

課題名 (タイトル) :

共振型光メタマテリアル共振器構造の最適化設計法の検討

利用者氏名 :

○坂本 裕輝*
田中 拓男*

理研での所属研究室名 : *田中メタマテリアル研究室

1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

光メタマテリアルは自然界に存在しない特異な光学特性を人工的に付加した疑似物質である。この光メタマテリアルは、光と共鳴相互作用するサブ波長サイズの共振器で構成されている。共振器の特性は、その形状や配置間隔によって大きく変化し、それが巨視的なメタマテリアルの光学特性を決定する。そのため、共振器の形状やサイズ、配置間隔などをパラメータとした大規模な計算を行って、メタマテリアルの構造を最適化する必要がある。

近年、共振型光メタマテリアルを用いた、発色構造体の研究が盛んに行われている。

本研究課題では共振型光メタマテリアルを用いた発色する構造体を提案し、その共振器構造体のパラメータ探索を数値計算で行って構造体を自動的に設計する手法の開発を目指す。このような最適化設計では数値電磁界解析による計算を繰り返し行う必要があるため、大規模な並列計算機が必要となる。

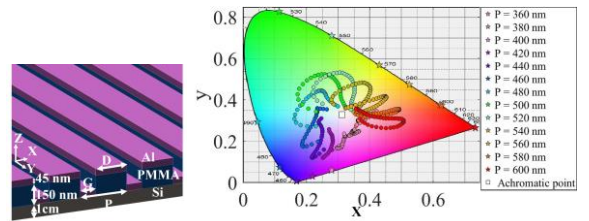
2. 具体的な利用内容、計算方法

RCWA 法 (Rigorous Coupled-Wave Analysis) に基づく数値電磁界解析のプログラムを自作した。この電磁界解析のプログラムを用いて、構造体のパラメータ探索アルゴリズムを構築した。

RCWA 法では単一波長での計算結果を統合することで、広帯域な波長に対する特性の結果を得ることができる。我々は HOKUSAI の持つ豊富なコアを用いて、各々の波長の計算を別々のコアに割り振った。

3. 共振型光メタマテリアルを用いた発色構造体

ナノサイズの周期的な凹凸構造を金属でつくと、その凸部の幅 D と凹部の幅 G の 2 つのパラメータのみで反射光の色相を制御でき、sRGB 内のフルカラーを表現できることが報告されている[1]。図 1(a) に凹凸構造を一次元方向に並べたトレンチ構造体を示す。図 1(b) は図 1(a) の構造体で発色できる色を CIE xy 色度図上に描画した図である。CIE xy 色度図は人間が知覚できる色を定量的に表すために考案された指標であり、色度図の縁の色が最も鮮やかな色となる。図 1(b) に示す発色をする構造体のパラメータは $100 \leq D[\text{nm}] \leq 500$, $100 \leq G[\text{nm}] \leq 500$, $360 \leq P = D + G[\text{nm}] \leq 600$ を満たす。図 1(b) の○印の色はそれぞれ、周期 P の大きさに対応しており、構造体の周期 P と発色する色に相関があることが分かる。



(a) 構造体 (b) CIE xy 色度図

図 1 トレンチ構造体

4. 提案する構造体

図 1(a) の構造体の断面は、凸部と凹部の単純な繰り返しである。我々は図 2 のように凸部を 1、凹部を 0 として、10 nm ピッチでコード化し、この 0, 1 の組み合わせの最適化により、より鮮やかな色を発色する構造体のパラメータを探索した。

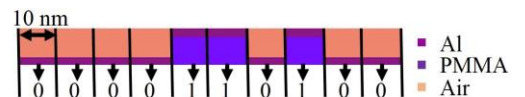


図 2 凹凸構造体のコード化

5. パラメータ探索法

周期 360 - 600 nm (20 nm ピッチ) の構造について、図 1(b)の星印で示す色度図で最も彩度の高い縁部分(x_r, y_r)までの距離を評価値とし、式(1)に示す評価関数 F を最小化する構造体のパラメータを探索した。

$$F = \sqrt{(x - x_r)^2 + (y - y_r)^2} \quad (1)$$

ここで、 x, y は探索したパラメータを用いた発色構造による色の CIE xy 色度図上の座標である。

6. 凹凸構造体の自動最適化設計の結果

構造体の周期 360 - 600 nm に対し、 F が最小となった発色の結果を図 3 に示す。この結果より、500 nm から 600 nm の間で、トレンチ構造よりも高彩度な発色をする構造のパラメータを探索できることが分かった。

図 4 に周期 600 nm の凹凸構造体の探索結果を示す。

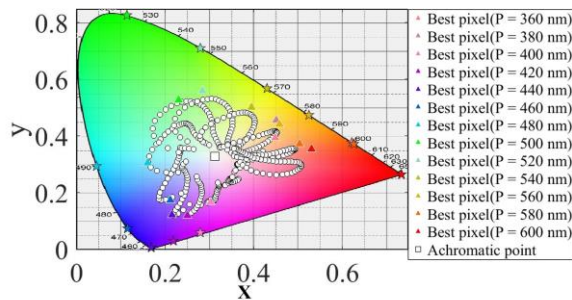


図 3 凹凸構造体の最適化設計の結果

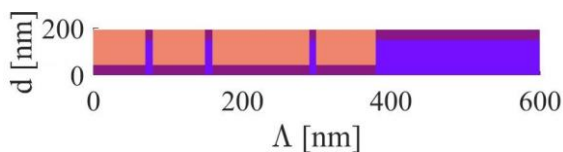


図 4 周期 600 nm の凹凸構造体の探索結果

7. まとめ

我々は自作した電磁界解析のプログラムを用いた発色構造体のパラメータ探索アルゴリズムで、発色構造の自動設計を行った。

今年度、HOKUSAI を利用し、大規模な並列計算を行うことによって計算時間を飛躍的に短縮することができた。

8. 今後の計画・展望

今回、計算速度の問題から、2次元周期構造の設計に留まった。今後はプログラムの高速化を行い、3次元周期構造について、高彩度な発色を得る新規な共振器構造の最適化設計を行う予定である。

参考文献

[1] Renilkumar Mudachathi1, Takuo Tanaka, "Up Scalable Full Colour Plasmonic Pixels with Controllable Hue, " *Scientific Reports* 7, 2017