

共鳴領域を利用した波長無依存の回折格子の設計

星野 鉄哉

2008年2月

筑波大学大学院博士課程

数理物質科学研究科博士論文
博士（工学）

共鳴領域を利用した波長無依存の回折格子の設計

星野 鉄哉
（電子・物理工学専攻）

目次

第1章	序論	1
1.1	背景	1
1.2	研究目的	1
1.3	論文概要	2
第2章	回折効率と波長分布の評価方法	5
2.1	回折格子の作成	5
2.2	回折格子の形状評価	7
2.3	回折効率の測定	7
2.4	波長分布の測定	11
第3章	回折効率と電場の計算	13
3.1	回折効率の計算原理	13
3.1.1	TEモードのベクトル波動方程式	13
3.1.2	TEモードの結合波方程式	16
3.1.3	TMモードのベクトル波動方程式	21
3.1.4	TMモードの結合波方程式	22
3.2	回折効率の計算方法	23
3.3	電場分布の計算方法	24
3.4	Fraunhofer 近似	24
第4章	回折効率と電場の評価結果	25
4.1	回折格子の形状評価結果	25
4.2	回折光の波長分布の測定結果と計算結果	27
4.3	全反射率の測定結果と計算結果	37
4.4	偏光選択比の測定結果と計算結果	37
4.5	全反射率の波長依存性の計算	37
4.6	電場分布の計算	41
4.7	底辺のある回折格子の反射率と基材厚みの関係	48

4.8	三角と矩形の回折格子の比較	50
4.9	回折角度分布の Fraunhofer 近似	58
4.9.1	三角回折格子の回折角度分布	58
4.9.2	孤立格子の電場分布	72
第5章	考察	73
5.1	回折効率の式	73
5.2	回折角度分布の波長依存性	73
5.3	横干渉による全反射率波長依存性と電場分布	74
5.4	縦干渉による全反射率波長依存性と電場分布	74
5.5	三角と矩形の回折格子の比較	75
5.6	反射率の決定因子	75
5.7	波長依存性の小さい回折格子の設計方法	76
5.8	回折角度分布の Fraunhofer 近似	77
5.9	共鳴領域の回折格子の応用	78
第6章	結論	79
	・ 参考文献	
	・ 謝辞	
	・ 発表リスト	

第1章. 序論

1.1. 背景

波長の40倍以上の周期構造を持つ光学素子は、プリズムシートやフレネルレンズとして、照明やディスプレイに広く使われている。こうした光学素子の光学特性はスネルの法則に基づく屈折やフレネル反射などの物理光学的効果で説明できる。

他方、波長以下の周期構造を持つ光学素子の特性は有効媒質近似^{1),2)}により簡便に予測することができる。有効媒質近似とは、例えば、屈折率1の空気と屈折率1.5の矩形格子からなる凹凸部を平均屈折率1.25の均一な層として近似する方法である。

本論の共鳴領域の回折格子は、周期が波長の1から数十倍の範囲にあり、回折効果が顕著であり、また、高次の回折効率を持つことを特徴としている。この領域では、光の挙動を予測するための数値計算の適用可能性の検討が、実験的にはほとんどなされておらず、しかも、その数値計算には簡便な近似手法がないため時間がかかる。また、共鳴領域では全反射率や回折角の波長依存性がある³⁾。このため、汎用の用途では太陽電池パネル^{4),5)}のように波長依存性が問題にならない用途や、単色光用光学素子^{6),7)}に限定されていた。一方で、近年、高次の回折効果を利用した白色光向け光学素子として、Light Shaping Diffuser⁸⁾、集光フィルム⁹⁾、積層型回折光学素子のレンズ¹⁰⁾などが出てきておりこれからの発展が期待できる。これら光学素子は、それぞれ、光を特定の角度範囲に拡散する、面光源からの拡散光を平行光に近づける、短い焦点距離でレンズの色収差を補正するといった、物理光学の概念では実現が難しい新たな機能を備えている。無反射や偏光選択に応用できればその可能性は大きく開けるであろう。共鳴領域の反射防止構造としては、Escoubasらの文献があるが¹¹⁾、反射率は2%前後と高く、反射防止として実用的な0.5%以下は得られていない。また、波長依存性についても未検討である。

そこで、共鳴領域の回折格子を汎用の光学素子として、白色光用途に見通しよく適用するための基礎的な検討を行うと同時に、無反射や偏光選択など新たな用途を開拓する。

1.2. 研究目的

ディスプレイや照明の分野では、波長以下の微細構造を光制御に適用する検討が盛んに行われている。反射防止構造¹²⁾⁻¹⁴⁾や偏光分離素子¹⁵⁾⁻¹⁹⁾である。これらを液晶^{20),21)}や有機EL^{22),23)}のディスプレイ、あるいは有機²⁴⁾⁻²⁸⁾や無機²⁹⁾⁻³⁵⁾の発光素子へ適用することで輝度の向上あるいは省エネルギー化ができる。しかし、上記微細構造は、溝幅が波長以下で微細であるゆえに作製が難しい。また、耐熱性が弱いため、樹脂の場合には用途が限定される³⁶⁾。

そこで、新たに波長以上の周期を持つ共鳴領域の回折格子による光制御を提案する^{37),38)}。周期の大きい構造なら大面積で設計どおりの格子形状作成が容易になる。しかし、この周期では、透過率および回折角の波長依存性が問題となる^{3),39)}。本論では、共鳴領域の回折格子の持つ波長依存性の問題を解決し、光学素子としての可能性を開くため、Rigorous Coupled Wave Analysis (RCWA法)^{40),41)}による全反射率と回折角の計算を行い、また、Nonstandard Finite-Difference Time-Domain法(NS-FDTD法)⁴²⁾⁻⁴⁶⁾による電場分布の計算を行った。

1.3. 論文概要

回折格子の格子周期が波長から、波長の数十倍の領域を共鳴領域とよぶ。共鳴領域の回折格子は、集光する、光を拡散するなど、多くの機能を有しているが、光学素子としての

基礎となる反射率および回折角に関する設計指針を与えることおよび無反射や偏光選択などの新たな機能を持った光学素子を開拓することが目的である。産業上重要な可視白色光に着目して検討を行った結果、全反射率および回折角について波長依存性を低減する手法を見出した。また、無反射や偏光選択の光学素子ができることを計算と実験で示した。

本論で開発した無反射構造の具体的な用途としては、図1に示すように液晶ディスプレイのパネル前面の反射防止が挙げられる。このような用途では、外光の反射を抑えるだけでなく、映像の色が分光されて虹が見えないこと、映像の光が適度に拡散されることなど、いくつかの光学特性に条件が課せられる。虹は、波長によって回折角度が異なるときに、白色光が7色に分かれるために生じるものである。そこで、本論では、空気層から回折格子に光が入射する場合を case A、回折格子から空気層に光が出射する場合を case B として、それぞれの場合について、光学特性の波長依存性を検討した。光学特性については、すべての方向に反射された光量の指標として全反射率を、どの方向に反射されたかの指標として最も高い回折効率の回折角度を用いた。

本論では三角形の回折格子で周期/波長を10以上にすることで、波長依存性を小さくできることが示されているが、この方法では通用しない例外的な場合についても、波長依存性を検討している。このために、RCWA法で、物理光学の適用可能な大きい周期の回折格子を計算し、共鳴領域の回折格子の計算結果と比較した。

また、本論の特徴の一つは通常の方法より精度が高い方法NS-FDTD法^{42),43),47)}を用いたことである。この方法を用いて、回折格子に入射する有限平面波によって、散乱場を計算した。NS-FDTDのアルゴリズムとしては、Mur absorbing boundary condition (ABC) の改良版⁴⁸⁾を使用した。これは、standard Mur ABC に比べて、よく電磁波を吸収し、しかも、計算時間は変わらない。

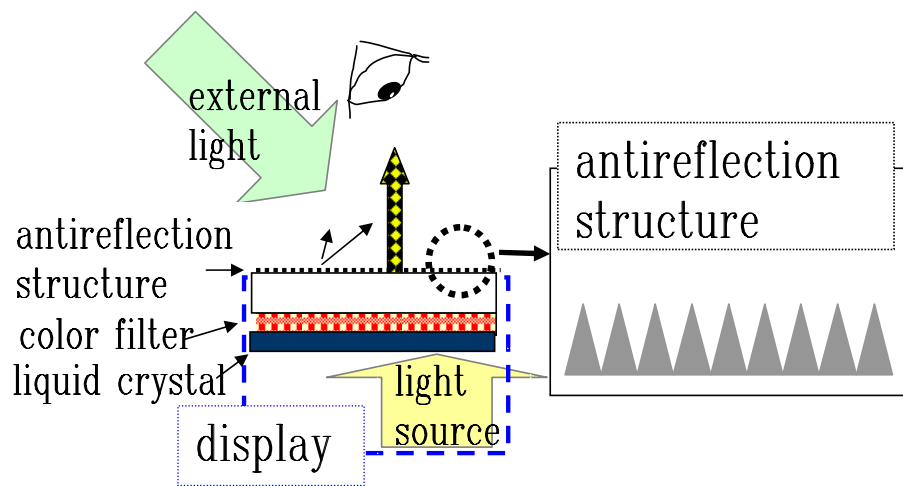


Fig. 1. Liquid crystal display and the antireflection structure.

第2章. 回折効率と波長分布の評価方法

2.1. 回折格子の作成

格子周期による光学特性の変化を調べるために、周期が $1.08 \sim 10 \mu\text{m}$ の回折格子を準備した。周期 $10 \mu\text{m}$ の回折格子には有機光学株式会社製のPMMA(poly methyl methacrylate)製回折格子を用いた。

周期が 1.08 、 1.8 、 3 、 $5 \mu\text{m}$ の回折格子については図2のような銅の金型を作成し、金型からUV露光によりUV硬化樹脂へ格子形状を転写した。

金型作成には、ナガセインテグレックス製NIC-200を用いた。この装置は非接触油静圧軸受により、周囲の振動の影響を押さえることができる。作製条件は送り速度が 3 m/min 、温度 $23 \pm 0.1^\circ\text{C}$ 、湿度 $40 \pm 10\%$ とした。また、作成後に金型の上にメッキ厚さが $0.5 \mu\text{m}$ 前後のメッキを行い、錆による腐食を防いだ。

UV露光にはミカサ製マスクライナーのM-2L型を用いた。装置の超高圧水銀灯のランプ電流は 6.3 A 、ランプ電圧 40 V とし、露光時間は 35 s に設定した。

UV硬化樹脂はSanyo Chemical IndustriesのSANRAD RC610-Rを用いた。UV硬化樹脂の硬化後の屈折率は 1.52 である。金型を用いて、基材が $20 \mu\text{m}$ 程度の薄膜の回折格子と 2 mm 程度の厚膜の回折格子の2種類を作成した。

薄膜の回折格子はUV硬化樹脂を金型の上に塗布後、スライドガラスを押し付けてUV硬化させた。スライドガラスは松浪硝子工業製のものである。

厚膜の回折格子はUV硬化樹脂を金型の上に塗布した後、 2 mm 厚のPMMAの板を押し付けてUV硬化させた。

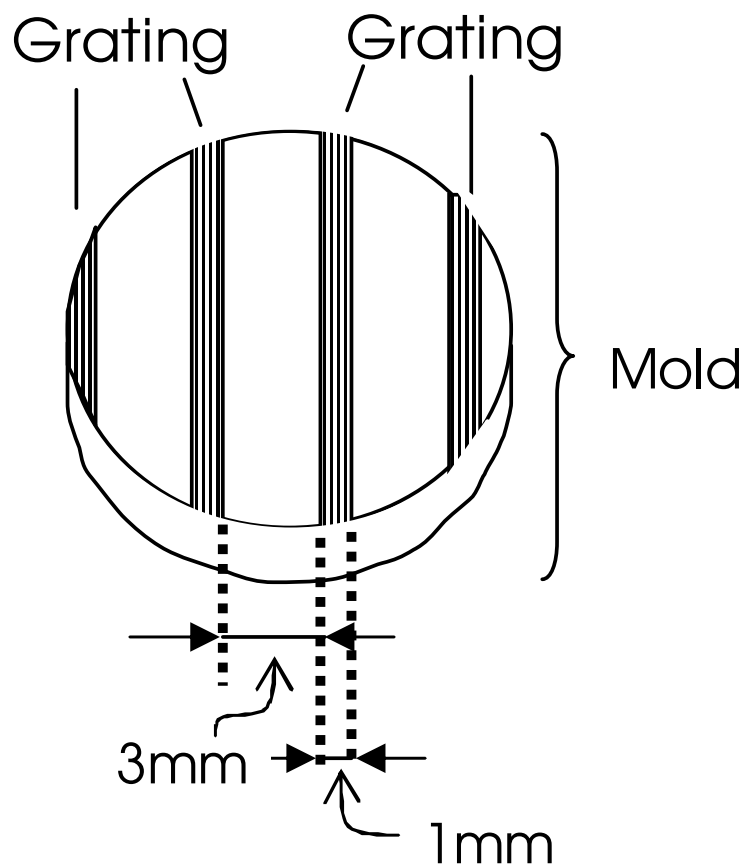


Fig. 2. Arrangement of gratings on the mold. The period of the gratings is 1.08, 1.8, 3 and 5 μm from left to right. The stripes of the gratings are in the longitudinal direction.

2.2. 回折格子の形状評価

周期 1.08 、 1.8 、 3 、 $5 \mu\text{m}$ の回折格子の形状評価には A F M (Atomic Force Microscopy) を用いた。周期 $10 \mu\text{m}$ の回折格子の形状評価には S E M (Scanning Electron Microscopy) を用いた。上記の使い分けは、格子溝のアスペクト比が高いと A F M では針が底まで入らないことと、アスペクト比が低い微細形状の凹凸では S E M よりも A F M の方が評価が正確であることによる。表面粗さの測定にはいずれの場合も A F M を用いた。

S E M は Technex Co. Ltd の T I N Y - S E M を用いた。また、A F M は Seico Instruments の N a n o p i c s を用いた。

回折格子の基材膜厚の測定には、共焦点顕微鏡を用いた。

2.3. 回折効率の測定

輝度の測定には Thorlabs Inc. 製パワーメータを用いた。パワーメータの受光素子の大きさは 1 cm 角である。回折格子の裏面からの反射を抑える場合には、図 3 のように回折格子の裏面に屈折率 1.52 のダブプリズムを U V 硬化樹脂でつけた。光源はアルゴンイオンレーザー (Spectra-Physics Stabilite 2017) を使い、波長を 514.5 nm とした。

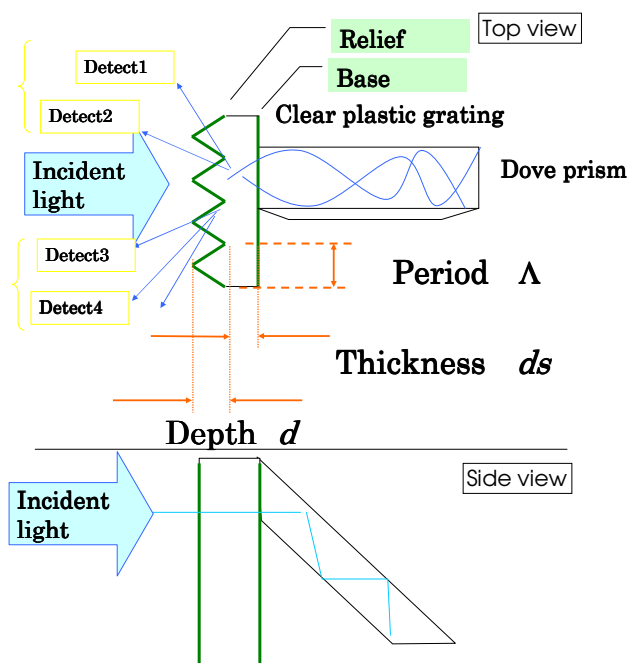


Fig. 3. Top view and side view of the grating illustrating the method of measuring reflectivity. The dove prism is placed on the back surface of the grating like the tail of a pigeon. Some of the incident light is reflected and detected, and the remainder is transmitted through the grating and is scattered in the dove prism. Λ is the period, d is the depth and ds is the substrate thickness of the grating.

周期 1.08 、 1.8 、 3 、 $5 \mu\text{m}$ の回折格子は回折格子に光を入射させ、各回折次数について反射光を測定した。

周期 $10 \mu\text{m}$ の格子の反射率は、周期が $5 \mu\text{m}$ 以下の反射率と異なり、輝点がぼやけて回折パターンが連続に変化した。そこで、格子面に垂直に光を当てる場合には、図4のように矩形の領域で、反射率を測定した。測定間隔 Dx 、 Dy は 13mm 、測定領域の大きさ $D1$ は 91mm 、 $D2$ は 195mm である。バックグラウンドは、反射の輝線の下にパワーメータの位置をずらして計測した。格子面に斜め 45 度から光を当てる場合には、図5のように反射光の方向に沿った半円の上で、反射率を測定した。測定間隔 Dx は 14mm 、測定領域の大きさ $D1$ は 92mm である。

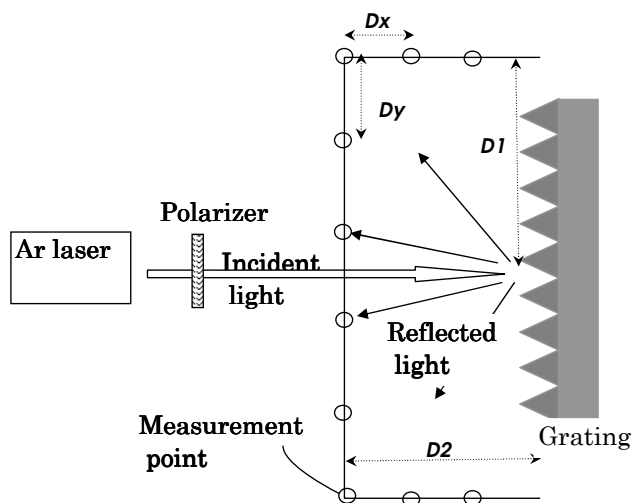


Fig. 4. Rectangular area for the detection of reflected light with normal incident light

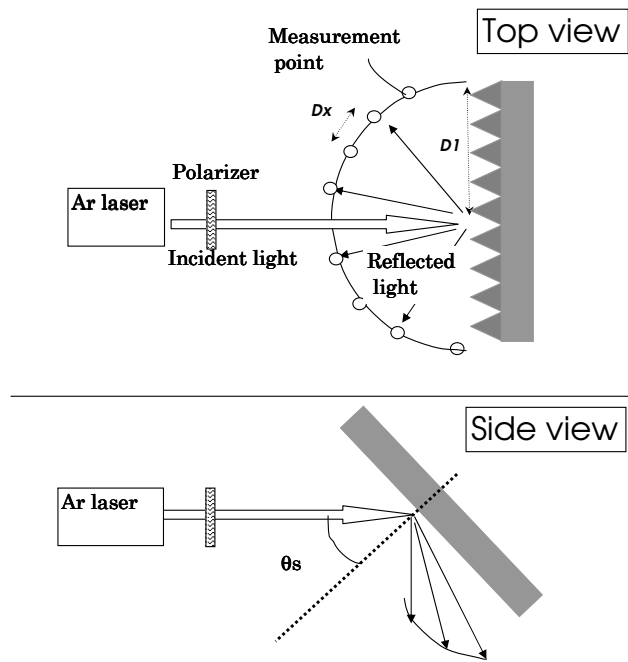


Fig. 5. Circular area for the detection of reflected light with incidence angle θ_s 45° .

2.4. 波長分布の測定

図6は回折による色づきや虹の測定方法を示す図である。虹の評価は目視で行い、色づきの評価は最も強度の強い回折光について分光分析をした。イルミネータからフレキシブルライトガイドを通して出てきた光を使う。光をアイリス絞り、レンズ1、レンズ2を通して集光し、回折格子に当てる。レンズ1で光を平行化し、レンズ2で集光した。レンズ2は焦点距離100mm、直径80mmである。回折格子で透過あるいは反射して、白紙に当てた。イルミネータはハロゲンランプを用い、光強度を大きくして白色に近づける。イルミネータのハロゲンランプから出た光を、回折格子から10cm離れたところに白色の紙を置いて照射すると、 $\pm 2^\circ$ の範囲に明るいスポットができるので、この色を肉眼で観察する。虹が出ているときは、回折光の角度分散により、入射した白色光が緑や赤や青に分離して見える。基材の厚みは2mmである。入射光を拡散光とする場合には拡散体をなるべく回折格子に近いところに挿入する。この拡散体にはEdmund Optics社のground glassを用いた。周期の異なる回折格子による色づきの変化を目視で調べた。case A・case B、入射光が平行・拡散、垂直入射・斜め 45° 入射の場合、さらに、反射・透過の場合について検討した。垂直入射では回折格子の表面に対して光が垂直に入射した。拡散体を光路に入れない場合を‘Parallel’とし、入れる場合を‘Diffuse’とした。回折格子に対する入射角度を θ_0 、回折格子からの出射角度を θ_3 とした。

分光測定をするときには、Ocean Optics Inc.のHR2000をスペクトロメータとして用いた。光の入力には、スペクトロメータに付属の光ファイバを用いた。

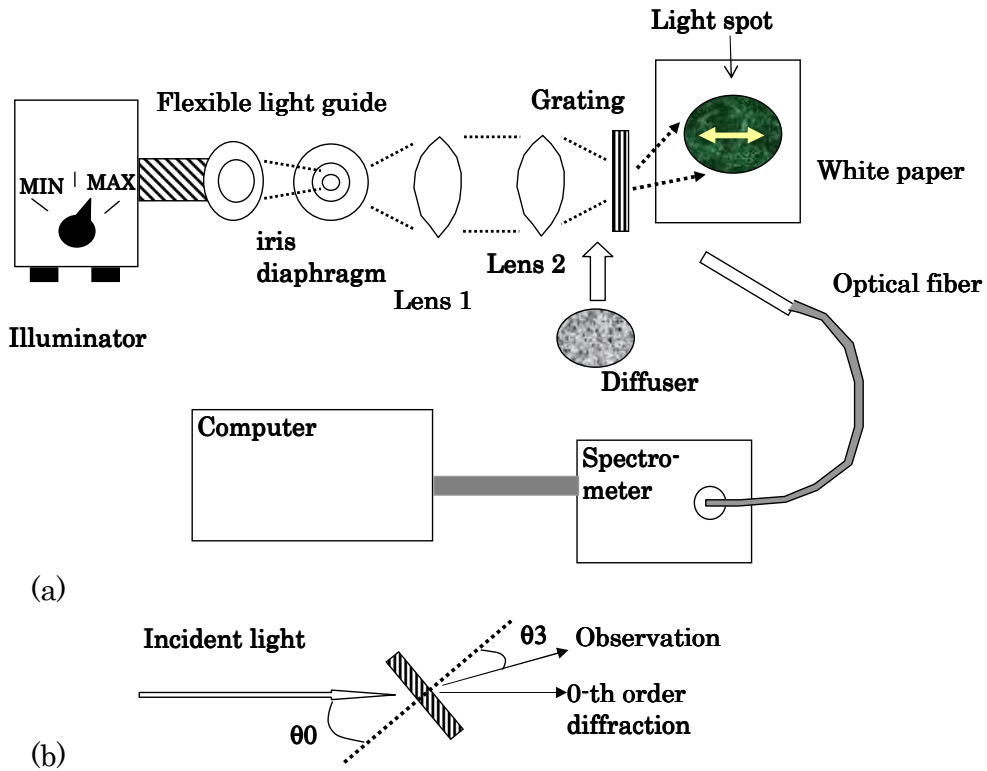


Fig. 6. (a) The optical system for spectroanalysis. The viewing angle of the zero order diffraction is 4° , if the diffuser is not used. The optical fiber was used for the light input. (b) The positional relationship of a optical fiber, incident light and the grating.

第3章. 回折効率と電場の計算

3.1. 回折効率の計算原理

3.1.1. TEモードのベクトル波動方程式

回折格子の波長依存性を低減するための最適な周期や深さに関して設計の指針を得るために、MoharamとGaylordのRCWAの式を変形した。彼らは周期的な回折格子について、回折効率を求める厳密な式を導出した。回折格子の屈折率分布を波動方程式に代入し、それを解いている。ここでは、高次の回折光の角度分布や回折効率と波長・周期の関係を理解しやすいよう、彼らの式から、(波長/周期)の項を抜き出して、波動方程式を解きなおしている。

誘電体の表面レリーフ型回折格子の回折を図7のように一般的な問題として扱う。平な波面を持つ電磁波が斜めに回折格子に入射する。図7のように回折次数および領域I, II, IIIを定義する。領域IとIIIの屈折率はそれぞれ n_I と n_{III} である。図のように一般に、周期的な構造によって、前方回折と、後方回折が生じる。領域I(入射領域)では誘電体は一様であり、比誘電率(誘電定数)は ϵ_I となる。同様に、領域IIIは、比誘電率が ϵ_{III} で一様である。領域II(回折格子領域)は二つのタイプの誘電体が周期的に分布する。

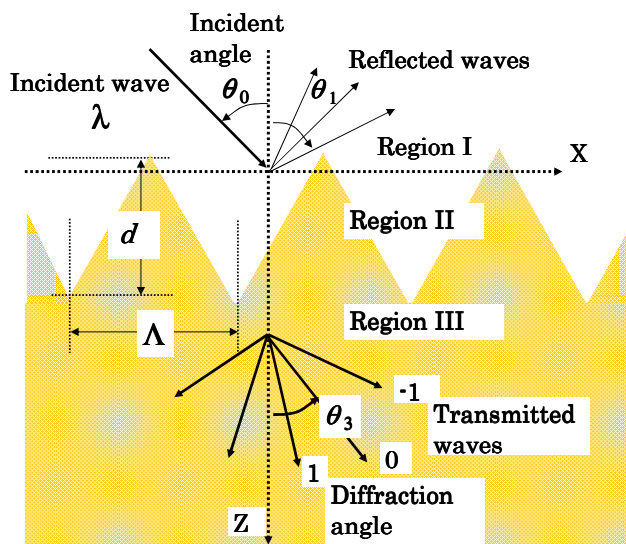


Fig. 7. Geometry of dielectric surface relief grating for the antireflection.

領域 II での誘電体 ϵ_I と誘電体 ϵ_{III} の境界は次式で与えられる。

$$z = F(x) = F(x + \Lambda). \quad (1)$$

ここで、 Λ は回折格子の周期、関数 $F(x)$ は回折格子の表面プロファイルを与える。この解析では、 $F(x)$ の形状に制約はない。曲線、直線、影のある領域など、すべての形状が許される。本論文では、単純のために、誘電体に損失がなく、入射平面の電場の偏光が入射面に垂直の場合（TEモード）を最初に扱う。

領域 I の電場は入射光と反射光の和である。領域 I での規格化された全電場は次式のようにになる。

$$E_1 = \exp(-j\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r}) + \sum_{i=-\infty}^{\infty} R_i \exp(-j\mathbf{k}_{1i} \cdot \mathbf{r}). \quad (2)$$

ここで、 $j = \sqrt{-1}$ 、入射の電場ベクトルは \mathbf{k}_1 、 \mathbf{k}_1 の大きさは $k = 2\pi(\epsilon_I)^{1/2}/\lambda$ 、 λ は自由空間の波長、そして、 $\mathbf{r} = x\hat{x} + y\hat{y} + z\hat{z}$ である。 $\hat{\cdot}$ は単位ベクトルを表す。 R_i は領域 I での i 次の規格化強度であり、波動ベクトル \mathbf{k}_{1i} を持つ。

同様に、領域 III における規格化して電場は、

$$E_3 = \sum_{i=-\infty}^{\infty} T_i \exp\{-j\mathbf{k}_{3i} \cdot (\mathbf{r} - d\hat{z})\}, \quad (3)$$

である。ここで、 T_i は領域 III への i 次の透過光であり、波動ベクトルは \mathbf{k}_{3i} である。 d は格子溝深さである。 \mathbf{k}_{1i} 、 \mathbf{k}_{3i} の大きさは位相適合条件によって決まる。

本解析では、格子領域（領域 II）を、 z 軸に垂直に N 個の薄い平面格子に分割する。厳密結合波解析を、薄い回折格子用に開発し、それぞれのスラブ格子に適用した。もし、個々の平面回折格子が十分薄ければ、どんな回折格子のプロファイルも任意の精度まで解析することができる。

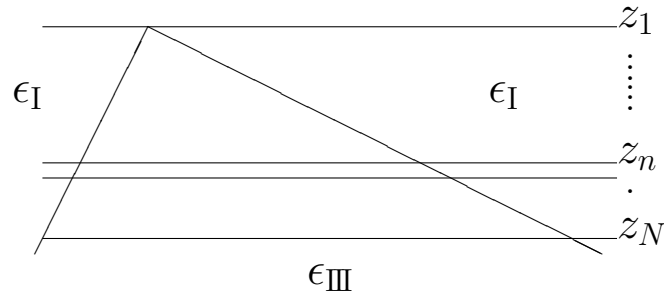


Fig. 8. The n -th planar grating resulting from the decomposition of the surface-relief grating into N thin gratings.

領域II内の n 番目のスラブは、図8に示したように ϵ_I と ϵ_{III} の誘電体が周期的に分布している。 n 番目のスラブ回折格子の比誘電率は周期的であり、 $\epsilon_n(x, z_n) = \epsilon_n(x + \Lambda, z_n)$ 、フーリエ級数に展開できる。

$$\epsilon_n(x, z_n) = \epsilon_I - (\epsilon_{III} - \epsilon_I) \sum_{i=-\infty}^{\infty} \tilde{\epsilon}_{h,n} \exp\{-jhKx\}. \quad (4)$$

ここで、 z_n は n 番目のスラブの z 座標、 h は調波指数、 K は格子ベクトルの大きさ($K = 2\pi/\Lambda$)、そして、 $\tilde{\epsilon}_{h,n}$ は規格化複素調和強度係数であり、次式で与えられる。

$$\tilde{\epsilon}_n(x, z_n) = (1/\Lambda) \int_0^\Lambda f(x, z_n) \exp(-jhKx) dx. \quad (5)$$

ここで、関数 $f(x, z_n)$ は、0または1に等しく、ある x に対して、回折格子の比誘電率が、 ϵ_I か ϵ_{III} かのどちらかの値をとる。

3.1.2 . TEモードの結合波方程式

結合波表示では、各回折格子スラブ内の電場を周期構造内の場の空間高調波によって展開する。回折格子内のこれらの空間高調波は、回折格子外の回折次数に対応している。このように、変調した媒体における部分場は、散乱光として可視化でき、平面スラブを通して伝播するときに、互いに、前後のエネルギーと結合することが分かる。結合波理論では、結合場は次式のように表現される。

$$E_{2,n} = \sum_{i=-\infty}^{\infty} S_{i,n}(z) \exp(-j\boldsymbol{\sigma}_{i,n} \cdot \mathbf{r}). \quad (6)$$

ここで、 i は空間調波指数(整数)であり、 $S_{i,n}(z)$ は、空間高調場の強度である。Floque理論からの帰結として、 n 番目の回折格子の回折波ベクトル $\boldsymbol{\sigma}_{i,n}$ は次式で、表現できる。

$$\boldsymbol{\sigma}_{i,n} = \mathbf{k}_{2,n} - i\mathbf{K}. \quad (7)$$

ここで、 $\mathbf{K} = K\hat{x}$ である。また、 $\mathbf{k}_{2,n}$ はゼロ次($i=0$)の回折光であり、大きさ $k_{2,n} = 2\pi\epsilon_{0,n}^{1/2}/\lambda$ を持つ。 $\epsilon_{0,n}$ は n 番目のスラブ回折格子の平均比誘電率である。

領域IおよびIIIでの各々の i 次の回折場は n 番目のスラブ回折格子の内部で i 次の空間高調波の場と一致していなくてはならない。任意の i 及び n に対して、 $\mathbf{k}_{1i} \cdot \hat{x} = (\mathbf{k}_{2,n} - i\mathbf{K}) \cdot \hat{x} = \mathbf{k}_{3,i} \cdot \hat{x}$ となる。一様な領域IおよびIIIでは、前方あるいは後方に散乱される波の波動ベクトルは大きさが、 $|\mathbf{k}_{1i}| = |\mathbf{k}_1|$ あるいは $|\mathbf{k}_{3i}| = |\mathbf{k}_3|$ となる。ここで、 $k_3 = 2\pi\epsilon_{III}^{1/2}/\lambda$ である。

回折波ベクトルの全強度と x 成分が分かれば、 z 成分は $\mathbf{k}_{1i} \cdot \hat{z} = [|\mathbf{k}_1|^2 - (\mathbf{k}_{1i} \cdot \hat{x})^2]^{(1/2)}$ および、 $\mathbf{k}_{3i} \cdot \hat{z} = [|\mathbf{k}_3|^2 - (\mathbf{k}_{3i} \cdot \hat{x})^2]^{(1/2)}$ となる。それゆえ、すべての領域における全電場は次のように書ける。

$$E_1 = \exp[-j\{k_1(\sin\theta'x - \cos\theta'z)\}] + \sum_{i=-\infty}^{\infty} R_i \exp(-j[(k_1 \sin\theta' - iK)x - \{k_1^2 - (k_1 \sin\theta' - iK)^2\}^{1/2}z]), \quad (8)$$

$$E_{2,n} = \sum_{i=-\infty}^{\infty} S_{i,n}(z) \exp[-j\{(k_1 \sin\theta' - iK)x - (k_{2,n}^2 - k_1^2 \sin^2\theta')^{1/2}z\}], \quad (9)$$

$$E_3 = \sum_{i=-\infty}^{\infty} T_i \exp(-j[(k_1 \sin \theta' - iK)x - \{k_3^2 - (k_1 \sin \theta' - iK)^2\}^{1/2}(z-d)]). \quad (10)$$

領域 II では、TE モードの波動方程式は

$$\nabla^2 E_{2,n} + k^2 \epsilon_n(x, z_n) E_{2,n} = 0, \quad (11)$$

である。ここで、 $k = 2\pi/\lambda$ がそれぞれの n 番目の回折格子について成立しなくてはならない。式 (4) の $\epsilon_n(x, z_n)$ と式 (9) の $E_{2,n}$ を波動方程式に代入し、微分を行い、意味のある解を得るために各指数項の係数をゼロと置くと、 n 番目のスラブ格子についての厳密結合波の式は次のようになる。

$$0 = \frac{d^2 S_{i,n}(z)}{dz^2} - 2j(k_{2,n}^2 - k_1^2 \sin^2 \theta)^{1/2} \frac{dS_{i,n}(z)}{dz} + K^2 i(m-i) S_{i,n}(z) + k^2(\epsilon_{\text{III}} - \epsilon_1) \sum_{h=1}^{\infty} [\tilde{\epsilon}_{h,n} S_{i-h,n}(z) + \tilde{\epsilon}_{h,n}^* S_{i+h,n}(z)], \quad (12)$$

$$m = \frac{2\Lambda \epsilon_1^{1/2} \sin \theta}{\lambda}. \quad (13)$$

i は回折次数、 $S_{i,n}(z)$ は i 次の電場振幅、 λ は真空中の波長、 $k_{2,n}$ は $2\pi\epsilon_{0,n}^{1/2}/\lambda$ 、 k_1 は $2\pi\epsilon_1^{1/2}/\lambda$ である。 $\epsilon_{0,n}$ は n 番目のスラブ回折格子の平均比誘電率である。 m は式 (13) で定義されたパラメータであって、 m の実数部分が整数の場合にはブラッグ条件に相当している。 \hat{z} は位置を表すベクトルである。式 (12) から、入射角 θ 、波長 λ 、周期 Λ と各回折次数 i の回折効率との関係が導びかれる。

$i\lambda/\Lambda$ に注目すると、式 (14) のように括ることができる。

$$0 = \lambda^2 \frac{d^2 S_{i,n}(z)}{dz^2} - 4\pi j \lambda (\epsilon_{0n} - \epsilon_1 \sin^2 \theta)^{1/2} \frac{dS_{i,n}(z)}{dz} + (2\pi\lambda/\Lambda)^2 i \left(\frac{2\Lambda \epsilon_1^{1/2} \sin \theta}{\lambda} - i \right) S_{i,n}(z) + 4\pi^2 (\epsilon_{\text{III}} - \epsilon_1) \sum_{h=1}^{\infty} [\tilde{\epsilon}_{h,n} S_{i-h,n}(z) + \tilde{\epsilon}_{h,n}^* S_{i+h,n}(z)]. \quad (14)$$

新しく $i\lambda/\Lambda$ を変数とする係数 $c_{1,i}$ 、 $c_{2,i}$ を導入すると式 (15) となる。 $i\lambda/\Lambda$ が一定なら式 (14) は λ と z の関数とみることができる。

$$0 = \lambda^2 \frac{d^2 S_{i,n}(z)}{dz^2} - j\lambda c_{1,i} \frac{dS_{i,n}(z)}{dz} + c_{2,i} S_{i,n}(z) + 4\pi^2 (\epsilon_{\text{III}} - \epsilon_1) \sum_{h=1}^{\infty} [\tilde{\epsilon}_{h,n} S_{i-h,n}(z) + \tilde{\epsilon}_{h,n}^* S_{i+h,n}(z)]. \quad (15)$$

新しい変数 $X_{1,i,n}$ 、 $X_{2,i,n}$ を導入すると、式 (15) は式 (17)、(18) のように連立の線形微分方程式になる。

$$X_{1,i,n} = S_{i,n}(z). \quad (16)$$

そして、 $X_{2,i,n}$ は次のように定義される。

$$X_{2,i,n} = \lambda dX_{1,i,n}/dz. \quad (17)$$

式 (15) は

$$0 = \lambda \dot{X}_{2,i,n} - jc_{1,i}X_{2,i,n} + c_{2,i}X_{1,i,n} + 4\pi^2(\epsilon_{\text{III}} - \epsilon_{\text{I}}) \sum_{h=1}^{\infty} [\tilde{\epsilon}_{h,n}X_{1,i-h,n} + \tilde{\epsilon}_{h,n}^*X_{1,i+h,n}], \quad (18)$$

である。ここで n 番目のスラブ回折格子 に対する行列を書くと次のようになる。

$$\lambda \begin{bmatrix} \vdots \\ \dot{X}_{1,p,n} \\ \vdots \\ \dot{X}_{2,p,n} \\ \vdots \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{p,q,n} & \vdots & b_{p,q,n} \\ \dots & \dots & \dots \\ c_{p,q,n} & \vdots & d_{p,q,n} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \vdots \\ \tilde{X}_{1,p,n} \\ \vdots \\ \tilde{X}_{2,p,n} \\ \vdots \end{bmatrix}. \quad (19)$$

ここで、 $\tilde{X}_{l,p,n} \equiv X_{l,p,n}$ ($l = 1, 2$), $\dot{X} = dX/dz$ である。4つの小行列の要素 ($p = 1$ から s および $q = 1$ から s) は n 番目のスラブ回折格子 に対する式 (17) と (18) で定まる。整数 p, q はそれぞれ小行列の行と列の指数である。これら指数の最大値 s は、解析の結果得られる最大の回折次数の数に等しい。 $p = 1$ が、解析で得られる最も負の次数 (i の値) に対応している。また、 $p = s$ が最も正の次数に対応している。たとえば、解析の結果、もし $i = 0$ (回折せず) を中心に偶数の回折数を得られたのなら $p = i + (s + 1)/2$ となる。式 (19) は係数が z に依存しないので、簡略に式 (20) のようにかける。ここで、 \dot{X} と X は式 (17) と (18) にあるカラムベクトルである。また、 \mathbf{A} は係数行列の全体である。 \mathbf{A} は無限行列だが、実用上は任意の精度で打ち切った行列となる。

式 (20) で \mathbf{A} が逆行列を持てば形式的に式 (21) のように書ける。固有値 ($\lambda_{i,n}$) と固有ベクトル ($\omega_{i,n}$) は行列 \mathbf{A} / λ で定まるので $\lambda \cdot \lambda_{i,n}$ と $\omega_{i,n}$ は λ によらない定数となる。係数 C は境界条件 ($z = 0, nd/N$) から求められる。

$$\lambda \dot{X} = \mathbf{A}X, \quad (20)$$

$$X = Ce^{Az/\lambda}. \quad (21)$$

E を電場としたとき、 n 番目と $(n + 1)$ 番目のスラブ回折格子 ($z = nd/N$) の境界において、 E の正接に対する境界条件は次式である。

$$\begin{aligned}
& \sum_{q'=1}^{2s} C_{q',n} \omega_{p',q',n} \exp[\{\lambda_{q',n} - j(\sigma_{i,n} \hat{z})\}nd/N] \\
= & \sum_{q'=1}^{2s} C_{q',n+1} \omega_{p',q',n+1} \exp[\{\lambda_{q',n+1} - j(\sigma_{i,n+1} \hat{z})\}nd/N].
\end{aligned} \tag{22}$$

$\omega_{p',q',n}$ と $\lambda_{q',n}$ は行列 A/λ の固有値と固有ベクトルである。整数 p' と q' は固有ベクトル $[\omega]$ の列と行の指標で $p' = 1$ から $2s$, $q' = 1$ から $2s$ である。 s の最大値はここで得られる回折の数である。

N 番目のスラブ回折格子と領域 III の境界 ($z = d$) において、 E の正接に対する境界条件は次式である。

$$T_i = \sum_{q'=1}^{2s} C_{q',N} \omega_{p',q',N} \exp[\{\lambda_{q',N} - j(\sigma_{i,N} \hat{z})\}d]. \tag{23}$$

また、 i 次の回折効率 DE_{3i} は次式のように T_i より計算できる。

$$DE_{3i} = \text{Re}[(k_{3i}\hat{z})/(k_{10}\hat{z})]T_iT_i^*. \tag{24}$$

式 (23), (24) 中の次の項も、 $i\lambda/\Lambda$ を変数とする。

$$\begin{aligned}
& \exp[\{\lambda_{q',N} - j(\sigma_{i,N} \hat{z})\}nd/N] \\
= & \exp[\{\lambda\lambda_{q',N} - j\lambda(\sigma_{i,N} \hat{z})\}nd/(N\lambda)],
\end{aligned} \tag{25}$$

$$\lambda\sigma_{i,N} = 2\pi(\epsilon_{0n})^{1/2} - 2\pi i\lambda/\Lambda. \tag{26}$$

\mathbf{A} は λ に対して、独立であるので、 $\omega_{p',q',n}$ と $\lambda\lambda_{q',n}$ も λ に対して、独立である。 T_i を TE_i として、 $L = i\lambda/\Lambda$ を用いて式 (23) を書き直すと次式のようになる。

$$TE_i = \sum_{q'=1}^{2s} FE_{q'}(L, d/\lambda) \exp[GE_{iq'}(L)d/\lambda]. \tag{27}$$

ここで、

$$FE_{q'}(L, d/\lambda) = C_{q',N} \omega_{p',q',N}, \tag{28}$$

$$GE_{iq'}(L) = \exp[\{\lambda_{q',N} - j(\sigma_{i,N} \hat{z})\}], \tag{29}$$

である。 TE_i は変数を i, λ, Λ, d とするとき、独立な変数として $i\lambda/\Lambda$ と d/λ の二つだけを持つのでこの関数は次のように書ける。

$$TE_i = TE_i(L, d/\lambda). \tag{30}$$

全反射率 RE_{total} は次のようになる。

$$RE_{total} = 1 - \sum_i TE_i(L, d/\lambda). \quad (31)$$

このように、 TE_i と同じ変数を持つ。

3.1.3 . TMモードのベクトル波動方程式

TEモードと同様にして、TMモードの回折効率を与える式 TM_i を波動方程式から計算することができる。定数に対して、特に定義していないものはTEモードと同じ記号を用いている。TMモードの場合については、以下のようにして回折効率を導くことができる。以下では、例として、正弦状の屈折率分布を持つ回折格子を想定する。損失のある回折格子の比誘電率は次のように書ける。

$$\epsilon(x, z) = \hat{\epsilon}_0 + \epsilon_1 \cos\{K(x \sin \phi + z \cos \phi)\}. \quad (32)$$

ここで、 $\hat{\epsilon}_0$ は次式で与えられる比誘電率である。

$$\hat{\epsilon}_0 = \epsilon_0 - j\sigma_0/\omega\epsilon_0. \quad (33)$$

ϵ_0 は平均比誘電率、 σ_0 は平均導電率である。 ω は光角周波数、 ϵ_0 は自由空間の透磁率、 ϵ_1 は正弦波形状をした回折格子の比誘電率の大きさ、 ϕ は回折格子の z 軸に対する傾き角、 K は格子ベクトルの大きさである。式 (32) は正弦波形状の透磁率をあらわすが、他の形状でも同様に扱うことができる。電磁場が電場損失のある誘電体の回折格子内部に存在し、空間的に比誘電率が変わる時、マクスウェルの方程式から直接に得られるベクトル波方程式が電磁場を与える。電場のベクトル波方程式は、

$$\nabla^2 \bar{E} + \nabla\{\bar{E} \cdot (\nabla\epsilon/\epsilon)\} + k^2\epsilon(x, z)\bar{E} = 0 \quad (34)$$

となる。ここで、 \bar{E} は電場、 $\epsilon(x, z)$ は周期的な複素比誘電率である。同様に、磁場ベクトル波方程式は、次のようになる。

$$\nabla^2 \bar{H} + (\nabla\epsilon/\epsilon) \times \nabla \times \bar{H} + k^2\epsilon(x, z)\bar{H} = 0. \quad (35)$$

ここで、 \bar{H} は磁場である。これらの一般的な波動方程式は、特定の偏光に対しては、かなり単純化できる。

TMモードの偏光波動方程式は、電場が入射平面内にあり、この平面が格子ベクトルを含む。磁場は y 方向だけにある。つまり、 $\bar{H} = \bar{H}_y$ である。磁場は y 方向だけであるので、式 (35) を使うのが便利である。

このベクトル波動方程式は次の等式を用いると簡略化できる。 $\nabla\epsilon \times \nabla \times \bar{H} \equiv \nabla(\nabla\epsilon \cdot \bar{H}) - (\nabla\epsilon \cdot \nabla)\bar{H} - (\bar{H} \cdot \nabla)\nabla\epsilon - \bar{H} \times (\nabla \times \nabla\epsilon)$ および $\nabla \times \nabla\epsilon \equiv 0$ 。TMモードの偏光では H は $\nabla\epsilon$ に垂直であり、 $\nabla\epsilon \cdot H = 0$ と $(\bar{H} \cdot \nabla)\nabla\epsilon = 0$ が成立する。磁場のベクトル波動方程式は次のように簡単になる。

$$\nabla^2 H - \{(\nabla\epsilon/\epsilon) \cdot \nabla\}H + k^2\epsilon(x, z)H = 0. \quad (36)$$

この方程式はTEモードの式 (11) と比べて項が増えている。

3.1.4. TMモードの結合波方程式

TMモードの波を与える式(36)はスカラー結合波方程式の組へと変形される。ベクトル項は次のように展開される。

$$-\left[\frac{\nabla\epsilon}{\epsilon}\cdot\nabla\right]H=\frac{\epsilon_1\sin(\bar{K}\cdot\bar{r})}{\epsilon_0+\epsilon_1\cos(\bar{K}\cdot\bar{r})}\left[\sin\phi\frac{\partial H}{\partial x}+\cos\phi\frac{\partial H}{\partial z}\right]\frac{2\pi}{\Lambda}. \quad (37)$$

このように y 成分だけが残る。最初の項はフーリエ級数に展開できる。

$$\frac{\epsilon_1\sin(\bar{K}\cdot\bar{r})}{\epsilon_0+\epsilon_1\cos(\bar{K}\cdot\bar{r})}=-j\sum_{h=-\infty}^{\infty}A_h\exp(-jh\bar{K}\cdot\bar{r}). \quad (38)$$

ここで、 $h \geq 1$ のとき $A_h = [\{(\hat{\epsilon}_0/\epsilon_1)^2 - 1\}^{1/2} - (\hat{\epsilon}_0/\epsilon_1)]^h$, $A_{-h} = -A_h$ となり、 $A_0 = 0$ である。TMモードの場合、磁場は空間高調波に展開される。

$$H(x,z)=\sum_{i=-\infty}^{\infty}U_i(z)\exp(-j\bar{\sigma}_i\cdot\bar{r}). \quad (39)$$

式(37) - (39)を式(36)に代入すると、TMモードの結合波方程式は次のようになる。

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{d^2U_i(z)}{dz^2} - 4\pi j \left[\frac{(\hat{\epsilon}_0 - \epsilon_1 \sin^2 \theta')^{1/2}}{\lambda} - \frac{i \cos \phi}{\Lambda} \right] \frac{dU_i(z)}{dz} \\ &\quad - 2\pi j \frac{\cos \phi}{\Lambda} \sum_h A_h \frac{dU_{i-h}(z)}{dz} \\ &\quad + K^2 i(m-i)U_i(z) + \frac{2\pi^2 \epsilon_1}{\lambda^2} \{U_{i+1}(z) + U_{i-1}(z)\} \\ &\quad + K^2 \sum_h \{(i-h-m/2) \times A_h U_{i-h}(z)\}. \end{aligned} \quad (40)$$

ここで、 ϵ_1 は、領域 I の平均比誘電率である。また、 m は次式で与えられる。

$$m = \frac{2\Lambda\{\epsilon_1^{1/2}\sin\phi\sin\theta' + (\hat{\epsilon}_0 - \epsilon_1\sin^2\theta')^{1/2}\cos\phi\}}{\lambda}. \quad (41)$$

TEモードの場合と同様、行列 \mathbf{A} は $i\lambda/\Lambda$ と λ/Λ の関数となる。磁場振幅 U に関するすべての係数が $i\lambda/\Lambda$ と λ/Λ の関数だからである。

TM_i は 3 つの変数で表せる。

$$TM_i = \sum_{q'=1}^{2s} FM_{q'}(L, \lambda/\Lambda, d/\lambda) \exp[GM_{iq'}(L)d/\lambda]. \quad (42)$$

ここで、

$$FM_{q'}(L, \lambda/\Lambda, d/\lambda) = C_{q',N} \omega_{p',q',N}, \quad (43)$$

$$GM_{iq'}(L) = \exp[\{\lambda_{q',N} - j(\sigma_{i,N} \hat{z})\}d], \quad (44)$$

である。 TM_i は $i\lambda/\Lambda$ と λ/Λ と d/λ が変数であるので、次のように書ける。

$$TM_i = TM_i(L, \lambda/\Lambda, d/\lambda). \quad (45)$$

回折格子が、誘電体でなく金属の場合にも、似たやり方で回折効率を求めることができる⁴⁹⁾。また、このとき、導出された式は、誘電率が異なることを除けば、似た式となっている。

3.2. 回折効率の計算方法

二等辺三角形の鋸歯型回折格子を主な計算対象とし、界面は一つとした。入射角は0度である。計算では基材の屈折率は1.5、空気の屈折率は1とし、波長、アスペクト比、偏光を適宜変えた。屈折率波長依存性は回折角に対する影響が小さいので考慮していない。例えば、ポリカーボネートは、可視光域で最も屈折率が変化する光学樹脂であり、屈折率は1.5から1.6くらいまで変化する。しかし、このくらいの変化では、回折パターンはほとんど変化しない。

RCWAの計算は *DiffraMODTM* 1.5 (RSoft Design Group, Ossining, NY, USA) を用いた。

3.3. 電場分布の計算方法

FDTDの計算には本学で開発され本研究室で改良されたNS-FDTD (Nonstandard Finite differential time domain) 法のプログラムを用いた^{42),43)}。Minimum feature size は 0.1λ 、 λ/h は10である。 h はセルサイズ、 λ は波長である。計算のステップ数は250、Y方向のグリッド数は1000、X方向のグリッド数は320である。光はX方向に進む。時間ステップは $\lambda/(0.83c/n_{III})$ である。ここで c は光速である。

3.4. Fraunhofer 近似

三角形の回折格子の回折角度分布を計算し、ピーク形状を Fraunhofer の単スリット回折パターンで近似した。

式(46)は Fraunhofer の単スリット回折パターンを与える⁵⁰⁾。

$$I_T(\theta) = A^2 \Lambda_2^2 [\sin\{\pi \Lambda_2 (\sin \theta - \sin \theta_i) / \lambda_2\} / (\pi \Lambda_2 (\sin \theta - \sin \theta_i) / \lambda_2)]^2. \quad (46)$$

ここで、 $I_T(\theta)$ は回折強度の角度分布で、 Λ_2 はスリット幅、 A は定数、 θ_i が入射角、 θ が回折角である。この式を用い、波長とアスペクト比を変え、各次数の回折パターンの包絡線の幅を見積もった。Case B では屈折率を n_{III} とし、 λ_2 を $n_{III}\lambda_2$ で置き換える。 Λ_2 を5として、変数 A 、 θ 、 λ_2 を変化させた。

第4章. 回折効率と電場の評価結果

4.1. 回折格子の形状評価結果

周期1.08、1.8、3、5 μm の回折格子は基材フィルムに転写した回折格子をはさみで切り出して、最も形状の整ったところを探した。基材フィルムには東洋紡のPETフィルムを用いた。図9 (a)-(d)はそのSEM像である。周期10 μm の回折格子は断面を見るために、断面を樹脂で固めてから切り出した。図9 (e)はそのSEM像である。

回折格子のAFM断面像は図10 (a)-(e)に示した。周期1.08、1.8、3、5 μm の回折格子は、いずれもアスペクト比が0.48であり、中心線平均表面粗さは12 nmであった。粗さの評価は格子溝の稜線に沿った斜面で計測した。

周期10 μm の回折格子は周期10 μm 深さ7 μm の二等辺三角形をしており、基材の厚みは2 mmであった。また、中心線平均表面粗さは60 nmであった。

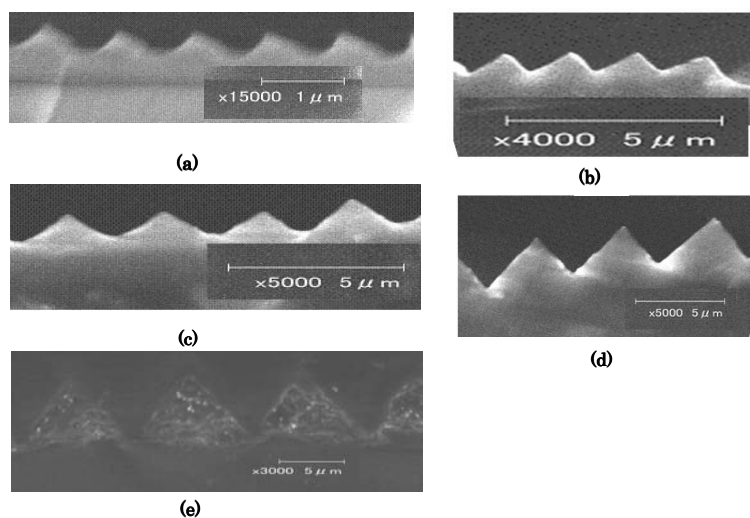


Fig. 9. SEM micrographs of samples with a different period. (a) 1.08 μm , (b) 1.8 μm , (c) 3 μm , (d) 5 μm , and (e) 10 μm .

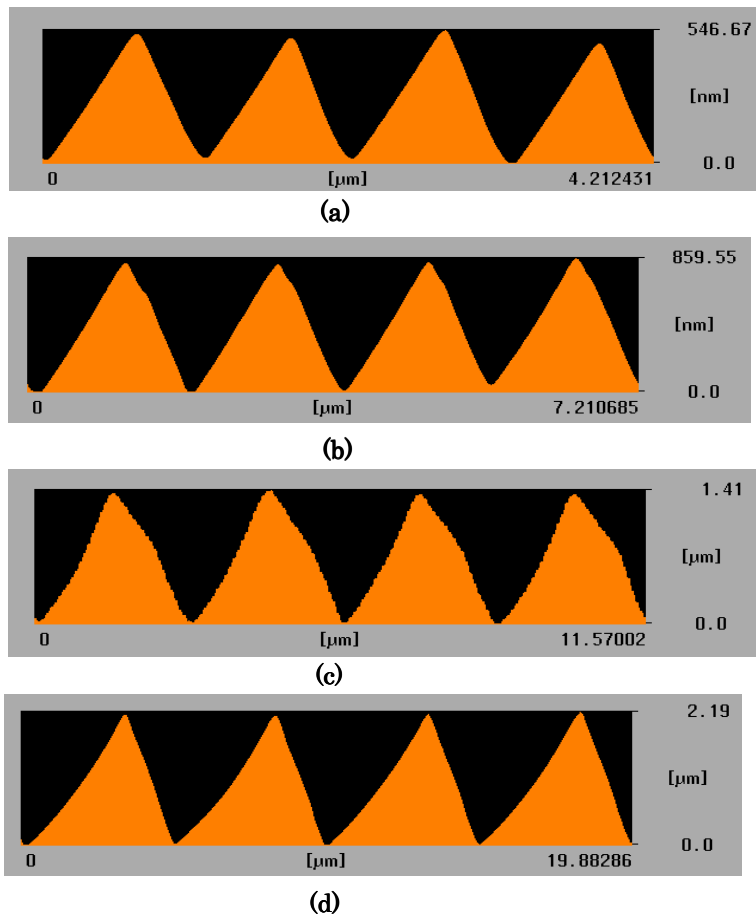


Fig. 10. AFM images of samples with a different period. (a) $1.08\mu\text{m}$, (b) $1.8\mu\text{m}$, (c) $3\mu\text{m}$, and (d) $5\mu\text{m}$.

4.2. 回折光の波長分布の測定結果と計算結果

目視の評価結果を表1にまとめた。周期 $3\mu\text{m}$ では拡散光に対してだけが、回折光が白色となっており、たとえば、照明用発光体から出る光の反射率防止用途に使えるが、色に対する要求の厳しい一般のディスプレイには使えない。一方、周期 $5\mu\text{m}$ 以上、つまり、 Λ/λ が9以上では大抵の用途に使えることが分かる。

Table 1. Color of diffracted light for different periods.

Case	parallel / diffuse	transmission / reflection	vertical / oblique	1.08 μm	1.8 μm	3 μm	5 μm	10 μm
A	P ^a	T	V ^b	ra. ^c	ra.	ra.	re. wh.	wh.
A	P	T	O	ra.	ye.	ra.	re. wh.	wh.
A	P	R	V	ye. gr.	ra.	ye. gr.	wh.	gr. wh.
A	P	R	O	ye.	ra.	ye.	wh.	wh.
A	D	T	V	wh. blue	wh. ra.	wh. ra.	wh.	wh.
A	D	T	O	wh. blue	wh. gr.	wh. gr.	wh.	wh.
A	D	R	V	ye.	wh. ye.	red	wh.	wh.
A	D	R	O	red	ye. gr.	wh.	wh.	wh.
B	P	T	V	ra.	ra.	ra.	wh. red	wh.
B	P	T	O	ra.	ra.	ra.	ra.	wh.
B	P	R	V	ye. gr.	or.	ra.	ra.	gr. wh.
B	P	R	S	ra.	ra.	ra.	ra.	wh.
B	D	T	V	wh. gr.	re. wh.	wh.	wh.	wh.
B	D	T	S	wh. ra.	gr. wh.	gr. wh.	wh.	wh.
B	D	R	V	-	-	-	-	wh.
B	D	R	S	-	-	-	-	wh.

^a 'Parallel' and 'Diffuse' are the angular distribution of incident light.

^b 'Vertical' and 'Oblique' indicate incidence angle. 'Vertical' is normal and 'Oblique' is 45° .

^c Color is represented as abbreviation. 'wh.' is whitish or white. 'ra.' is rainbow-colored or rainbow. 'gr.' is greenish or green. 'ye.' is yellowish or yellow. 're.' is reddish. 'or.' is orange.

透過光を最も強い回折光の角度で観察したところ、図 1 1, 1 3 のように、波数に対して離散的な分布をしていることが分かった。

周期 $10 \mu\text{m}$ の回折格子に拡散体を加えて測定した分光曲線を基準として、他の条件の測定結果を相対強度で表示した。いずれの結果も、 400 から 800 nm の波長域で、平均強度が 1 となるように、規格化されている。入射角度は格子面に対して 45 度である。図 1 1, 1 2 は case A、図 1 3, 1 4 は case B である。各ピークの横軸の波長に対する広がり、入射光が平行光でなく、また、検出側も受光素子の幅があるために生じたと考えられる。ゼロ次回折光では、 ± 2 度広がっている。周期が $5 \mu\text{m}$ のときの case A と case B のピークの間隔はそれぞれ、 6.9 度と 14.6 度であり、2 倍のひらきがある。この差は、case A では回折次数が -7 から 21 までであるのに対し、case B では -2 から 15 と範囲が狭いことに起因している。次数の範囲が広い方が、波長が変化したときの、回折角度の変化が小さい。

図 1 1 の周期 $5 \mu\text{m}$ では、ピークの波数差 $\Delta (1/\lambda)$ の実験値は $0.27 \pm 0.01 \mu\text{m}^{-1}$ で一定である。輝度は波数に対して周期的に変化する。拡散体を挿入したとき、図 1 1, 1 3 の測定と同じ角度で観察したところ図 1 2, 1 4 のようになった。周期が $5 \mu\text{m}$ 以下では、波数に対して回折効率はある傾きを持って変化することが分かる。

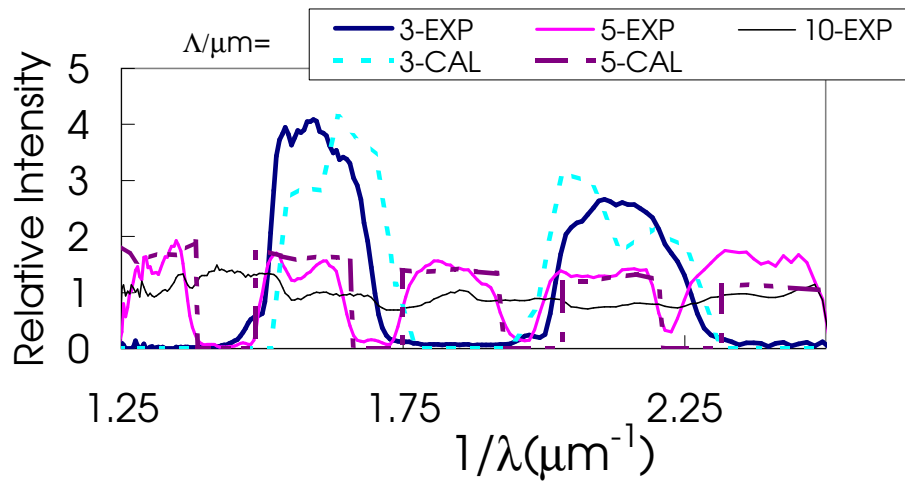


Fig. 11. Spectroscopic profile of diffracted light of experiment and its simulation in case A. The period is 3, 5 and $10\mu\text{m}$. The incidence angle θ_0 is 45° and ds is finite.

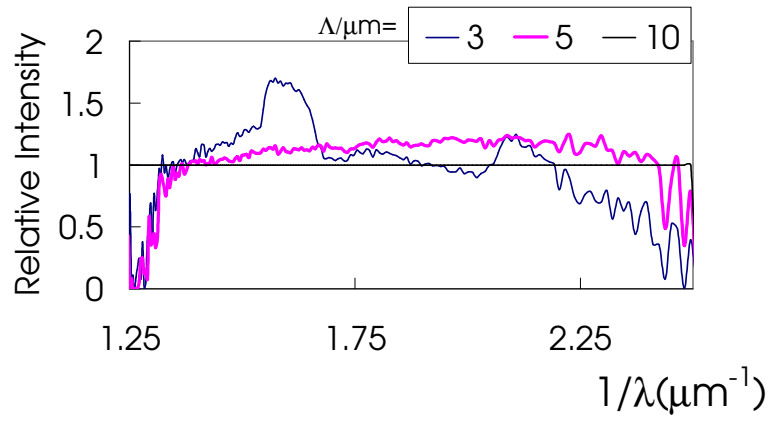


Fig. 12. Spectroscopic profile of diffracted light in case A. The period of the gratings are 3, 5 and 10 μm . The diffuser was inserted in front of the grating. The incidence angle θ_0 is 45° and ds is finite.

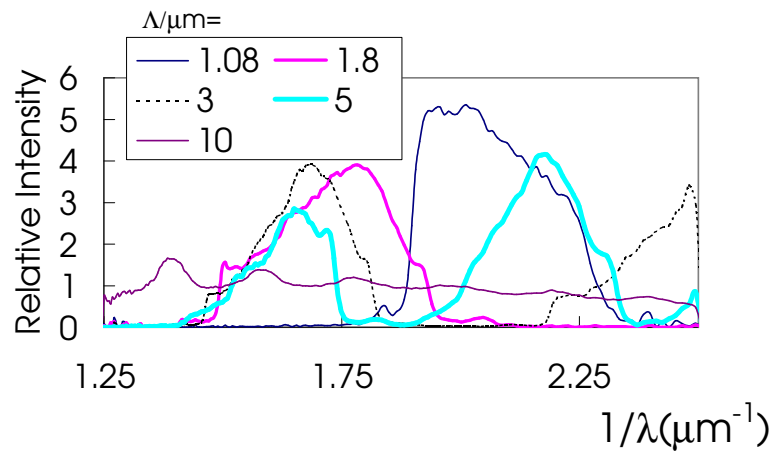


Fig. 13. Spectroscopic profile of diffracted light in case B. The period of the gratings are 1.08, 1.8, 3, 5 and $10\mu\text{m}$. The incidence angle θ_0 is 45° .

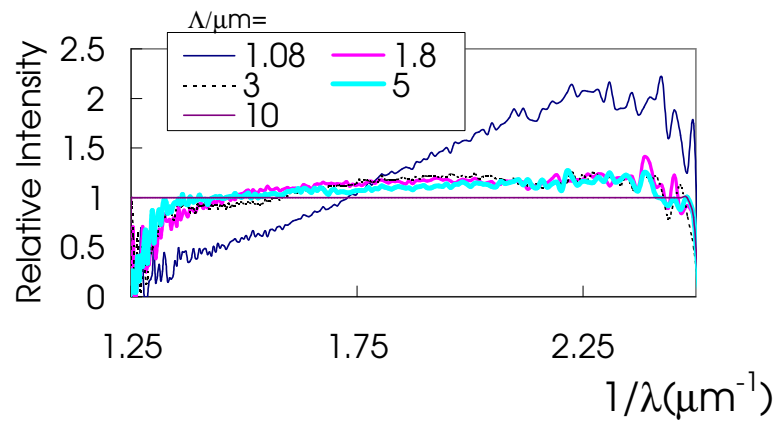


Fig. 14. Spectroscopic profile of diffracted light in case B. The period of the gratings are 1.08, 1.8, 3, 5 and 10 μm . The diffuser was inserted in front of the grating. The incidence angle is 45° .

次にこの波数分布をシミュレーションする方法とその結果について述べる。アスペクト比0.48で波長を変えて、回折角度分布を計算したのが図15である。横軸の回折次数に対して、 $\Lambda/\lambda = 2.6, 1.6, 1.2, 1.0$ のピークに着目すると、この順でピークの回折次数が小さくなることが分かる。他の Λ/λ についても同様の傾向がある。このピークについて、回折角と波数の関係をプロットすると、図16のようになる。このように、ピークのある位置はある角度を中心に振動する。 Λ が $3\mu\text{m}$ の場合には、波数によって、出射角度が大きく異なる。そこで、さらに、ピークの次数とその隣の次数についてプロットすると図17のようになる。最大の効率を与える回折次数が次々と切り替わることでグラフの曲線が鋸刃状になる。

入力用光ファイバーへ入射する光の角度範囲を $\pm 2^\circ$ として、この範囲に入る光の回折効率を考慮し、計算した結果を図11に示した。実験結果とよく一致している。さらに、回折格子の周期による波長分布の傾きの違いについて検討した。図16の周期3、5、 $10\mu\text{m}$ の曲線の最小二乗近似は次の式(47)、(48)、(49)で与えられる。角度を y 、波長 λ を x として、次式のようにになる。

$$y = -14.7x + 7.8 \quad (47)$$

$$y = 4.2x - 0.6 \quad (48)$$

$$y = 6.1x + 11.7 \quad (49)$$

この傾きと拡散体を入れた分光スペクトルの傾きとの関係は、すりガラスによる拡散がどの程度かに依存する。しかしながら、周期 $3\mu\text{m}$ のときに、長波長の回折効率が短波長の回折効率より小さいという実験結果を定性的に説明できる。

このように計算では、図11-14の実験結果と同様、周期が $3\mu\text{m}$ のとき反射率の波長依存性が大きい。

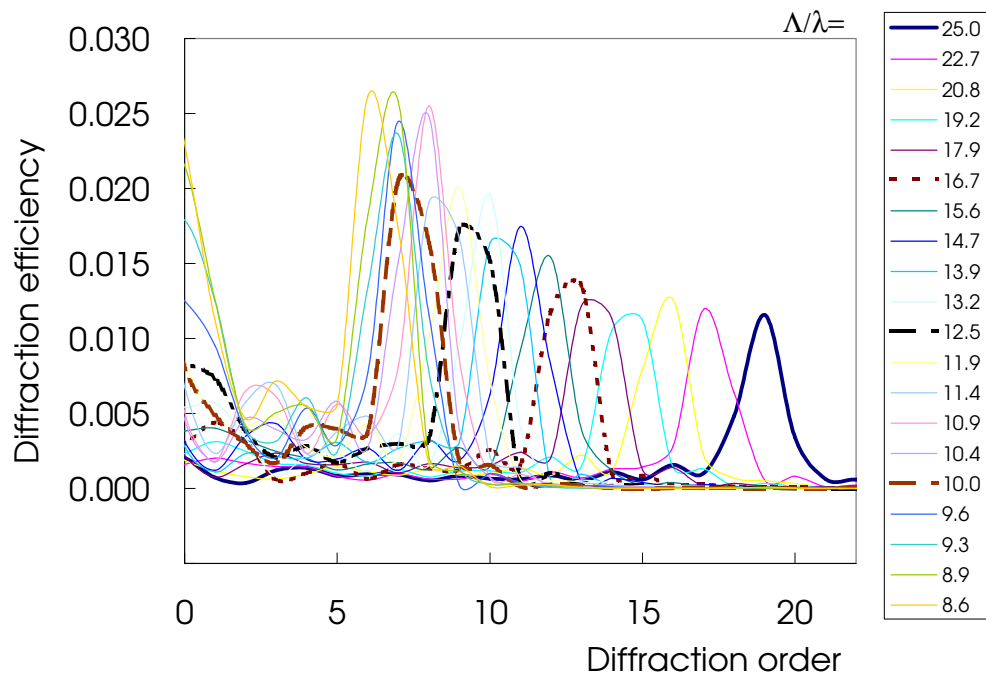


Fig. 15. Distribution of diffraction efficiency against diffraction order of the grating in case A for different wavelength. The mode is TE mode. The incidence angle is 45° . Λ/λ is varied from 8.6 to 25.0.

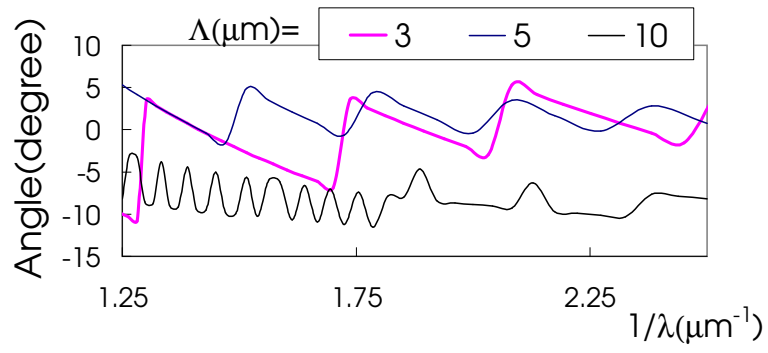


Fig. 16. The diffraction angle at the maximum diffraction efficiency of the grating with different periods. The diffraction efficiency with diffraction order more than 0 was calculated. Incidence angle was set to 45° in case A and ds is finite. The mode is TE mode. The aspect ratio is 0.48 for the periods of 3 and $5\mu m$, and is 0.7 for the period of $10\mu m$. The angle of the period $10\mu m$ is added by 25° .

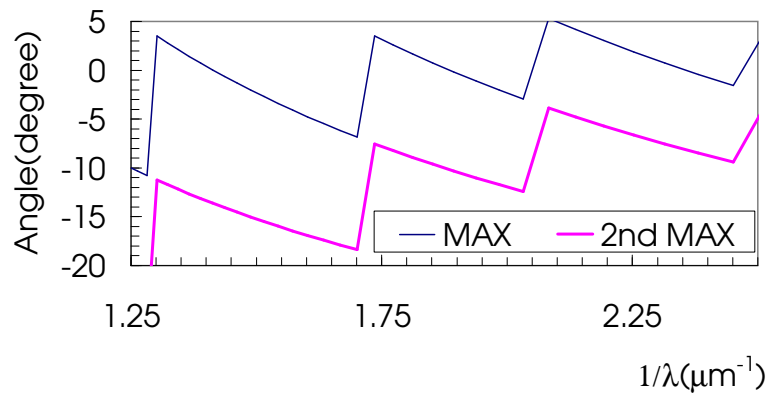


Fig. 17. The angle of the maximum diffraction efficiency of the grating with period $3\mu\text{m}$. The angle of the second maximum diffraction efficiency is also shown. Incidence angle was set to 45° in case A. The mode is TE mode. The aspect ratio is 0.48.

4.3. 全反射率の測定結果と計算結果

回折角度分布の次に、全反射率について実験と計算の結果を比較した。表2は、有機光学製の周期 $10\ \mu\text{m}$ の回折格子面に光を垂直に入射させたときの全反射率を示している。この反射率の計測は、図3、4にある光学系で行った。TEモードでは反射率が大きいため、相対的な実験誤差が小さく、よい一致が得られた。しかし、TMモードでは反射率が小さいため実験誤差が大きく、あまり一致していない。

さらに、同じ回折格子について、図5のように格子線に沿った斜め45度入射を行った。全反射率は、TEモードが0.1%、TMモードも0.1%となり、実験上の偏光による差は認められなかった。

Table 2. Total reflectivities of experiment and calculation as to the surface relief of the grating in case A. The polarizations are TE and TM.

Mode	Exp.(%)	Calc. (%)
TE	0.6	0.6
TM	0.1	0.02

4.4. 偏光選択比の測定結果と計算結果

偏光選択について実験と計算の結果を比較した。反射率の測定は図4のように行った。また、計算に用いた膜厚 ds は共焦点顕微鏡で測定したものであるが、測定誤差を考慮して、値を修正した。例えば、測定された膜厚が $2\ \mu\text{m}$ である場合、膜厚不均一であると考えて、1.9、2および2.1 μm の3条件について、反射率の計算を行い、その平均を用いた。また、共焦点顕微鏡自体の測定値の誤差も $\pm 0.1\ \mu\text{m}$ と考えて、計算した。最も実験値と合う、膜厚および偏光選択比の計算結果を表3と4に示した。

Table 3. The most suitable thickness of the grating. The calculated thickness was adjusted so that calculated reflectivity became that of experiment.

Period(μm)	1.08	1.8	3	5
Exp.(μm)	6.0	5.3	11.2	11.9
Calc.(μm)	5.95	5.25	11.20	12.00

4.5. 全反射率の波長依存性の計算

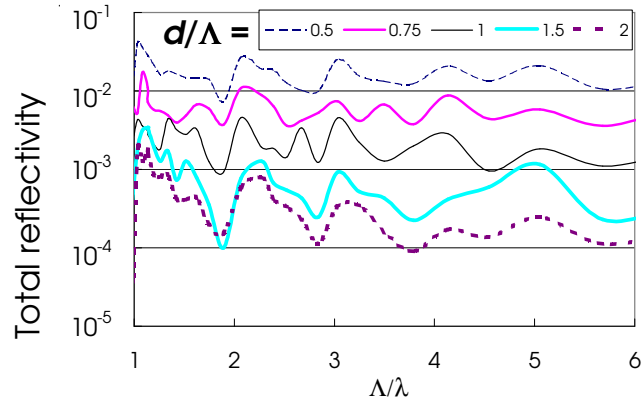
以上のように、可視光では周期が $3\ \mu\text{m}$ のとき、つまり、 Λ/λ にして、6以下のときに、波長依存性が大きい。一方で、この領域では大きな回折効果が期待できる。 Λ/λ にして、6以下で波長依存性を小さくするにはどうすればよいか。まず、全反射率を波長を変えて

Table 4. The ratio of total reflectivities TE/TM. Total reflectivities of experiment and calculation as to the grating with the base and the surface relief in case A are shown. The polarizations are TE and TM. Λ/λ is varied from 1.7 to 7.9.

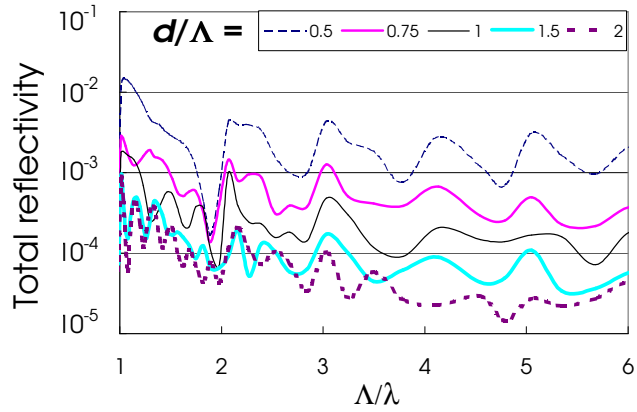
Λ/λ	1.7	2.8	4.7	7.9
Exp.	2.2	1.7	2.1	2.2
Calc.	1.8	1.4	2.0	2.1

計算した。図 1 8 は case A で ds が無限の場合の結果である。図 1 9 は case B で ds が無限の場合の結果である。Case A, case B 共に、 Λ/λ が 2, 3, 4 ... の整数倍で、全反射率が極大となる。このように ds が無限の二等辺三角形の鋸歯型回折格子は、 Λ/λ に対する、反射率周期性が特徴である。

ds が 0 の場合には、TMモードで、 d/Λ が 2 以上の場合を除き、 ds が無限の場合のような反射率周期性はみられない。



(a) TE mode



(b) TM mode

Fig. 18. Wavelength dependence of reflectivity on the surface relief in case A. The aspect ratio is varied from 0.5 to 2. d_s is set to infinity in Fig. 3. (a) Polarization is TE mode. (b) Polarization is TM mode.

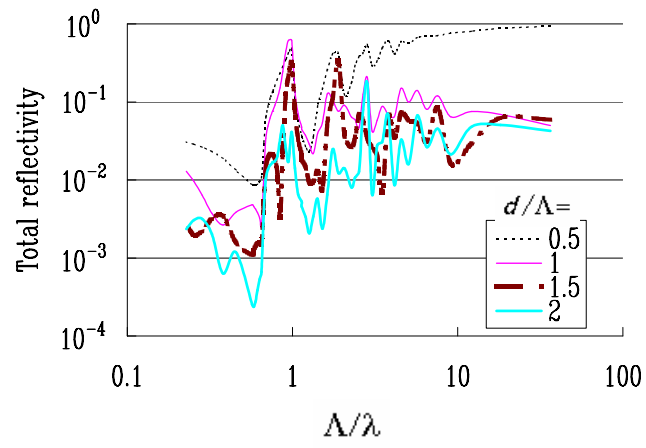


Fig. 19. Periodicity of the total reflectivity for the different aspect ratio d/Λ in case B. The mode is TE.

4.6 . 電場分布の計算

Case A と case B について、反射率の変動と散乱光の電場分布の関係を調べた。図 2 0 は計算した格子形状と電場位相のスケールを示している。また、格子の一つを取り出して、電場位相を示した。図 2 1 は case A の TM モードの電場分布である。回折格子の底辺に沿って電場の強い area がある。 Λ/λ が 2 と 4 に対して、area の数はそれぞれ 2, 4 であり、 Λ に比例している。図 2 2 - 2 4 は case A の TE モードの電場分布である。いずれも回折格子の裏面なし、つまり d_s が無限大である。図 2 2 では、 Λ/λ が 2 と 4 の場合について計算した。図 2 3 では、 d/Λ が 1, 2 および 3 の場合について計算した。アスペクト比や偏光によらず、area の数は Λ に比例することが分かる。

図 2 4 は反射率が (a), (b), (c) の順に大小大である。図 2 5 は case B の TE モードの電場分布であり、反射率が (a), (b), (c) の順に大小大である。図 2 4 では、反射率の高い (a)(c) のときに、電場の強い領域が回折格子の底辺の先端近傍に位置する。一方、図 2 5 では、反射率の低い (b) のときに、電場の強い領域と回折格子の斜辺との重なりが小さい。

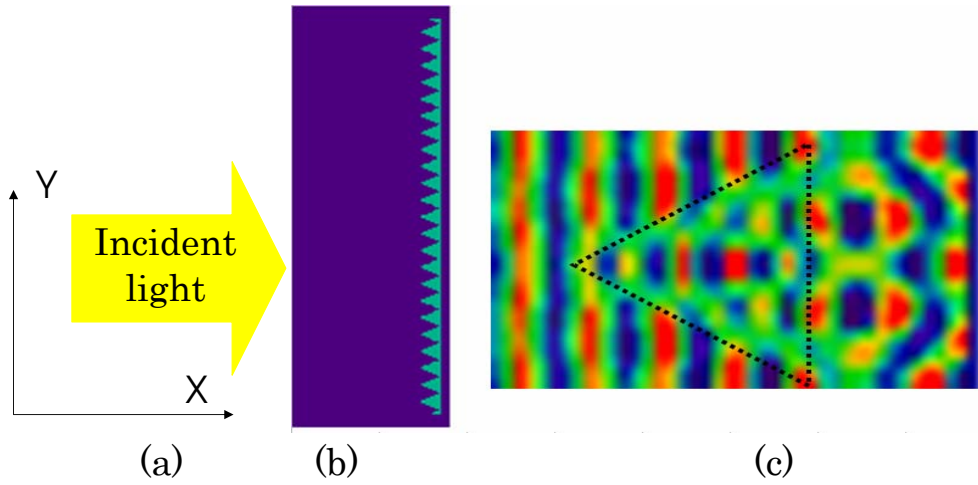


Fig. 20. (a) The axis of electric field. (b)The grating and the field for FDTD calculation (c) The phase distribution of both the incident light and scattered light in TM mode and case A. One of the grooves in (b) is shown. The electric field along Y axis is shown. The period is 4λ and the aspect ratio is 1. ds is set to zero. Phase value is relative.

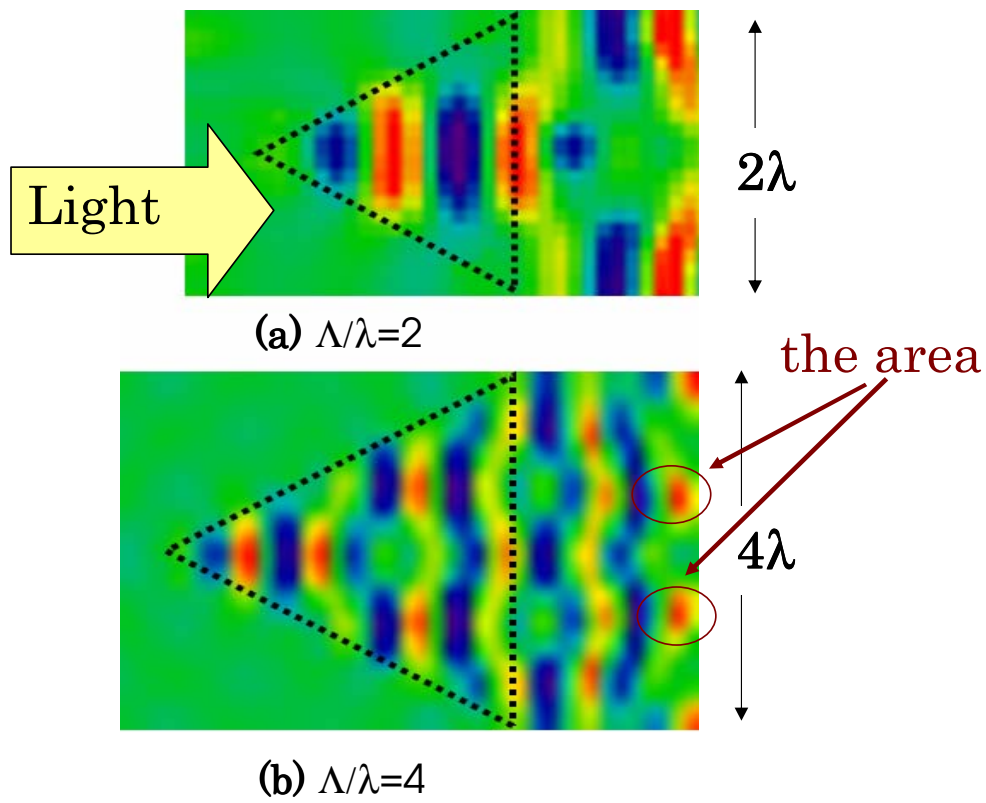
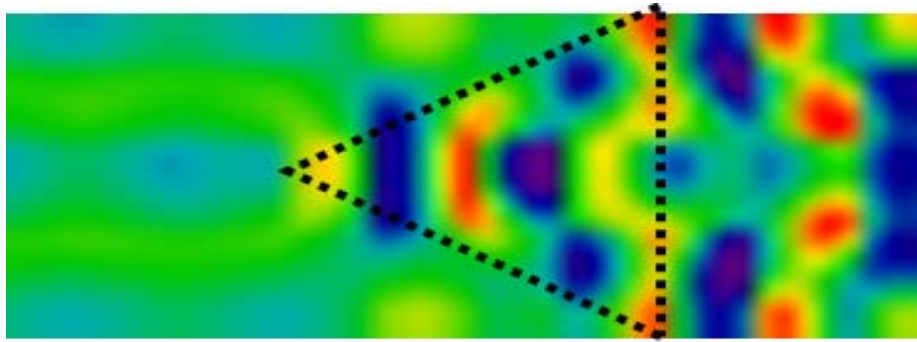
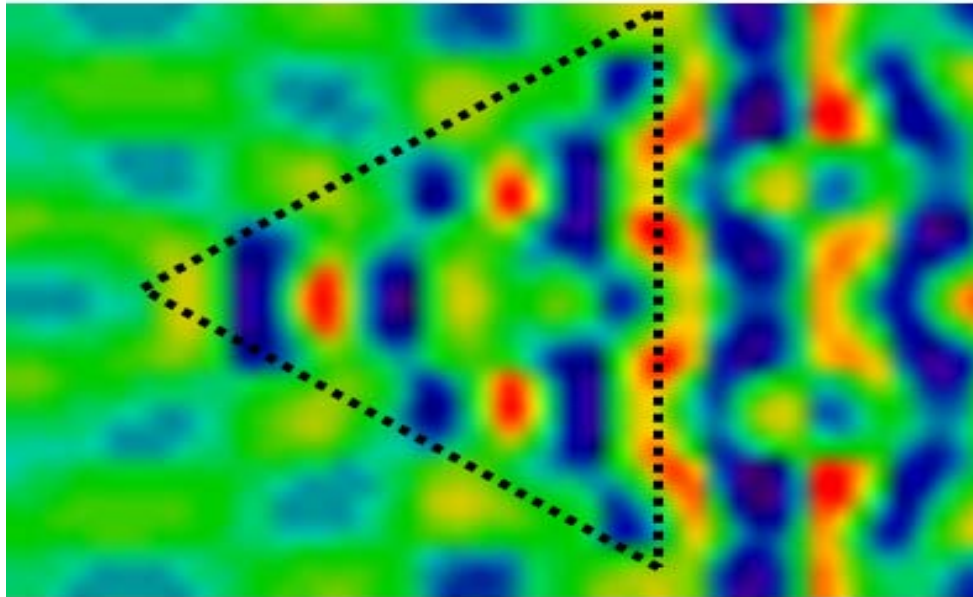


Fig. 21. Phase distribution of the scattered light in TM mode and case A. The electric field along Y axis is shown. The aspect ratio is 1. ds is set to infinity. (a) The period is 2λ . (b) The period is 4λ .



(a) $\Lambda/\lambda=2$



(b) $\Lambda/\lambda=4$

Fig. 22. Phase distribution of the scattered light in TE mode and case A. The aspect ratio is 1. ds is set to infinity. (a) The period is 2λ . (b) The period is 4λ .

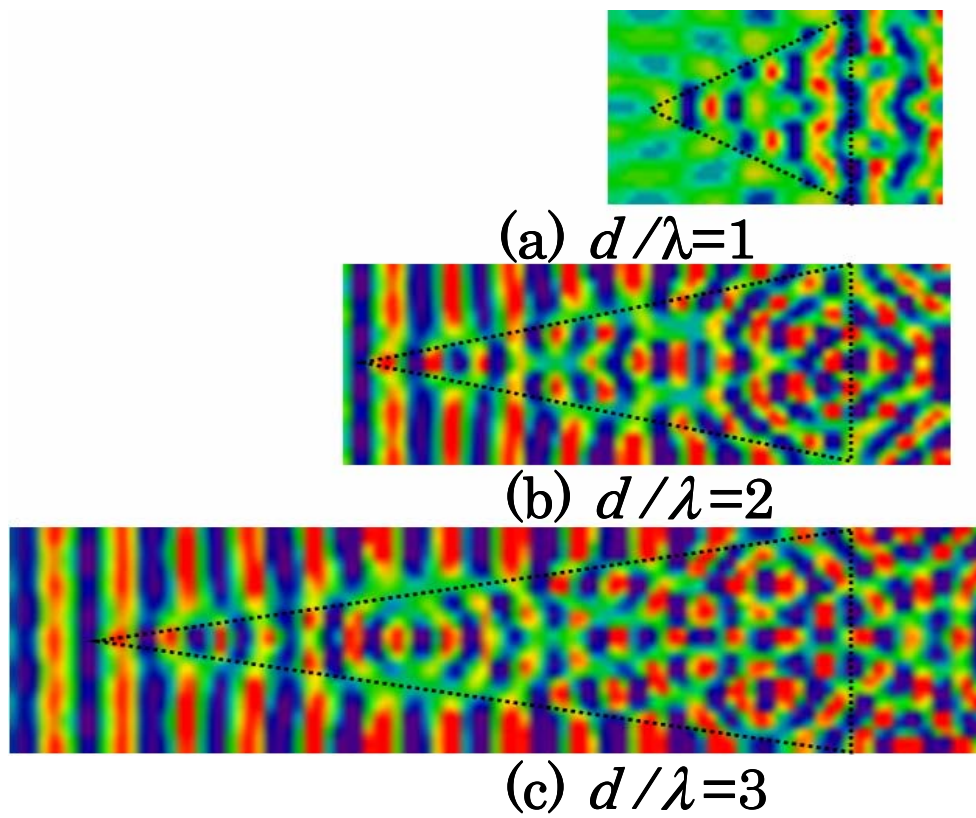
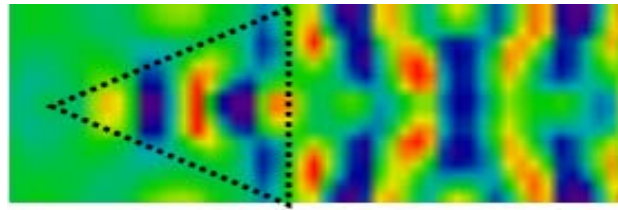
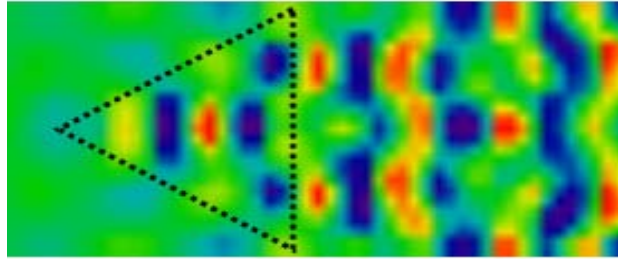


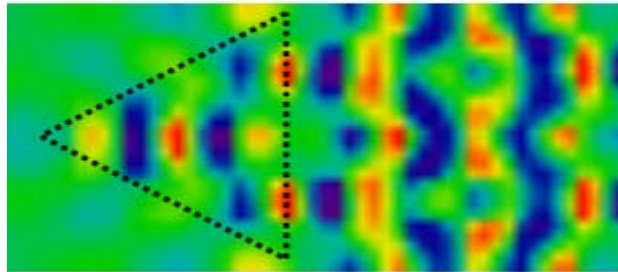
Fig. 23. Phase distribution of the scattered light in TE mode and case A. The period is 4λ and the aspect ratios of (a), (b), and (c) are 1, 2 and 3, respectively. d_s is set to infinity.



(a) $\Lambda/\lambda=2.1$

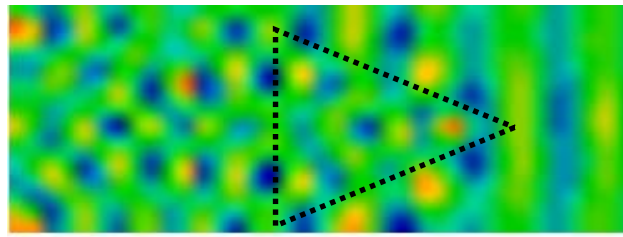


(b) $\Lambda/\lambda=2.84$

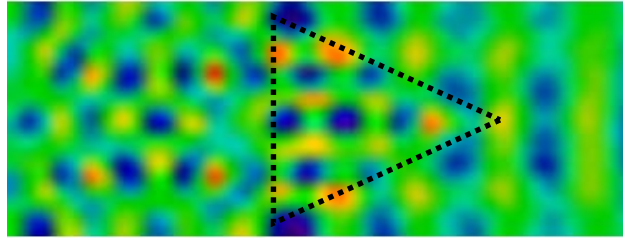


(c) $\Lambda/\lambda=3.03$

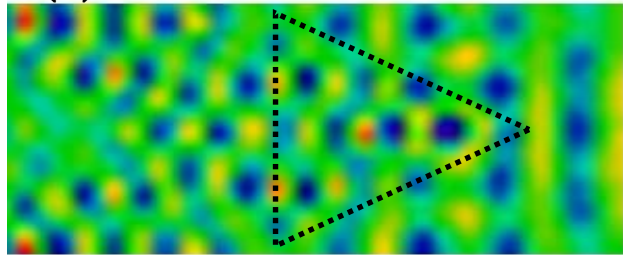
Fig. 24. Phase distribution of the scattered light in TE mode and case A. The wavelength is changed and the aspect ratio is 1. (a), (b), and (c) have periods 2.1, 2.84, and 3.03λ , respectively. The reflectivities of (a) and (c) are high and that of (b) is low.



(a) $\Lambda/\lambda=2.83$



(b) $\Lambda/\lambda=3.03$



(c) $\Lambda/\lambda=3.5$

Fig. 25. Phase distribution of the scattered light in TE mode and case B. The wavelength is changed and aspect ratio is 1. (a), (b), and (c) have periods 2.84λ , 3.03λ , and 3.5λ , respectively. Reflectivity of (a) and (c) is high and that of (b) is low.

4.7. 底辺のある回折格子の反射率と基材厚みの関係

次に底辺のある回折格子について考える。図 26 は、基材厚み ds を変えたときの全反射率の変化を示している。全反射率は大きく変動するが、周期性はないことが分かる。また、アスペクト比が 0.5 より 1 の方が、TE モードと TM モードの比率は大きくなる。図 27 は、回折格子の山一つと電場強度分布を示している。電場の強いところが白い領域である。回折格子の内側に白い領域がピラミッド状に並んでいるが、左図のように底辺の近傍では上下にこの領域がある。(a) は上側の白い領域が底辺にかかり、(c) は下側の白い領域が底辺にかかっている。(b) では底辺と白い領域の重なりが小さい。そして、反射率は (a), (b), (c) の順に大小大となっている。このことから、底辺と、白い領域の重なりが小さい方が反射率が少ないと考えられる。

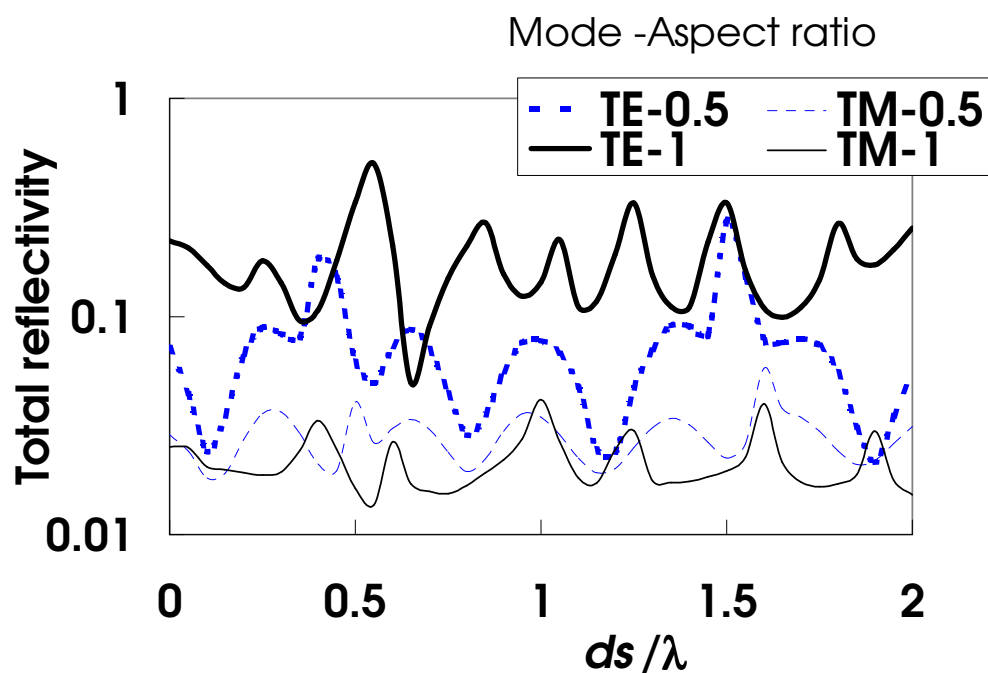


Fig. 26. Total reflectivity of the grating against substrate thickness ds . The polarizations are TE and TM and aspect ratios are 0.5 and 1.

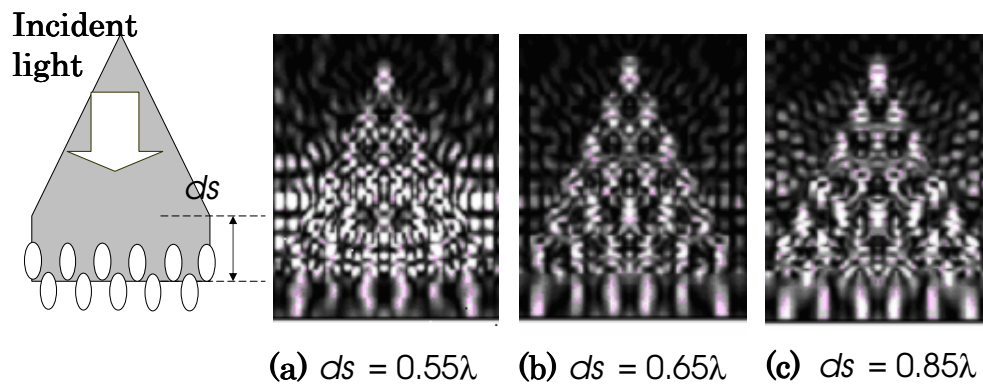


Fig. 27. Electric field intensity for the gratings with different substrate thickness. (a), (b), and (c) have ds 0.55, 0.65, and 0.85λ , respectively. Reflectivities of (a) and (c) are high and that of (b) is low.

4.8 . 三角と矩形の回折格子の比較

図 2 8 は三角形の回折格子 (図 2 8 (a)) と矩形の回折格子 (図 2 8 (b)) を示している。波長 λ の光が空気から表面レリーフに入射する。表面レリーフは周期 Λ 、深さ d 、屈折率 $n=1.5$ である。基材厚み ds は底辺に ABC(Absorbing Boundary Condition) 条件を課することで無限長とした (図 2 8 参照)。

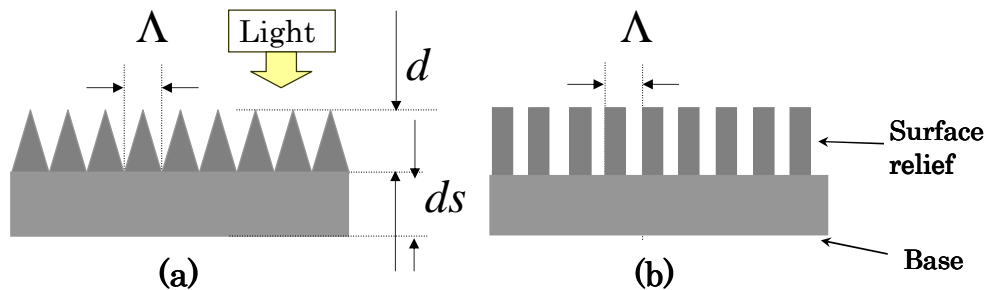


Fig. 28. Grating profiles, and definitions of Λ , d , and ds . Fill factor = 0.5, and aspect ratio = 1. (a) Triangular grating, (b) rectangular grating.

無限の長さの周期的な回折格子は、 i 次の回折次数の透過率が、次式で与えられる^{3),37)}。

$$T_{TE}(i) = E(i\lambda/\Lambda, d/\lambda), \quad (50)$$

$$T_{TM}(i) = M(i\lambda/\Lambda, \lambda/\Lambda, d/\lambda). \quad (51)$$

ここで、 E は独立なパラメーターが 2 つだけの関数であるのに対し、 M は、独立なパラメーターが 3 つある。筆者は三角形の回折格子の透過率における、支配的なパラメータは $i\lambda/\Lambda$ と考えている。格子溝の頂点と底辺で反射される電磁波の干渉が小さいからである。一方で、矩形の格子に関しては、格子溝の頂点と底辺で反射される電磁波の干渉が大きく、透過率は、 $i\lambda/\Lambda$ および d/λ の両方によって支配されると考えている。

計算の結果 (図 29 および 30 参照) はこの仮説を確証している。図で分かるように、矩形格子の電場は格子の底部でも上部でも大きい。一方、三角格子では電場が局在している。

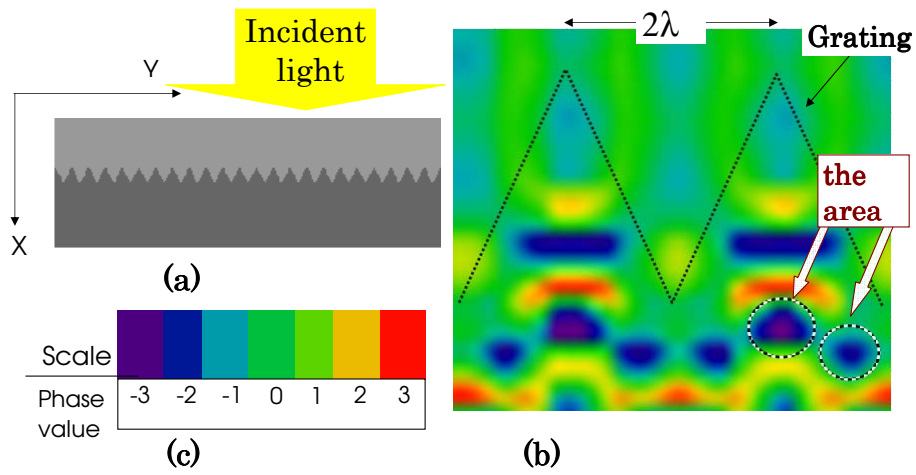


Fig. 29. (a) Coordinate system for the FDTD calculation (b) The phase distribution of scattered light in TE (E in x-y plane) mode for the triangular grating, period = 2λ . (c) Scale relative phase values.

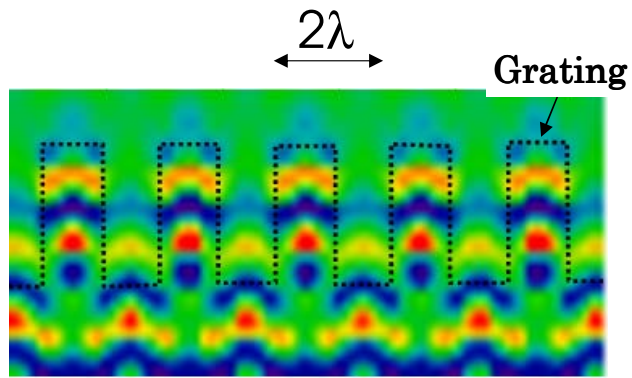


Fig. 30. Phase distribution of the scattered light in TE mode for the rectangular grating, period = 2λ .

もし $T_{TE}(i)$ が $i\lambda/\Lambda$ に関して周期的であれば、全反射率は Λ/λ に関して周期的になる。また、回折角度分布は変わらない³⁾。図 3 1 と 3 2 にあるように、RCWAを用いて三角形と矩形の回折格子の全反射率を計算した。筆者は格子周期に関して、三角格子の反射率は格子周期に対して周期的であり、矩形格子の反射率は格子深さに対して周期的であることを見つけた。このように、反射率の波長依存性は回折格子の形状に依存している。

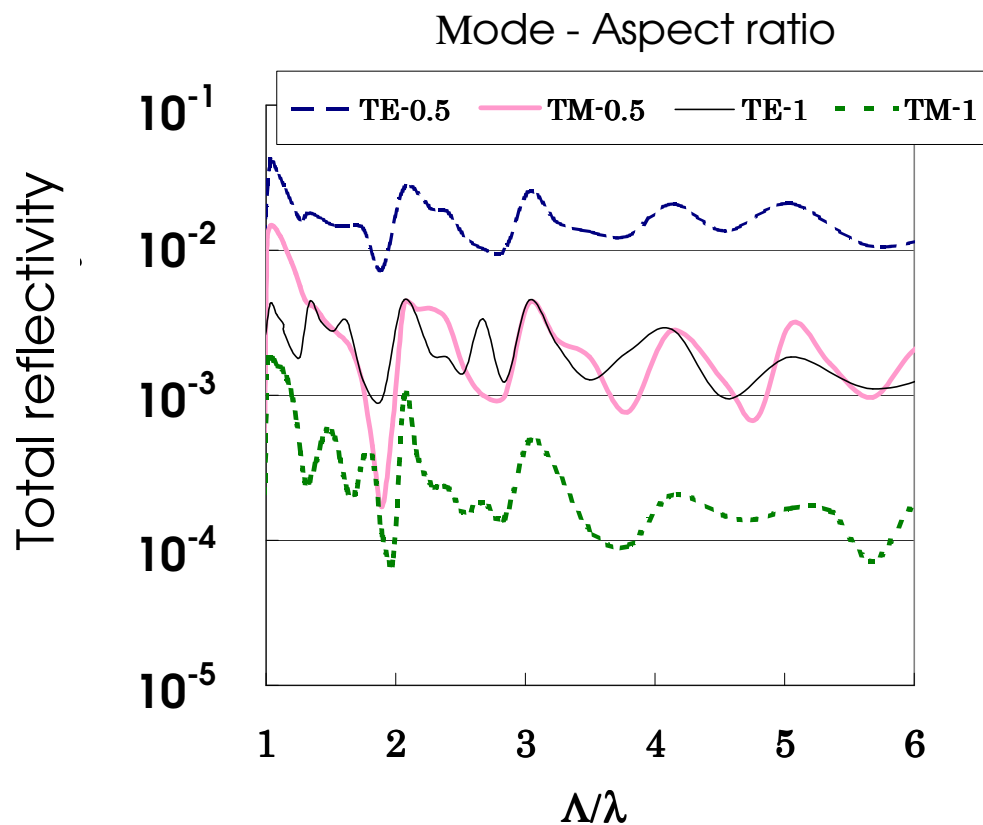


Fig. 31. Wavelength dependence of reflectivity of the triangular grating. The polarization modes are TE and TM. The aspect ratios are 0.5 and 1. ds is set to infinity.

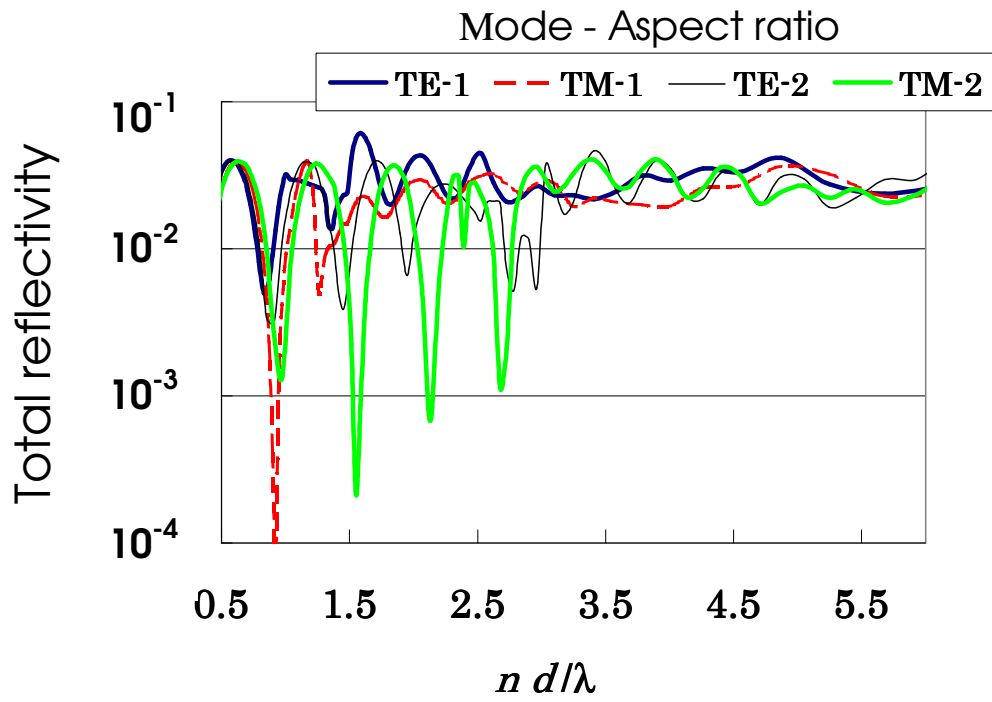


Fig. 32. Wavelength dependence of reflectivity of rectangular grating. The polarization modes are TE and TM. The aspect ratios are 1 and 2. d_s is set to infinity. n is set to 1.5.

次に、三角と矩形の回折格子の透過スペクトルを比較した(図33と34参照)。入射角(θ_i)の範囲が $0 \leq \theta_i \leq 10^\circ$ であるとき、矩形の回折格子の波長分散は大きい、三角形の回折格子の波長分散は小さい。この関係は式(50)で説明することができる。式(50)と(51)はやや異なるが、TMモードでも、波長依存性は、矩形の回折格子で大きく、三角の回折格子でも小さい。

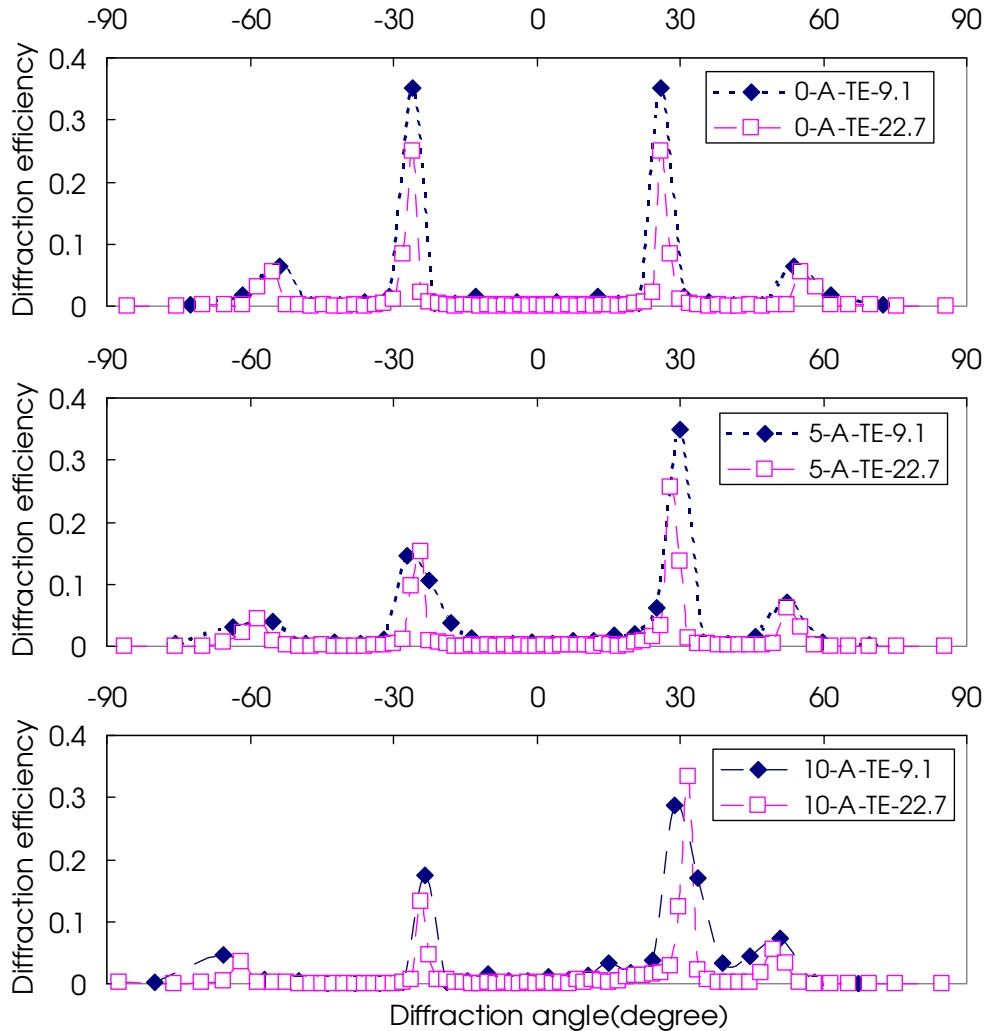


Fig. 33. Transmissivity spectra of the triangular grating as a function of wavelengths and incident angles. Graph legend: light incidence angle, “A” light incident from air, polarization, Λ/λ , respectively.

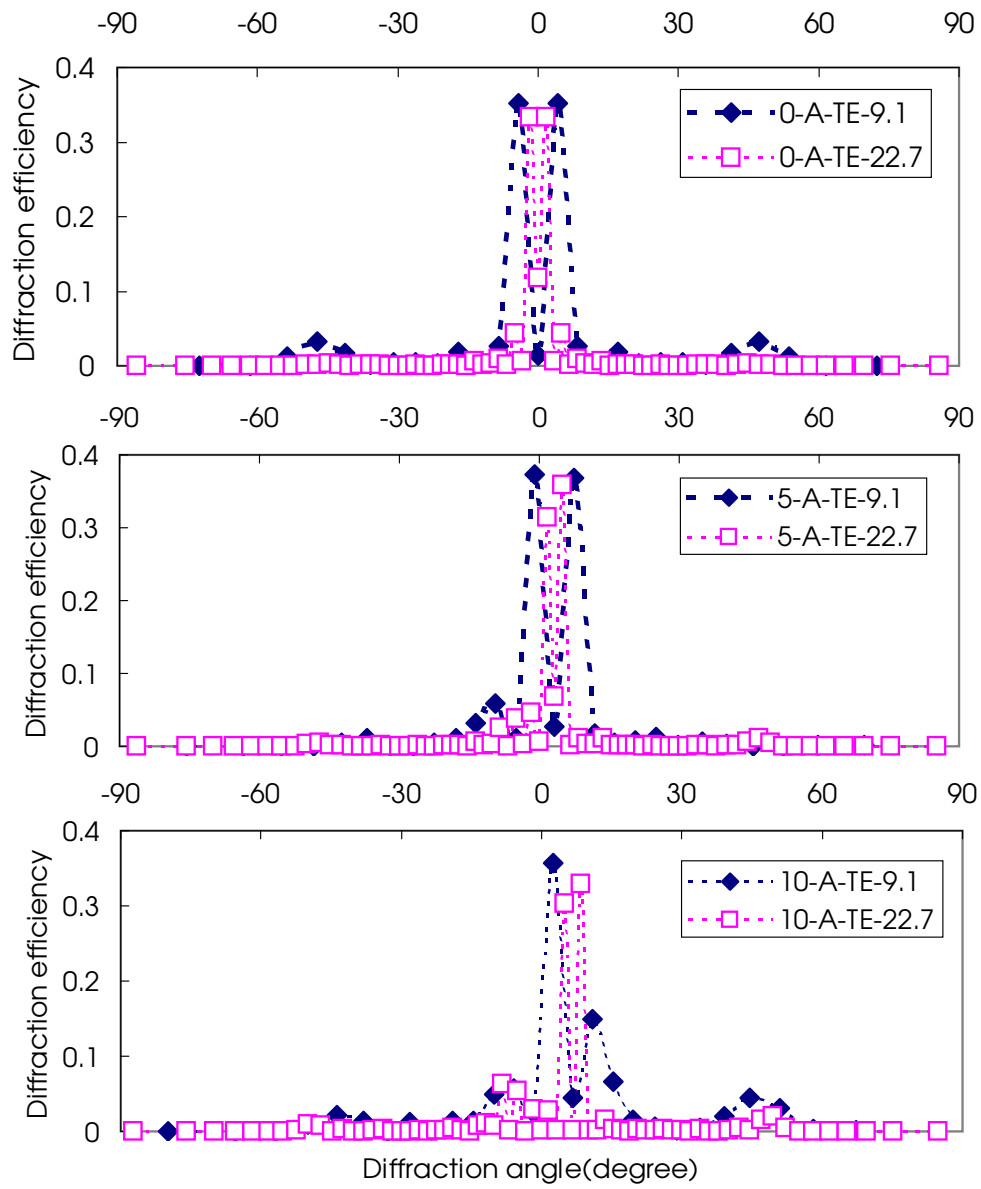


Fig. 34. Transmissivity spectra of the triangular grating as a function of wavelengths and incident angles. Graph legend: light incidence angle, “A” light incident from air, polarization, Λ/λ , respectively.

4.9 . 回折角度分布の *Fraunhofer* 近似

4.9.1 . 三角回折格子の回折角度分布

これまでの検討で、共鳴領域において三角の回折格子は、回折効果による偏光選択や、反射防止で有用であることが分かってきた。また、矩形の回折格子よりも波長依存性が小さいという特徴を持つ。

しかし、回折光学は実際の汎用的な光学系に適用するには、複雑すぎるので、光線光学が使えることが望ましい。たとえば、LEDの光取り出し効率は、光線光学で計算されている^{7),51)}。さらに、基材が厚くて、多重反射を考慮する場合には、3次元で厳密な解析をするのは難しくなる。

もし *Fraunhofer* 近似が使えるのであれば、計算は単純化されるだろう。光線追跡と *Fraunhofer* 近似を組み合わせれば、共鳴領域の回折格子を計算できるかもしれない。物理光学と回折光学の結果の違いを考察することで、この近似を実現できないだろうか。筆者は共鳴領域の三角格子について、光線光学の結果に基づいて回折光学の結果を近似する方法を検討した。

主に検討したのは透過率である。周期が変化すると、三角形の回折格子の反射率は大きく揺れ動く、しかし、透過率は、あまり変化しない。全光線透過率は、垂直入射の場合80%を超えるので、光学特性の支配的因子である。また、反射についても、反射率が10%を超える斜め入射の場合について検討した。

ここで、 Λ/λ が20を超えるときには、回折角度分布は物理光学で計算された結果に近くなると考え、 Λ/λ が10以下の場合と比較することで、検討を進めた。

なお、回折角度分布の計算はTEモードについて行ったが、TMモードについても同様の結果が得られている。計算した回折格子は図35に示した。

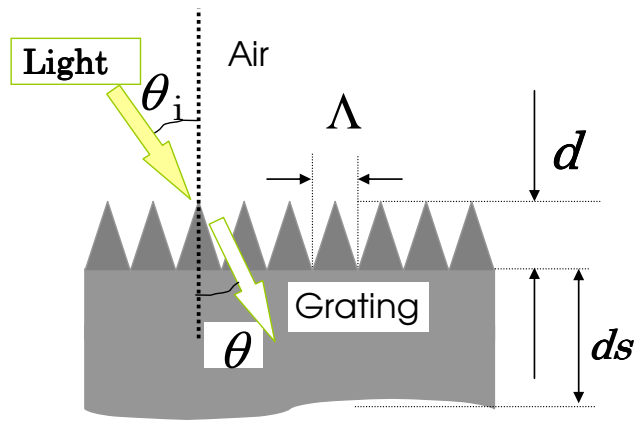


Fig. 35. The shape of the triangular grating profiles, and the definition of Λ , d , and ds . The fill factor is 0.5. The light of case A is shown. ds is assumed to be infinity. Refractive index n of the grating is 1.5.

Λ/λ , d/Λ および θ_i をパラメータとして、回折角度分布をしてみる。図 3 6 は様々な条件の透過率あるいは反射率を示している。図 3 7 と 3 8 は透過光の角度分布を示している。入射角は 0° 、偏光は TE、屈折率は 1.5 である。入射光の方向は case A または B である。そして、 Λ/λ を変えて、比較した。

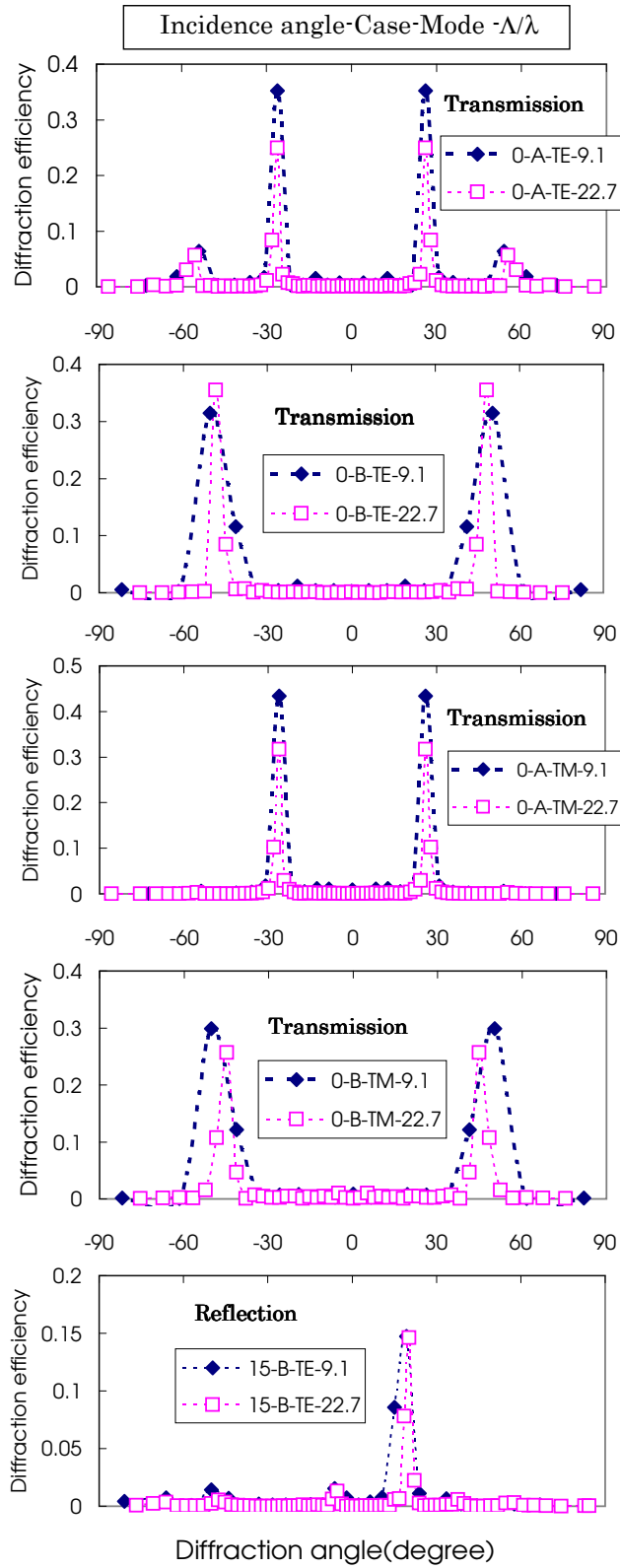


Fig. 36. Angular distribution of the diffraction efficiency for different polarization and case of light direction. Λ/λ is 9.1 or 22.7. The aspect ratio is 1. The diffraction efficiency is connected with the auxiliary line to make it intelligible.

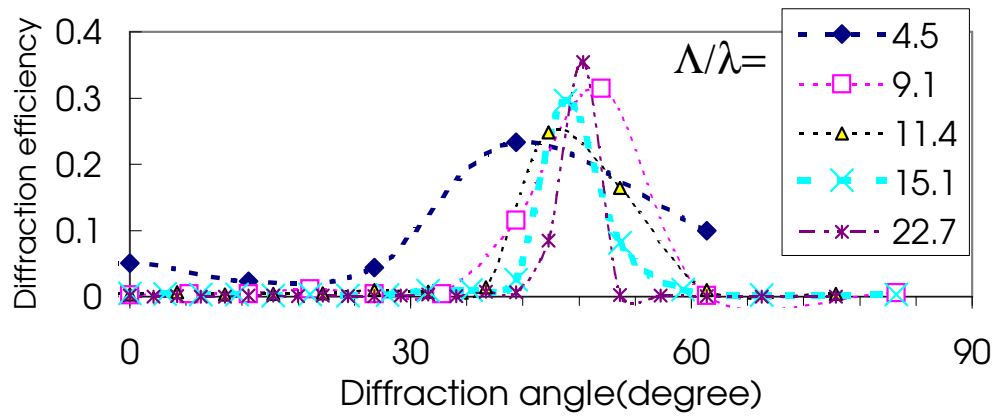


Fig. 37. Angular distribution of the transmissive diffraction efficiency of TE mode in case B for different Λ/λ . The aspect ratio is 1. The diffraction efficiency is connected with the auxiliary line to make it intelligible. Λ/λ is varied from 4.5 to 22.7.

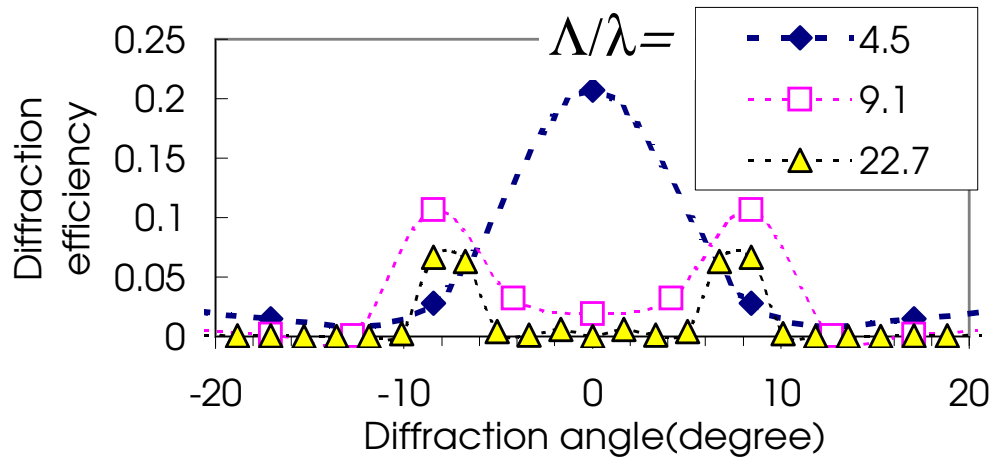


Fig. 38. Angular distribution of the transmissive diffraction efficiency of TE mode in case A for different Λ/λ . The aspect ratio is 2. The diffraction efficiency is connected with the auxiliary line to make it intelligible. Λ/λ is varied from 4.5 to 22.7.

以下の表では、式(4.6)をFraunhoferの単スリット回折パターンとして用いた。入射角が θ_i 、回折角が θ である。図3.7のカーブフィッティングの結果を表5にまとめた。 λ と Λ を図3.7に、 λ_2 と Λ_2 を式(4.6)に用いた。表6は図3.8に対応している。 $I_T(\theta)$ はそれぞれの包絡線と一致していた。式(4.6)の Λ_2 を5としたとき、見かけ上の周期($=(\Lambda/\lambda)\lambda_2$)は5以上となった。

Table 5. The results of curve fitting for Fig. 37 by Fraunhofer single-slit diffraction pattern for different Λ/λ in case B. Apparent period is calculated by $(\Lambda/\lambda)\lambda_2$.

Λ/λ	4.5	9.1	11.4	15.1	22.7
λ_2	1.65	0.7	0.6	0.43	0.3
$(\Lambda/\lambda)\lambda_2$	7.43	6.37	6.84	6.49	6.81
θ	43.3	48.3	47.2	47.2	47.6

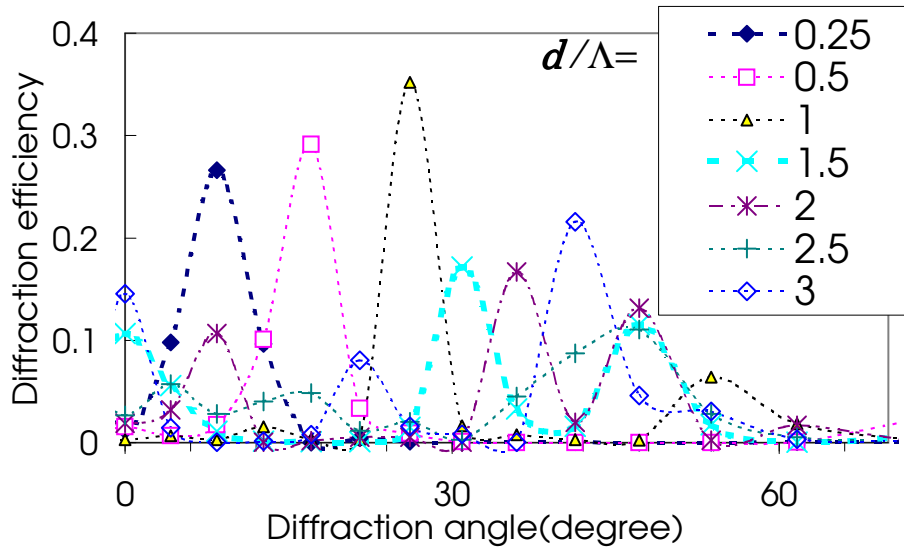
Table 6. The results of curve fitting for Fig. 38 by Fraunhofer single-slit diffraction pattern for different Λ/λ and d/Λ in case A. The parameters are same as Fig. 35 and Eq. (1). Apparent period is calculated by $(\Lambda/\lambda)n\lambda_2$.

Λ/λ	$d/\Lambda = 1$			$d/\Lambda = 2$		
	4.5	9.1	22.7	4.5	9.1	22.7
λ_2	0.9	0.45	0.2	1.05	0.54	0.22
$(\Lambda/\lambda)n\lambda_2$	6.08	6.14	6.81	7.09	7.37	7.49
θ	26.1	26.1	26.5	0	7.7	7.7

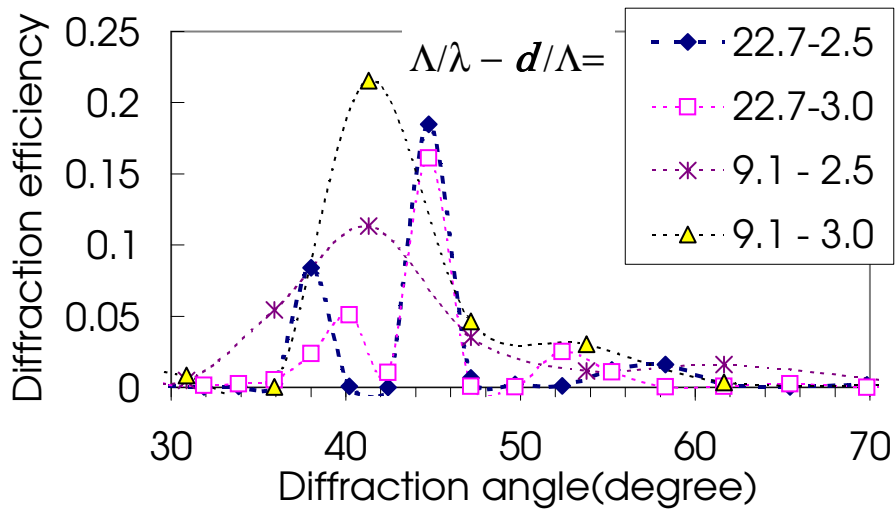
図39と表7では d/Λ を変えた。図39(b)では、 Λ/λ が9.1と22.7の場合について比較した。光線光学の結果との違いを見ることができる。 Λ/λ が大きくなると、光線光学の結果に近づくと考えられる。 d/Λ が大きくなると見かけ上のスリット幅 $(\Lambda/\lambda)\lambda_2$ が狭くなる傾向がある。

Λ/λ が4.5、9.1、22.7と変化するとき、これらの角度分布が類似しているかいは、次の因子で判断される。(1) Λ/λ の角度分布のピーク的位置ずれ。(2) Λ/λ のピーク面積。

図40と表8では入射角 θ_1 を変えた。0から30°までの角度分布と50から70°までの角度分布は、分布の様子から別のグループに分類される。



(a)



(b)

Fig. 39. Angular distribution of the transmissive diffraction efficiency of TE mode for different aspect ratio of d/Λ in case A. The diffraction efficiency is connected with the auxiliary line to make it intelligible. (a) d/Λ is varied from 0.25 to 3. (b) d/Λ has 2.5 and 3, and Λ/λ has 9.1 and 22.7.

Table 7. The results of curve fitting for Fig. 39 by Fraunhofer single-slit diffraction pattern for different aspect ratios in case A. Λ/λ is 9.1. Apparent period is calculated by $(\Lambda/\lambda)n\lambda_2$.

d/Λ	0.25	0.5	1	1.5	2	2.5	3
λ_2	0.7	0.62	0.46	0.49	0.46	0.5	0.28
$(\Lambda/\lambda)n\lambda_2$	9.56	8.46	6.28	6.69	6.28	6.83	3.82
θ	8.4	16.4	26	31.1	35.9	43.3	42.2

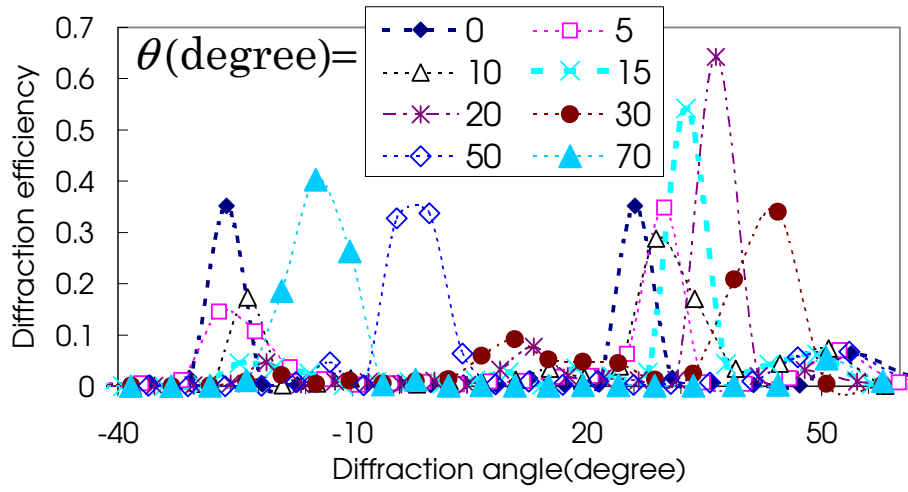


Fig. 40. Incidence angle θ is changed. The angular distribution of θ from 0° to 30° and that of θ from 50° to 70° may be attributed to different group by their angular distribution.

Table 8. The results of curve fitting for Fig. 40 by Fraunhofer single-slit diffraction pattern for different incidence angle in case A. Apparent period is calculated by $(\Lambda/\lambda)n\lambda_2$.

θ_i	0	5	10	15	20	30	50	70
λ_2	0.46	0.51	0.48	0.49	0.45	0.45	0.75	0.88
$(\Lambda/\lambda)n\lambda_2$	6.28	6.96	6.55	6.69	6.14	6.14	10.24	12.01
θ	26	29.9	32.7	31.1	36.5	41.8	-1.9	-14.8

図4-1と表9では Λ/λ を変えた。透過の角度分布が示されている。入射角を 20° 、入射方向をcase B、偏光をTE、 d/Λ を1とした。図4-1からピークが 90° 近傍では、角度分布や透過率が Λ/λ によって大きく異なることが分かる。しかし、包絡線はあまり変わらない。

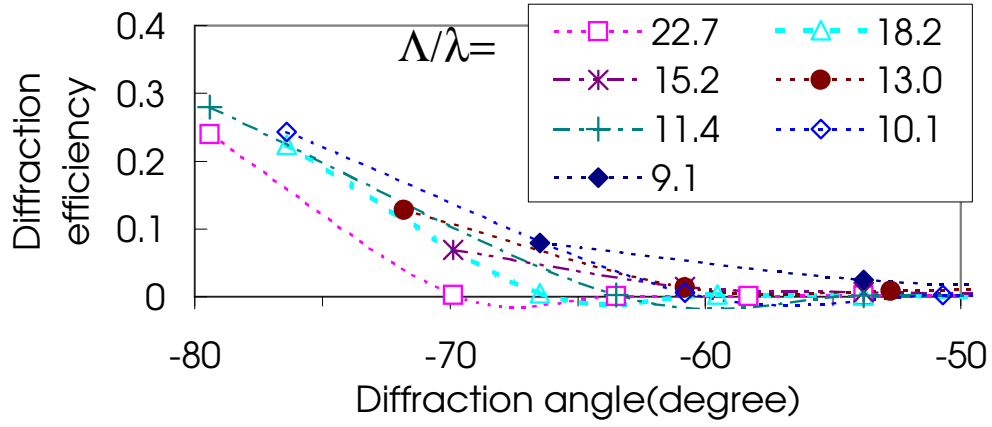


Fig. 41. The angular distribution of the transmitted light is shown. Incidence angle is 20° , the direction of incident light is case B, polarization is TE, d/Λ is 1, and Λ/λ was changed. The angle of the peak is near 90° . The angular distribution is a lot different by Λ/λ .

Table 9. Total transmissivity of Fig. 41 against Λ/λ .

Λ/λ	22.7	18.2	15.2	13.0	11.4	10.1	9.1
Transmissivity	0.57	0.46	0.30	0.39	0.62	0.62	0.33

^a“Transmissivity” is the sum of the transmission diffraction efficiency.

図42は反射の回折角度分布である。反射率は小さく、 Λ/λ によって分布が大きく異なる。アスペクト比1、入射角 0° である。図36に示したように Λ/λ が9.1と22.7の透過の角度分布を比較するとよく似ているが、反射では似ていない。そのときの反射率は1%程度である。同様の比較でアスペクト比が0.5のときは、反射率は4%程度であるが、やはり似ていない。ただし、その違いは小さくなる。全反射率あるいは全透過率が1%以下では回折効果により、光線光学の結果は正しい値から大きくずれる。

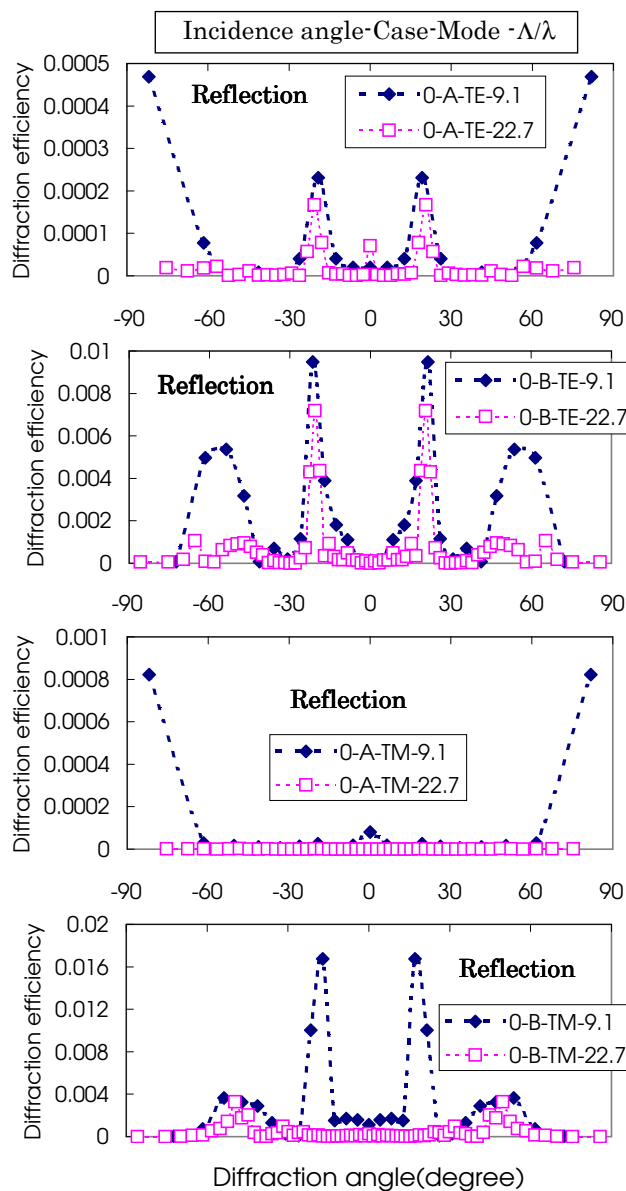


Fig. 42. The angular distribution of the reflected light is shown. Incidence angle is 0° , d/Λ is 1, and Λ/λ was changed. The angular distribution is a lot different by Λ/λ .

4.9.2 . 孤立格子の電場分布

一つの孤立した格子による回折パターンを知るために、図 4 3 のように電場を計算した。電場分布の計算結果を図 4 3 に示す。計算範囲の境界の左右が周期条件である。上下の境界は吸収条件である。回折格子は点線で示した。

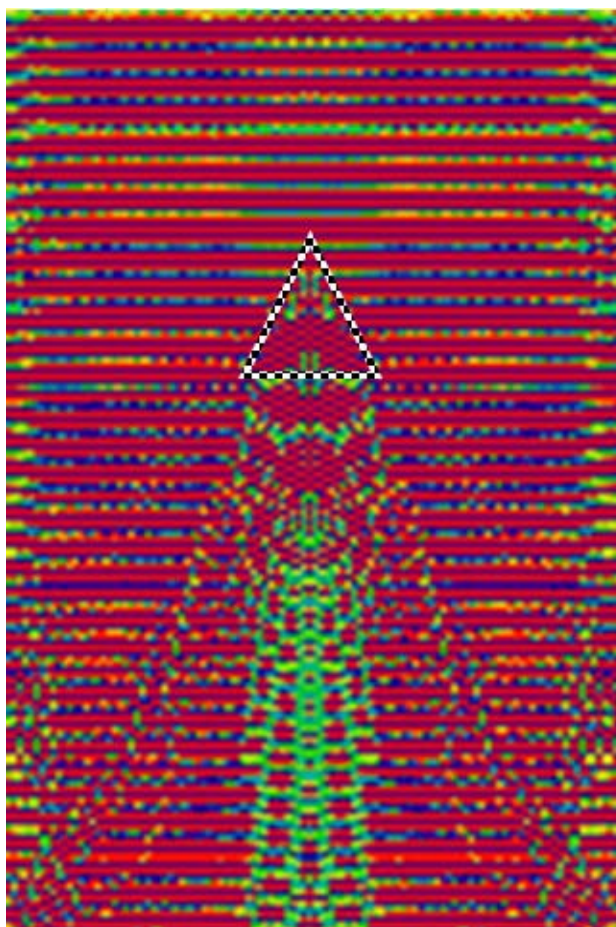


Fig. 43. Phase distribution of the scattered light in TE mode and case A. There is only one groove, unlike Fig. 34. The width of the groove is 9.1λ and the aspect ratio is 1.

第5章. 考察

5.1. 回折効率の式

回折効率は、回折次数 i 、波長 λ 、深さ d および周期 Λ を変数としたとき、2つの独立なパラメータで定まる。また、回折角度と入射角度に関しては次の関係式 (5 2)、(5 3) が成り立つ³⁾。 $T_{TE}(i)$ と $T_{TM}(i)$ はそれぞれTEモードとTMモードの i 次の反射率である。さらに、 R_{TE} と R_{TM} をそれぞれTEモードとTMモードの全反射率として、式 (5 4)、(5 5) が成立する。

$$T_{TE}(i) = E(i\lambda/\Lambda, d/\lambda), \quad (52)$$

$$T_{TM}(i) = M(i\lambda/\Lambda, \lambda/\Lambda, d/\lambda), \quad (53)$$

$$R_{TE} = 1 - \sum_i E(i\lambda/\Lambda, d/\lambda), \quad (54)$$

$$R_{TM} = 1 - \sum_i M(i\lambda/\Lambda, \lambda/\Lambda, d/\lambda). \quad (55)$$

これらの式は独立なパラメータに d と Λ の交差項がないことが特徴である。また、周期 Λ / 波長 λ と回折次数 i 、回折角 θ_3 の間には次の関係が成り立つことが知られている。

$$n_m \sin(\theta_3) - n_1 \sin(\theta_0) = i\lambda/\Lambda. \quad (56)$$

式 (5 2)、(5 3)、(5 6) から波長変化に対して、 d の影響が小さく、 $i\Lambda/\lambda$ が一定であれば、出射角度は一定であることがいえる³⁾。

5.2. 回折角度分布の波長依存性

表 1 から周期が $5 \mu\text{m}$ 以上では、可視白色光の回折光が分光せずに白く見えることが分かる。図 1 2 では、周期 $5 \mu\text{m}$ の回折格子について、波長分布が離散的であると同時に、各波長のピークの回折効率が大きく変化しないことが示された。この結果は計算の予測を支持している。

波長が変わったときに、最も回折効率の高い回折次数が変化することで、回折角度が変わらないことが図 1 6、1 7 の計算から分かる。その結果、分光せずに白色光として見えるのである。

また、図 1 2, 1 4 のように入射を拡散光にすることで、波長分布がブロードになる様子もスペクトルとして捉えることができた。

以上のように、周期が Λ/λ が 10 以上に長くなると角度分布の変動の周期が短くなり、白色光にみえると計算から予想できるが、実験からも、 $5 \mu\text{m}$ 以上の周期つまり、 Λ/λ が 10 程度で回折光が白色に見えることが分かった。さらに、実験および計算から周期が長くなると波長変化に伴う回折効率増減の間隔が短くなることが分かった。このように、回折角度や回折効率に関して計算と実験は一致することが分かった。

5.3. 横干渉による全反射率波長依存性と電場分布

Case A では Λ/λ が整数値近傍で反射率が上がる。その理由は格子溝の底辺の両端と電場が重なると反射率が高くなるからである。また、Case B では Λ/λ が整数値近傍で反射率が上がる。その理由は斜辺と電場が重なると反射率が高くなるからである。

このように全反射率の波長依存性は、電場分布と回折格子の斜辺や底辺の先端との位置関係で決まることが示唆された。

以上の考察から底辺がない場合の回折格子の全反射率の周期性には式 (5 2)、(5 3) の $i\Lambda/\lambda$ が重要であるといえる。したがって、入射光に対して垂直な横方向の干渉があると考えることができる。

5.4. 縦干渉による全反射率波長依存性と電場分布

反射率は基材厚み ds で大きく振動する。この理由は底辺と電場が重なると反射率が増大することによる。また、反射率は偏光依存性がある。例えば、図 2 6 から、TEモードとTMモードの反射率は ds によっては10倍以上異なることがわかる。

このことから底辺がある場合の回折格子の全反射率の変動には基材厚み ds が大きな影響を与えていることが分かる。式 (5 2)、(5 3) の d/λ が重要であるといえる。したがって、入射光に対して平行な縦方向の干渉があると考えることができる。

5.5. 三角と矩形の回折格子の比較

三角の格子の主要なパラメーターが $i\lambda/\Lambda$ であるので、その透過率スペクトルは、波長によって少ししか変わらない。筆者の結果は、透過率スペクトルがほとんど λ に依存しないので、波長分散を抑えるためには、三角の格子が矩形のものよりも優れていることを示している。またさらに、共鳴領域において、三角格子の Λ/λ は、光線光学が妥当になるのに十分なほど、大きくすることができる。その結果、光線光学を用いて、角度分布のピーク的位置を見積もることができる。

NS-FDTDとRCWAを利用して、三角形の回折格子と矩形の回折格子を $i\Lambda/\lambda$ と d/λ の関数として、シミュレーションし、透過スペクトルの形状依存性を明らかにした。そして、三角形の回折格子が矩形のものよりも、波長依存性が小さいことを明らかにした。

5.6. 反射率の決定因子

全反射率の波長依存性の計算や図 2 4、2 7のFDTDの解析結果から、反射率の大きい場所や反射率周期性をもたらす、入射光と格子溝との干渉の方向性について表 1 0のようによまとめることができる。Case Aで底辺のない場合は無反射に、底辺のある場合は偏光選択に使うことができる。

全反射率の波長変化に対する周期性を決定する干渉方向も、反射率の高い溝の部位も、底辺のあるなしに大きく左右される。

Table 10. The crucial factor affecting the reflectivity of the grating in the resonance domain. The light enters in the direction of the normal line.

Shape	Item	Case A	Case B
No base ^a	The direction of interference which causes the periodicity	Vertical ^b	Vertical ^b
	The place with high reflectivity	Both ends of groove	Oblique side
	Application	Antireflection	Antireflection
With base ^a	The direction of interference which causes the periodicity	Parallel ^b	---
	The place with high reflectivity	Base	Oblique side
	Application	Polarization selection	---

^a 'No base' is the grating with ds infinity and 'With base' is the the grating with ds finite.

^b 'Vertical' and 'Parallel' are the direction of the incident light to the base.

5.7. 波長依存性の小さい回折格子の設計方法

波長依存性を小さくするために最も容易で確実な解決手段は、格子溝の幅や深さを大きくすることである。これらを大きくすることで、二つの効果がもたらされる。一つは、波長が変化するとき全反射率や回折角の変動の周期が短くなるために、赤青緑の3つの色覚の感度がそれぞれ100 nm程度の波長域の広がりを持つ肉眼では白く見える効果である。二つ目は、波長が変化するとき全反射率や回折角の変動の大きさが、図16で分かるように干渉効果の低減で小さくなる効果である。

しかし、溝幅をあまり大きくしたくない場合もある。たとえば、共鳴領域特有の光学効果を利用する場合である。そのような場合には次の手段が考えられる。反射率の大小は、回折格子の斜辺や底辺と、電場の大きい領域との位置関係で決まる。また、この電場の大きい領域の大きさは、波長と格子形状で定まる。この電場領域の大きさと同じぐらいの幅で溝幅や深さを変動させた回折格子を設計することで、波長による全反射率や回折角の変動を抑えることができると考えられる。例えば、電場領域と斜辺がまったく重ならない溝、半分重なる溝、完全に重なる溝の3種を並べることで波長依存性を低減できる。

5.8. 回折角度分布の Fraunhofer 近似

Λ/λ が増加し、回折次数の数が増えるとき、全反射率は変動し、その変動は入射光と格子の先端または底辺との干渉によって生じる³⁸⁾。

図37の解析結果である表5では $(\Lambda^2/\lambda^2)(\Lambda/\lambda)$ はほとんど一定である。これは、三角格子の”スリット幅”が周期に比例することを意味している。図43は回折格子によって散乱された光の電場である。格子から二本の筋が出ていることが分かる。二つの筋は図36の二つのピークに対応しており、格子がスリットとして機能するという考えを支持している。

Λ/λ が9.1の場合と22.7の場合の主な違いは、次の3点である。

- (1) 電場と格子の先端との共鳴によってもたらされる新しい次数の回折の効果。
- (2) 単スリット効果による角度分布の幅広化。

(3) 周期が長くなることによる全反射率の低下。

上述の(1)と(3)は無視できる。

違い(2)は Λ/λ が9.1と22.7の間に次の違いをもたらす。

<1> 図38と39(b)にあるような二つのピークの結合。

<2> 図41のような回折角度が 90° を超えることによる反射率の減少。

違い<1>は 90° を超えた分の回折効率を省くことで埋め合わせることができる。違い<2>は二つのピークを一つのピークとしてシミュレーションすることで解決する。包絡線の広がり、ピークが一つの場合と変わらない。

このように、三角格子の回折角度分布は光線光学の計算結果に比べ次の4つの場合に大きく変動する。

(1) 周期が波長の数倍程度である。

(2) ピークの幅が光線光学の計算結果の二つのピークの間隔よりも大きい。

(3) 入射光がゼロ次光と垂直な方向に回折される。

(4) 回折角が 90° に近い。

しかしながら、三角格子の場合には光線光学とFraunhofer近似を用いて、これらの変動の影響を取り除いたシミュレーションができることが分かった。

5.9. 共鳴領域の回折格子の応用

本研究を液晶ディスプレイのフロントパネルの反射防止に用いると、従来反射防止膜で可能であった0.5%から0.1%以下に反射率を下げるができる。リビングでのディスプレイのコントラストは3000程度といわれているので、単純計算して15000に改善できることになる。

また、LEDの光取り出し効率は、反射防止をしない場合に比べ、2次元での試算では2倍以上上がる。つまり、エネルギー消費量が1/2で済むことになる。

さらに、将来的には、全反射率が波長によって周期的に変動することを利用して、新たな光機能素子への応用展開に際して、基礎的な原理となることも期待できる。

第6章. 結論

共鳴領域の鋸歯型回折格子についてRCWA法を用いて全反射率を計算した結果、アスペクト比が1で、反射率0.2%以下の無反射構造や偏光選択比が10程度の偏光選択構造が実現できることが分かった。しかし、この回折格子は、波長変化に対して、全反射率や回折角が変動した。

そこで、さらに、NS-FDTD法でこの反射率変動について電場解析を行った結果、電場の強い領域と格子表面や裏面との位置関係で波長による全反射率の周期的変化を説明できることが分かった。

この結果に基づいて、波長による回折角や透過率の変動が小さい鋸歯型回折格子を設計する指針を2つ得ることができた。一つは Λ/λ を10以上とする方法である。もう一つは電場領域と斜辺の重なりが変化するよう各格子溝の大きさ変化させる方法である。また、反射防止や偏光選択の素子を実際に作成し、計算結果を検証した。

文献

1. Y. Ono, Y. Kimura, and N. Nishida, "Antireflection effect in ultrahigh spatial-frequency holographic relief gratings," *Appl. Opt.* **26**(6), 1142–1146 (1987).
2. D. H. Raguin and G. M. Morris, "Antireflection structured surfaces for the infrared spectral region," *Appl. Opt.* **32**(7), 1154–1167 (1993).
3. T. Hoshino, M. Itoh, and T. Yatagai, "An antireflective grating in the resonance domain for displays," *Appl. Opt.* **46**(5), 648–656 (2007).
4. S. Hava and M. Auslender, "Design and analysis of low-reflection grating microstructures for a solar energy absorber," *Solar Energy Materials and Solar Cells* **61**, 143–151 (2000).
5. A. Parretta, A. Sarno, P. Tortora, H. Yakubu, P. M. J. Zhao, and A. Wang, "Angle-dependent reflectance measurements on photovoltaic materials and solar cells," *Opt. Commun.* **172**, 139–151 (1999).
6. C. Huh, K.-S. Lee, E.-J. Kang, and S.-J. Park, "Improved light-output and electrical performance of InGaN-based light-emitting diode by microroughening of the p-GaN surface," *J. Appl. Phys.* **93**(11), 9383–9385 (2003).
7. T.-X. Lee, C.-Y. Lin, S.-H. Ma, and C.-C. Sun, "Analysis of position-dependent light extraction of GaN-based LEDs," *Opt. Express* **13**(11), 4175–4179 (2005).
8. Y. T. Lua and S. Chia, "Fabrication of light-shaping diffusion screens," *Opt. Commun.* **214**, 55–63 (2002).
9. T. Hoshino and Y. Sugimoto, "(WO/2004/099833) HOLOGRAM OPTICAL ELEMENT AND SURFACE LIGHT SOURCE DEVICE USING IT," WO Patent (2004).
10. T. Nakai and H. Ogawa, "Development of 3-layer diffractive optical elements employed for wide incident angles," in *2004 International Conference Optics and Photonics in technology Frontier Tokyo*, pp. 547–548 (Tokyo, 2004).
11. L. Escoubas, J. Simon, M. Loli, G. Berginc, F. Flory, and H. Giovannini, "An antireflective silicon grating working in the resonance domain for the near infrared spectral region," *Opt. Commun.* **226**, 81–88 (2003).
12. Y. Kanamori, M. Sasaki, and K. Hane, "Broadband antireflection gratings fabricated upon silicon substrates," *Opt. Lett.* **24**(20), 1422–1424 (1999).
13. Y. Kanamori, H. Kikuta, and K. Hane, "Broadband Antireflection gratings for Glass Substrates Fabricated Fast Atom Beam Etching," *Jpn. J. Appl. Phys.* **39**(7B), L735–L737 (2000).
14. H. Kasugai, Y. Miyake, A. Honshio, S. Mishima, T. Kawashima, K. Iida, M. Iwaya, S. Kamiyama, H. Amano, I. Akasaki, H. Kinoshita, and H. Shiomi, "High-Efficiency Nitride-Based Light-Emitting Diodes with Moth-Eye Structure," *Jpn. J. Appl. Phys.* **44**, 7414–7417 (2005).
15. N. Stutzmann, H. Jagt, T. A. Tervoort, C. W. M. Bastiaansen, and P. Smith, "Novel polarized-light emitting polymer systems: II. use of form birefringent polarization-selective mirrors," *Jpn. J. Appl. Phys.* **40**(10), 5972–5975 (2001).
16. S. Omori, "Polarization and color separator using binary phase grating with subwavelength period," *Opt. Rev.* **8**(4), 254–259 (2001).
17. D. Delbeke, R. Baets, and P. Muys, "Polarization-selective beam splitter based on a

- highly efficient simple binary diffraction grating,” *Appl. Opt.* **43**(33), 6157–6165 (2004).
18. D. Yi, Y. Yan, H. Liu, S. Lu, and G. Jin, “Broadband polarizing beam splitter based on the form birefringence of a subwavelength grating in the quasi-static domain,” *Opt. Lett.* **29**(7), 754–756 (2004).
 19. X. Deng, J. J. Wang, and F. Liu, “Wideband antireflective polarizers based on integrated diffractive multilayer microstructures,” *Opt. Lett.* **31**(3), 344–346 (2006).
 20. K.-W. Chien and H.-P. D. Shieh, “Design and fabrication of an integrated polarized light guide for liquid-crystal-display illumination,” *Appl. Opt.* **43**(9), 1830–1834 (2004).
 21. X. Yang, Y. Yan, and G. Jin, “Polarized light-guide plate for liquid crystal display,” *Opt. Express* **13**(21), 8349–8356 (2005).
 22. T. Nakamura, N. Tsutsumi, N. Juni, and H. Fujii, “Thin-film waveguiding mode light extraction in organic electroluminescent,” *J. Appl. Phys.* **054505**, 1–5 (2005).
 23. A. Kitamura, S. Naka, H. Okada, and H. Onnagawa, “Improved Light Outcoupling in Organic Electroluminescent Devices with Random Dots,” *Jpn. J. Appl. Phys.* **45**(1B), 613–616 (2005).
 24. Y.-C. Kim, S.-H. Cho, and Y.-W. Song, “Planarized SiNx/spin-on-glass photonic crystal organic light-emitting diodes,” *Appl. Phys. Lett.* **89**(173502), 1–3 (2006).
 25. B. C. Krummacher, M. K. Mathai, V. Choong, S. A. Choulis, , F. So, and A. Winnacker, “General method to evaluate substrate surface modification techniques for light extraction enhancement of organic light emitting diodes,” *J. Appl. Phys.* **100**(054702), 1–6 (2006).
 26. Y. Do, Y. Kim, Y.-W. Song, C.-O. Cho, H. Jeon, Y.-J. Lee, S.-H. Kim, and Y.-H. Lee, “Enhanced Light Extraction from Organic Light-Emitting Diodes with 2D SiO₂/SiNx Photonic Crystals,” *Advanced Materials* **15**(14), 1214–1218 (2003).
 27. Y. R. Do, Y.-C. Kim, Y.-W. Song, and Y.-H. Lee, “Enhanced light extraction efficiency from organic light emitting diodes by insertion of a two-dimensional photonic crystal structure,” *J. Appl. Phys.* **96**(12), 7629–7636 (2004).
 28. M. Fujita, K. Ishihara, T. Ueno, T. Asano, S. Noda, H. Ohata, T. Tsuji, H. Nakada, and N. Shimoji, “Optical and Electrical Characteristics of Organic Light-Emitting Diodes with Two-Dimensional Photonic Crystals in Organic/Electrode Layers,” *Jpn. J. Appl. Phys.* **44**(6A), 3669–3677 (2005).
 29. S. Fan, P. R. Villeneuve, J. Joannopoulos, and E. Shubert, “High Extraction Efficiency of Spontaneous Emission from Slabs of Photonic Crystals,” *Phys. Rev. Lett.* **78**(17), 3294–3297 (1997).
 30. H. Ichikawa and T. Baba, “Efficiency enhancement in a light-emitting diode with a two-dimensional surface grating photonic crystal,” *Appl. Phys. Lett.* **84**(4), 457–459 (2003).
 31. Y.-G. Ju, G. Almuneau, T.-H. Kim, and B.-W. Lee, “Numerical Analysis of High-Index Nano-Composite Encapsulant for Light-Emitting Diodes,” *Jpn. J. Appl. Phys.* **45**(4A), 2546–2549 (2006).
 32. A. Adawi, R. Kullock, J. Turner, C. Vasilev, D. Lidzey, A. Tahraoui, P. Fry, D. Gibson, E. Smith, C. Foden, M. Roberts, F. Qureshi, and N. Athanassopoulou, “Improving the light extraction efficiency of polymeric light emitting diodes using two-dimensional

- photonic crystals,” *Organic Electronics* **7**, 222–228 (2006).
33. H. K. Cho, J. Jang, J.-H. Choi, J. Choi, J. Kim, J. S. Lee, B. Lee, Y. H. Choe, K.-D. Lee, S. H. Kim, K. Lee, S.-K. Kim, and Y.-H. Lee, “Light extraction enhancement from nanoimprinted photonic crystal GaN-based blue lightemitting diodes,” *Opt. Express* **14**(19), 8654–8660 (2006).
 34. J. Shakya, K. H. Kim, J. Y. Lin, and H. X. Jiang, “Enhanced light extraction in III-nitride ultraviolet photonic crystal light-emitting diodes,” *Appl. Phys. Lett.* **85**(1), 142–144 (2004).
 35. H.-Y. Ryu, J.-K. Hwang, D.-S. Song, I.-Y. Han, , Y.-H. Lee, and D.-H. Jang, “Effect of nonradiative recombination on light emitting of two-dimensional photonic crystal slab structures,” *Appl. Phys. Lett.* **78**(9), 1174–1176 (2001).
 36. P. Roca-Cusachs, F. Rico, E. Martinez, J. Toset, R. Farre, and D. Navajas, “Stability of Microfabricated High Aspect Ratio Structures in Poly(dimethylsiloxane),” *Langmuir* **21**, 5542–5548 (2005).
 37. T. Hoshino, S. Banerjee, M. Itoh, and T. Yatagai, “Design of a wavelength independent grating in the resonance domain,” in *13th Microoptics Conference(MOC '07)*, H15, pp. 164–165 (The Japan Society of Applied Physics, Takamatsu, 2007).
 38. T. Hoshino, S. Banerjee, M. Itoh, and T. Yatagai, “Design of a wavelength independent grating in the resonance domain,” *Appl. Opt.* **46**(32), 7948–7962 (2007).
 39. F. Yamada, H. Numata, and Y. Taira, “Multi-layered flat-surface micro-optical components directly moled on an LCD panel,” *Journal of the SID* **11**(3), 525–531 (2003).
 40. M. G. Moharam and T. K. Gaylord, “Diffraction analysis of dielectric surface-relief gratings,” *J. Opt. Soc. Am. A* **72**, 1385–1392 (1982).
 41. M. G. Moharam and T. K. Gaylord, “Rigorous coupled-wave analysis of grating diffraction E-mode polarization and losses,” *J. Opt. Soc. Am. A* **73**(4), 451–455 (1983).
 42. J. B. Cole, S. Banerjee, and M. Haftel, “High accuracy nonstandard finite-difference time-domain algorithms for computational electromagnetics: applications to optics and photonics,” in *Advances in the applications of nonstandard finite difference schemes*, R. E. Mickens, ed., pp. 89–189 (World Scientific, 2006).
 43. J. B. Cole and S. Banerjee, “Applications of Nonstandard Finite Differnce Models to Computaional Electromagnetics,” *J. Diff. Eqns.* **9**(12), 1099–1112 (2003).
 44. S. Banerjee, J. B. Cole, and T. Yatagai, “Calculation of Dffraction Characteristics of Subwavelength Conducting Gratings Using a High Accuracy Nonstandard Finite-Differnce Time-Domain Method,” *Opt. Rev.* **12**(4), 274–280 (2005).
 45. J. B. Cole, “High-Accuracy Yee Algorithm Based on Nonstandard Finite Differnces: New Developments and Verfications,” *IEEE Trans. Antennas Propag.* **50**(9), 1185–1191 (2002).
 46. S. Banerjee, T. Yatagai, and J. B. Cole, “Boosting light transmission through interfaces using subwavelength Moth-eye structuring: nonstandard FDTD simulations,” in *11th Microoptics Conference(MOC'05)*, H48, pp. 212–213 (The Japan Society of Applied Physics, Tokyo, 2005).
 47. S. Banerjee, “Nonstandard Finite-Difference Time-Domain Algorithm: Application to the Design of Subwavelength Diffractive Optical Elements,” Ph.D. thesis, Univ. of

- Tsukuba (2006).
48. J. B. Cole and S. Banerjee, “Improved Version of the Second-Order Mur Absorbing Boundary Condition Based on a Nonstandard Finite Difference Model,” in *The 23rd Annual Review of Progress in Applied Computational Electromagnetics*, pp. 1531–1535 (Applied Computational Electromagnetics, Verona, Italy, 2007).
 49. M. G. Moharam and T. K. Gaylord, “Rigorous coupled-wave analysis of metallic surface-relief gratings,” *J. Opt. Soc. Am. A* **3**, 1780–1787 (1986).
 50. M. Born and E. Wolf, *Principles of Optics, : Electromagnetic Theory of Propagation, Interference and Diffraction of Light*, 7th ed. (Cambridge University Press, Cambridge, 1999).
 51. T.-X. Lee, K.-F. Gao, W.-T. Chien, and C.-C. Sun, “Light extraction analysis of GaN-based light-emitting diodes with surface texture and/or patterned substrate,” *Opt. Express* **15**(11), 6670–6676 (2007).

謝辞

本研究は筑波大学数理物質科学研究科応用光学研究室において、谷田貝豊彦教授および伊藤雅英教授の下で行ったものであり、同研究室およびCole準教授、他の方々の助力のもとで完成した。

谷田貝豊彦教授および伊藤雅英教授には、本研究に関して常にご指導、ご助言をいただき、深く感謝いたします。

本論文に用いたNS-FDTD法に関して基礎から実際のシミュレーションまで指導していただいたJames B. Cole準教授およびSaswatee Banerjee博士に深く感謝いたします。

SEM写真の測定をしていただいた末益 崇準教授に感謝いたします。最初の2年間、研究室を共にし、さまざまな質問に親切に答えていただいた茨田大輔博士に感謝いたします。

同じ社会人であり、また、共焦点顕微鏡による回折格子のフィルム厚を測定していただいた菅原滋氏に感謝いたします。

FDTD法の考え方やそのプログラムで、しばしば力を貸していただきまた、議論していただいた杉坂 純一郎氏に感謝いたします。

研究室の運営を円滑にするために大きな役割を果たされた三浦 賢一氏に感謝いたします。

発表リスト

(国際会議)

1. S. Banerjee, T. Hoshino, and J. B. Cole, “Subwavelength Metallic Grating Simulation using FDTD,” in *The 23rd Annual Review of Progress in Applied Computational Electromagnetics* (Applied Computational Electromagnetics, Verona, Italy, 2007).
2. T. Hoshino, S. Banerjee, M. Itoh, and T. Yatagai, “Design of a wavelength independent grating in the resonance domain,” in *The 13th Microoptics Conference(MOC’07)*, H15,164-165(The Japan Society of Applied Physics, Takamatsu, 2007).

(国内会議)

1. 星野、伊藤、谷田貝 :” 回折格子の共鳴領域を使ったディスプレイ用無反射構造 ”、第 53 回応用物理学関係連合講演会、22a-E-2 (2006).
2. 星野、バネリー、伊藤、谷田貝 :” 共鳴領域を利用した波長無依存の回折格子の設計 ”、第 54 回応用物理学関係連合講演会、27a-zx-4 (2007).

(国内特許)

1. 伊藤、谷田貝、星野 :” 反射防止構造および該反射防止構造を有する発光素子 ”、特開 2007-264613.

(論文)

1. T. Hoshino, M. Itoh and T. Yatagai, ”Antireflective grating in the resonance domain for displays”, *Appl. Opt.* , **46**(5), 648-656(2007).
2. T. Hoshino, S. Banerjee, M. Itoh, and T. Yatagai, ”Design of a wavelength independent grating in the resonance domain,” *Appl. Opt.* , **46**(32), 7948-7962(2007).