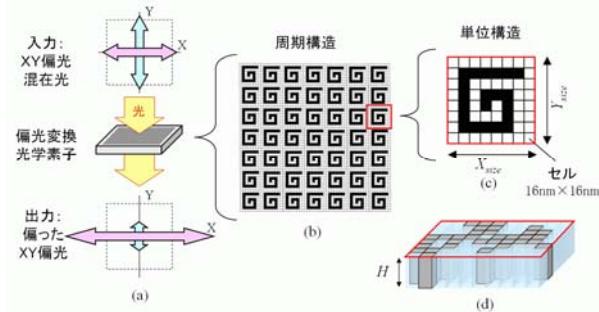


Fig.2 Polarization transformation function and variables settings.

個々のセルの値を変化させることにより、金属セルの並びによる自由度の高い任意の形状を生成することができる。可能な形状の数は $2^{(X_{size} \times Y_{size})}$ となる。 X_{size} および Y_{size} の値は20程度となるので、全探索は極めて困難である。

単位構造をX方向およびY方向に周期的に繰り返すことによって、光学特性を発現するために十分な数mm角程度の面積を持つ構造を生成する(Fig.2 (b))。

変数 H , X_{size} , Y_{size} の変動範囲は、以下のように設定した。

$$H: 50 \sim 500\text{nm}, X_{size}: 10 \sim 40, Y_{size}: 10 \sim 40$$

3-2 偏光変換

X方向、Y方向に直交する2つの直線偏光を、入射光とする。入射光の光量は、それぞれの偏光で0.5である。X方向の入射直線偏光がY方向の出射直線偏光に変換される偏光変換率を T_{xy} 、Y方向の入射直線偏光がX方向の出射直線偏光に変換される偏光変換率を T_{yx} とする。X方向の入射直線偏光がX方向の直線偏光として出力される偏光透過率を T_{xx} 、Y方向の入射直線偏光がY方向の直線偏光として出力される偏光透過率を T_{yy} とする(Fig.3)。偏光変換率 T_{xy} , T_{yx} および偏光透過率 T_{xx} , T_{yy} は、0~0.5の値をとる。

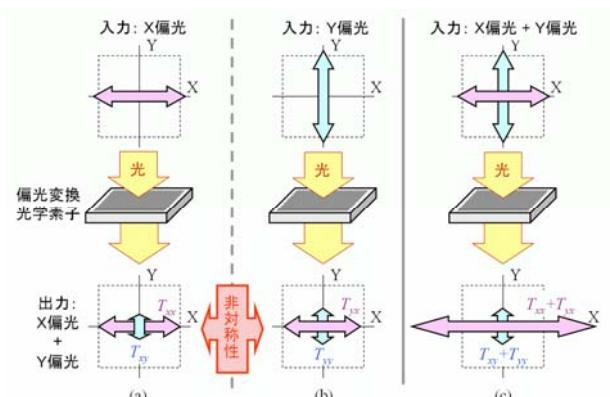


Fig.3 Polarization transformation function in detail.

T_{xy} を小さくし T_{yx} を大きくする、つまりX方向とY方向での偏光変換性能の非対称性を大きくすることを最適化の目的とする。目標性能は $T_{xy}=0$, $T_{yx}=0.5$ である。このような偏光変換機能は、従来にはなかった機能素子を実現する可能性がある。

入射光の波長は400~500nm(可視光青領域)の範囲を等間隔に分割した16個の波長を用いる。1つの光学素子について16個の波長それぞれを用いて性能を評価し、それらのうち最も良かつた性能をその光学素子の評価値とする。

4. 計算手法

4-1 FDTD法

ナノ構造光学素子の数値シミュレーション設計技術として、有限差分時間領域法（FDTD法）を用いる。FDTD法は、空間を格子状に区切り、Maxwellの方程式を順問題として解く数値解法である⁸⁾。

4-2 GA

GAは、生物の進化過程を模倣した最適化手法である。多数の局所解が存在する探索空間において、複数の個体で並列に探索を行うことにより、小さな局所解にとらわれずにより大域的な解を見つけることができる。また、入力に対する出力がシミュレーション等によって得られれば、その物理現象を厳密に定義できなくても最適化を行うことができる⁹⁾。

処理手順をFig.4に示す。初期個体を複製し、変異を与えることによって初期集団を生成した後、「評価」「淘汰」「判定」「複製」「変異」からなる処理を繰り返す。判定処理では、集団内の個体があらかじめ定めた性能を満たした場合や、あらかじめ定めた世代数や実行時間などの条件を満たした場合に処理を終了する。

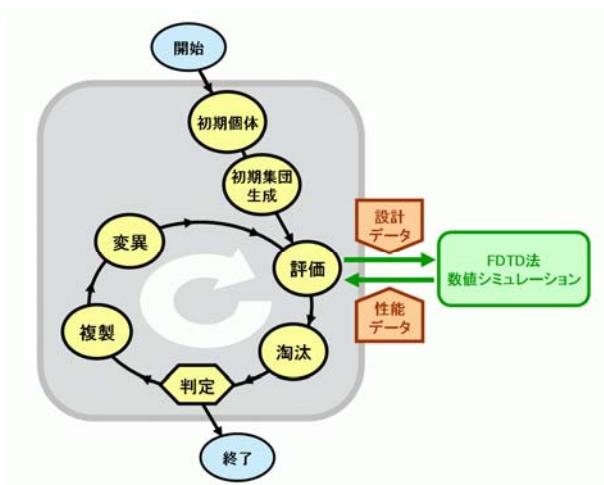


Fig.4 Flow chart of GA.

4-3 変異

変異処理では、単位構造の2次元形状、 X_{size} , Y_{size} , H を対象として変異を与える。手順は以下に従う。

- Step 1: 4個の対象から1個を17:1:1:1の確率でランダムに選択する（17は2次元形状の選択比）。
- Step 2: 選択された対象に応じて後述する変異を与える。
- Step 3: Step 1～2の手順をあらかじめ指定した回数（個体あたり変異回数）繰り返す。
- Step 4: 2次元形状から全ての孤立セルを除去する。

2次元形状への変異は、セルをランダムに選び、1を0に、0を1にその値を変更することで与えられる。Fig.5に変異の例を示す。(a)が変異前の2次元形状の場合、(b), (c), (d), (e), (f), (g)は1回の変異で生成される形状を示す（赤色セルは0から1への変異、黄色セルは1から0への変異）。(f)は孤立セルが金属構造の外部に、(g)は孤立セルが金属構造の内部に発生する例である。(h), (i)は複数回の変異により生成される形状の例である。このように、変異を与えることによって自由度の大きい2次元形状を生成することができる。

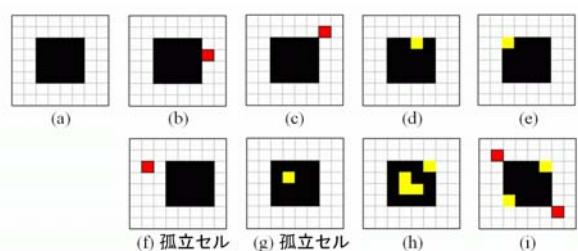


Fig.5 Examples of mutated 2D patterns.

孤立セルとは、注目セルが1でかつ周囲8近傍セルが全て0のもの、あるいは注目セルが0でかつ周囲8近傍セルが全て1のものである。上下左右の境界に接するセルについては、同じ2次元形状が隣接するものとみなして判定を行う。除去する場合は、孤立

セルの値を周囲近傍セルの値に変更する。孤立セルを除去する理由は、製造プロセスの特性により、金属部の面積サイズが小さく、幅と厚さの比（アスペクト比）が大きい構造の形成が困難であることを考慮しているからである。製造が困難な変異個体を抑制することで、実用性の高い個体を進化させる効果が期待される。孤立セルの除去によって、変異は多くの場合、輪郭周辺部に生成される。

X方向セル数 X_{size} 、Y方向セル数 Y_{size} への変異は、現在値を中心とした $3\sigma=10$ の広がりを持つ正規分布に従って、整数値で与えられる。変異後の値が現在値と異なる場合、2次元形状はできるだけ相似形を保って、X方向/Y方向独立に縮小または拡大される。

厚さ H への変異は、現在値を中心とした $3\sigma=50\text{nm}$ の広がりを持つ正規分布に従って、実数値で与えられる。

4-4 評価

前述の2つの偏光変換率 T_{xy} 、 T_{yx} を数値シミュレーションによって求めた後、(1)式の加重和によって1つの評価値（スコア）にスカラー化する。 W_1 と W_2 は重み係数であり、2個とも値は1を設定した。このスコアを最小化する。

$$Score = W_1 (1 - T_{yx}) + W_2 T_{xy} \quad (1)$$

4-5 世代交代

世代交代はエリート戦略を用いる。全個体のうち上位20%をエリート個体群とし、下位20%の個体群をエリート個体群で上書きする。その後、エリート以外の80%の個体群に変異を与える。

5. 実験結果

5-1 初期設定

初期個体は、2次元形状が半径4セルの円形状、 $X_{size}=21$ 、 $Y_{size}=21$ 、 $H=200\text{nm}$ とした。初期設定は個体数100、エリート数20、変異処理での個体あたり変異回数5とした。初期個体の T_{xy} 、 T_{yx} は、ともに0である。

5-2 実験方法

実験は4区間（A～D）の実験の連なりから成る。各区間で個体あたり変異回数が異なる複数回の実験を行った。B区間以降での個体あたり変異回数は、前区間での個体あたり変異回数と到達スコアの関係をもとに、より早いスコアの減少が予測される回数を設定した。各区間での実験条件をTable 1に示す。

Table 1 Experiment settings in A - D period.

	個体数	個体あたり 変異回数	世代数	実行時間
A区間	100	5, 10, 20, 30, 40, 60	約155	84時間
B区間	100	1, 3, 5	約 95	60時間
C区間	200	1, 2, 3	約130	168時間
D区間	200	1, 2, 3	約130	168時間

A区間の6個の実験の最終世代においてスコアが最小となったベスト個体、つまり個体あたり変異回数が5の到達解をB区間の全ての実験の初期個体とした。B区間の3個の実験の最終世代においてスコアが最小となったベスト個体、つまり個体あたり変異回数が1の到達解を、C区間の全ての実験の初期個体とした。C区間の3個の実験それぞれについて、最終世代においてスコアが最小となったベスト個体を、D区間の個体あたり変異回数が同じ実験の初期個体とした。各区間でベスト個体を生成した実験条件をTable 2に示す。

Table 2 Experiment settings of best resulted in A - D period.

	個体数	個体あたり 変異回数	世代数	実行時間
A区間	100	5	155	84時間
B区間	100	1	95	60時間
C区間	200	1	131	168時間
D区間	200	1	129	168時間

1個体の評価時間は約28秒であり、収束までの総所要時間は約20日である。使用計算機の主なスペックは、CPU=Intel Xeon X5492, 3.40GHz, Memory 8GBである。

5-3 スコアと形状の進化

スコアの進化履歴をFig.6に示す。横軸は累積世代数、縦軸はスコアである。各区間で1本の線が1回の実験結果を表す。各区間の実験群で個体あたり変異回数の違いと探索のランダム性により、スコアの進化履歴に違いが見られる。A～B区間では、世代あたり変異回数が小さいほどスコアの減少が相対的に早い傾向が伺われる。C区間以降では、スコアの減少速度の違いは不明瞭である。

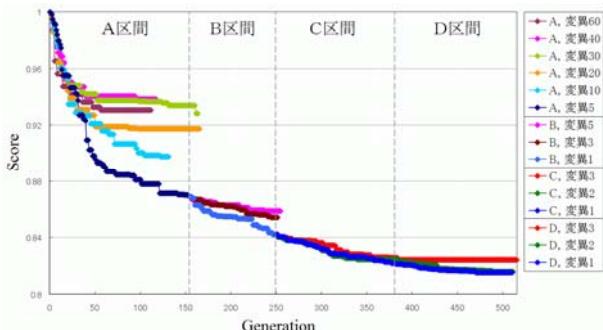


Fig.6 History of best scores in each experiment.

各区間でベスト個体に到達した実験におけるスコアの進化履歴をFig.7に示す。横軸は累積世代数、縦軸はスコアである。世代あたりのスコアの減少量は初期に大きく、次第に小さくなる傾向がある。累

積世代数470においてスコアは0.815に到達し、その後は40世代継続して実行しても、解の更新は見られなかった。

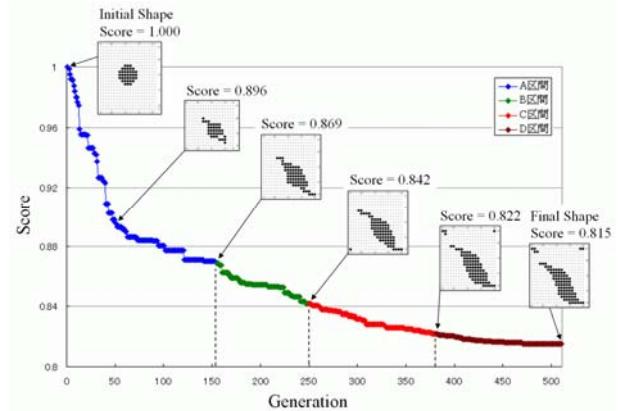


Fig.7 History of best score and 2D patterns.

スコアに対応する2次元形状を6個併記した。世代が進行するに従い、2次元形状は円形状から次第に左上～右下方向に伸び、2つの鋭い先端部と滑らかな逆S字曲線の輪郭から成る2回対称の回転対称形に収束した。

到達解（ベスト解）の2次元形状をFig.8に示す。Fig.8 (b)に示すように、2次元形状は周期構造を形成した後に性能が評価される。そのため、2次元形状をXまたはY方向に任意のセル数だけ平行移動したものは、全て同じ性能を持つ。ベスト解の他の変数の数値は $X_{size}=20$, $Y_{size}=19$, $H=234\text{nm}$ である。偏光変換率は $T_{xy}=0.0505$, $T_{yx}=0.2351$, 偏光透過率は $T_{xx}=0.0062$, $T_{yy}=0.0155$ である。

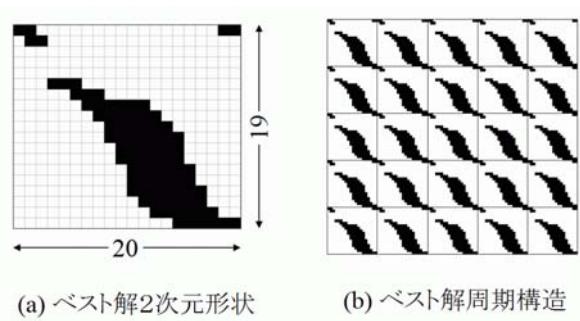


Fig.8 2D pattern of best result.

ベスト解において波長に対する偏光変換率をプロットしたものを、Fig.9に示す。波長480nm付近で特徴的な偏光変換機能が発現している。

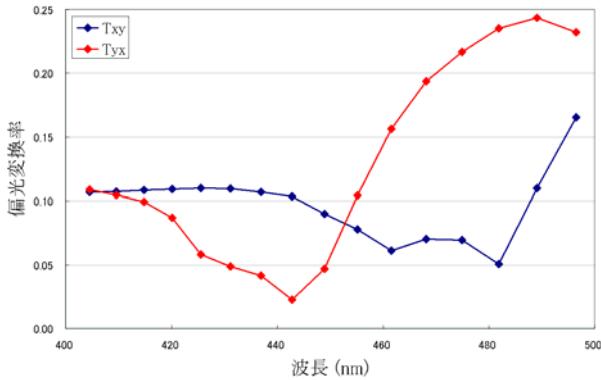


Fig.9 Polarization transformation characteristics of best result.

5-4 性能の相関分布

最適化途中の履歴を参考することによって、大量の個体群データを得ることができる。それらを性能空間や変数空間等にプロットすることで、項目間にある相関関係を可視化することができる。

C区間およびD区間で生成された個体群および初期個体のデータを用いて、性能空間へのプロットを行う。各個体はスコアの数値範囲に応じて色分けされている。

偏光変換率 T_{xy} を横軸、 T_{yx} を縦軸として個体群をプロットした散布図をFig.10に示す。最適化目的は T_{xy} 最小化、 T_{yx} 最大化であるので、左上方向に向かうほどスコアが小さくなるよう等スコアの個体群が層状に並んでいるのが観察される。左上方向に凸状に分布の境界があり、ベスト解付近では限界性能のトレードオフ関係（ T_{xy} が大きくなると T_{yx} も大きくなる正の相関関係）があることを示している。

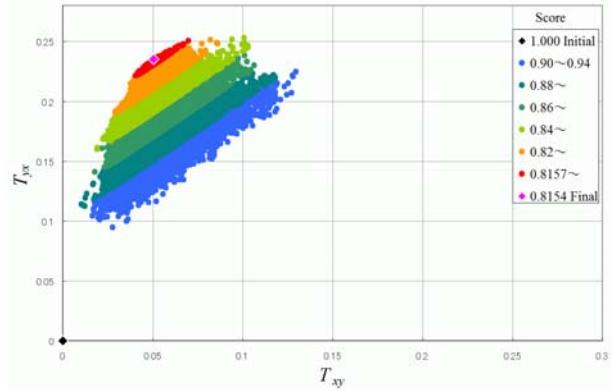


Fig.10 Polarization transformation efficiency, plot of T_{xy} vs. T_{yx} .

偏光透過率 T_{xx} を横軸、 T_{yy} を縦軸としてプロットした散布図をFig.11に示す。これらは最適化目的ではないが、スコアが小さくなるに従い分布が特定の座標に収束している。このことから、最適化目的の項目と間接的に相関関係があると考えられる。

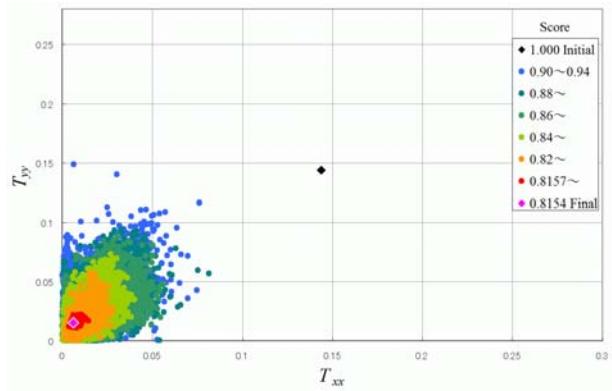


Fig.11 Polarization transmission efficiency, plot of T_{xx} vs. T_{yy} .

T_{xx} を横軸、 T_{yx} を縦軸としてプロットした散布図をFig.12に示す。スコアが小さくなるに従い、 T_{yx} の値は増加し、 T_{xx} の値は減少する傾向が見られる。

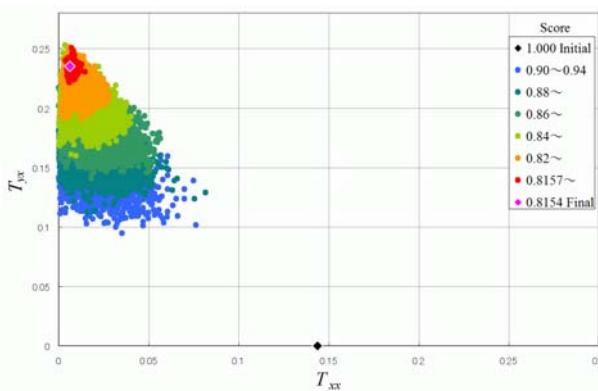


Fig.12 Polarization transmission / transformation efficiency, plot of T_{xx} vs. T_{yx} .

これらの図は、対象の限界性能や、性能相互間のバランスを推測する参考となりうる。特に、事前知識の蓄積が少ない新規デバイスの開発時など、対象の大域的な特性傾向を数値シミュレーションによって把握できることは、試作回数の削減などにつながり、効率的な開発の実施に貢献すると考えられる。

5-5 進化経路

初期個体から到達解まで、各世代のベスト個体が性能空間上でどのような経路を辿って進化したかを示す。前出のFig.10～12に対応した進化経路をFig.13～15に示す。

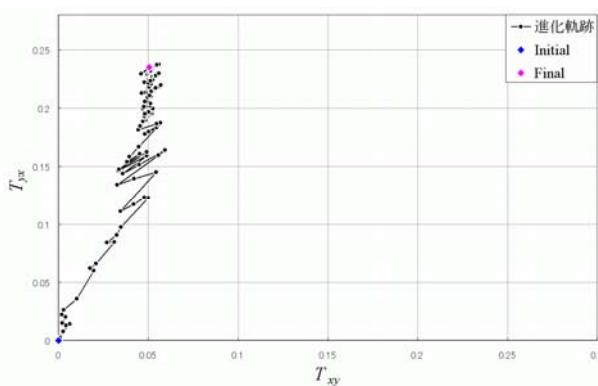


Fig.13 Evolution trajectory plot of T_{xy} vs. T_{yx} .

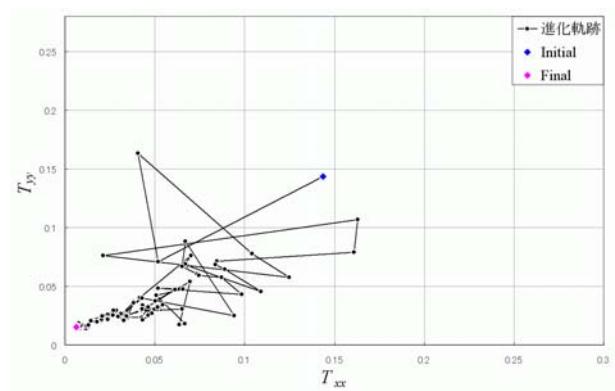


Fig.14 Evolution trajectory plot of T_{xx} vs. T_{yy} .

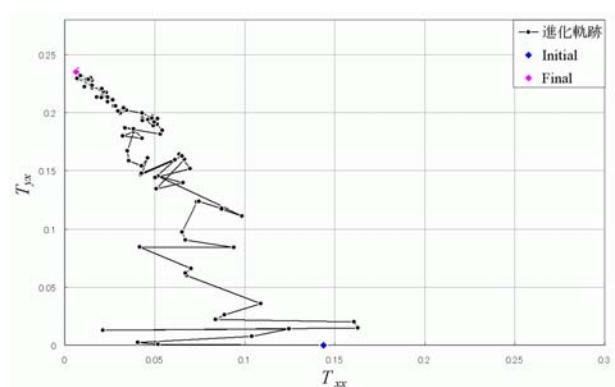


Fig.15 Evolution trajectory plot of T_{xx} vs. T_{yx} .

5-6 変数と性能の分布

C区間およびD区間で生成された個体群のデータを用いて、3個の変数 (X_{size} , Y_{size} , H) とスコア、および波長とスコアの関係をプロットした散布図をFig.16～19に示す。

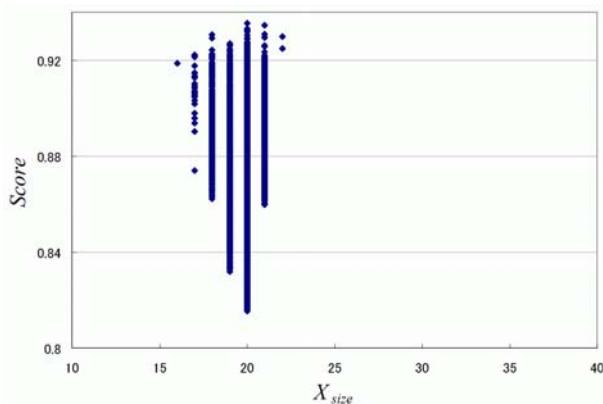


Fig.16 X_{size} distribution, plot of X_{size} vs. score.

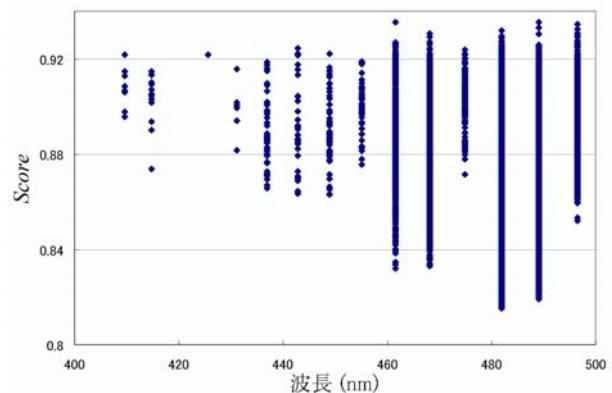


Fig.19 Wavelength distribution, plot of wavelength vs. score.

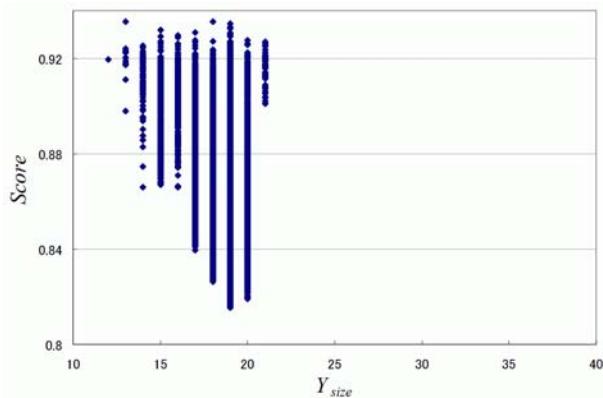


Fig.17 Y_{size} distribution, plot of Y_{size} vs. score.

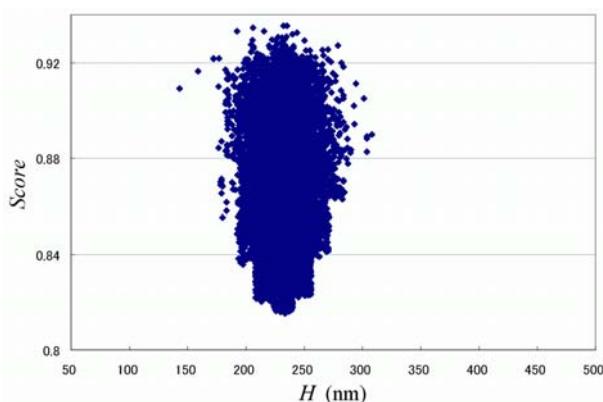


Fig.18 H distribution, plot of H vs. score.

X_{size} は20, Y_{size} は19の数値においてスコアが最小値となる単峰性で下に凸の分布をしており、良好なスコアを得るために設定可能な範囲は、変動可能範囲に対して相対的に狭い (Fig.16, 17)。 H も同様に234 nmでスコアが最小値となり、良好なスコアが得られる範囲は、変動可能範囲に対して相対的に狭い (Fig.18)。波長とスコアの散布図 (Fig.19)では、下に凸の多峰性の分布をしている。

5-7 輪郭形状と性能

ベスト解の形状変化に対する性能安定性を調べる目的で、以下の実験を行った。

ベスト解の2次元形状を示すFig.20 (a)に対し、輪郭部にランダムな変異を付与し、多様な個体を多数生成する。変異前の形状に対するセルの差異数（差異セル数）を横軸とし、スコアを縦軸として個体群をプロットした散布図をFig.20に示す。ベスト解および特徴的な6個の2次元形状を併記した。2次元形状の赤色セルは0から1への変異、黄色セルは1から0への変異である。

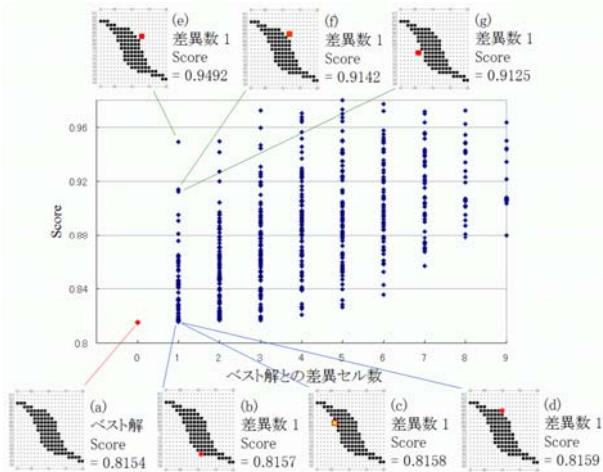


Fig.20 Difference between best result and mutated 2D patterns vs. score.

各差異セル数での最小スコアを比較すると、差異セル数が増えるに従い、スコアは増加（悪化）する。つまり、輪郭部にどのような小変異を与えても偏光変換性能は悪化する。このことから、探索された構造は最適解か、少なくとも準最適な局所解であると考えられる。

差異セル数が1の場合、スコアの分布は0.816から0.949まで幅を持っている。これは、1個の変異セルが輪郭のどの位置に付与されたかによってスコアが悪化する量が異なることを示す。スコアの悪化が最も小さい場合（Fig.20 (b)）のスコアの悪化量は0.0003であり、スコアの悪化が最も大きい場合（Fig.20 (e)）のスコアの悪化量は0.1308である。よって両者の比は約440倍である。差異セル数が1の2次元形状群とベスト解を比較すると、スコアの悪化が小さいのは輪郭の滑らかさに影響が小さい形状群（Fig.20 (b)～(d)）であり、性能の悪化が大きいのは輪郭の滑らかさに影響が大きい形状群（Fig.20 (e)～(g)）であった。このことから、偏光変換機能の効率的な発現には2次元形状の輪郭の滑らかさが大きな影響を持つことが分かる。これは従来知られていないかった知見であり、今後、より効率的な偏光変換素子を設計するために有効な設計指針になりうると考えられる。

6. おわりに

金属微細構造を持つナノ構造光学素子において、偏光変換機能を目的とする設計最適化にGAを適用し有効性を検討した。

FDTD法を用いた数値シミュレーションにより偏光変換機能を評価し、GAの適用によって所望の性能が得られるよう光学素子の構造を最適化した。その結果、金属部の輪郭が2つの鋭い先端部と滑らかな逆S字曲線から成る2回対称の回転対称形構造が得られた。偏光変換性能はX偏光からY偏光への変換率 T_{xy} が0.0505、Y偏光からX偏光への変換率 T_{yx} が0.2351であり、直交する偏光成分に対し非対称に回転する機能が実現された。また、最適化過程で生成される個体群データを利用することにより、性能や変数間の相関関係等が可視化され、設計に有用な知見が得られることを示した。さらに、ベスト解について形状変化に対する性能安定性を調査し、2次元形状の輪郭の滑らかさの変化が性能に影響を与えるという知見が得られた。

これらのことから、ナノ構造光学素子の設計において、GAの利用が有効であると考えられる。

謝辞

本研究の一部は、（財）光産業技術振興協会が（独）新エネルギー・産業技術総合開発機構（NEDO）から受託したプロジェクト「低損失オプティカル新機能部材技術開発事業」に関するものである¹⁰⁾。

参考文献

- 1) 日本光学会: 光学, 第40巻, 第1号 (2011).
- 2) 神保花ほか: 遺伝的アルゴリズムと時間領域差分法を用いたサブ波長回折光学素子の設計, 電気学会論文誌.C, 電子・情報・システム部門誌, Vol.127, No.9, pp.1298-1303 (2007).

- 3) 岩長祐伸: 光波メタマテリアルの負の屈折減少を担うプラズモン共鳴, *O plus E*, Vol.33, No.12, pp.1322-1326 (2011).
- 4) 大津元一ほか: 特集 ドレストフォトンが切り拓く環境, エネルギー, セキュアライフの新機軸, *OPTRONICS*, No.3 (2012).
- 5) H. T. Miyazaki, Y. Kurokawa: Controlled Plasmon resonance in closed metal/insulator/metal nanocavities, *Applied Physics Letters* 89, 211126 (2006).
- 6) 北野宏明編: 遺伝的アルゴリズム, 産業図書 (1993).
- 7) 三宮俊: 低損失偏光制御部材, *OPTRONICS*, No.3, pp.104-109 (2012).
- 8) K. S. Yee: Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell's equations in Isotropic media, *IEEE Trans. Antennas Propagat.*, Vol.14, No.4, pp.302-307 (1966).
- 9) 電気学会 進化技術応用調査専門委員会編: 進化技術ハンドブック 基礎編, 近代科学社 (2010).
- 10) NEDO: 平成18年度～平成22年度成果報告書 低損失オプティカル新機能部材技術開発, http://www.nedo.go.jp/library/database_index.html (参照2013-07-24).