蒸着物質データベースに基づく反射防止多層膜の最適設計*

中 村 正 行** 後 藤 孝 章***

Optimum Design of Multilayer-Antireflection Films Based on Database of Material Properties

Masayuki NAKAMURA and Takaaki GOTO

This paper presents a method of optimum design of multilayer-antireflection films based on database of material properties. In the design process of the optical multilayer films, the designer must determine appropriate refractive index and thickness of each thin film in accordance with design specifications on reflectance distribution. There lies the difficulty of the design where it is not clear such as the formulation of the multilayer structure to minimize the reflectance at the prescribed wavelength range. Furthermore, even if the refractive index is determined it does not always follow that the material which has the specified refractive index is available. To overcome these difficulties, the genetic algorithm and the database are used for the optimization process. The way to apply the genetic algorithm to design the structure of the multilayer films and its optimization are described in detail. Some results of typical problems are shown to demonstrate and discuss the effectiveness of the proposed method.

Key words : optimum design, antireflection film, multilayer films, database, genetic algorithm

1. は じ め に

本研究では蒸着物質に関するデータベースに基づき、光学多層膜による反射防止膜の最適設計を行う手法を提案する。反射防止多層膜の設計では、対象とする光の波長域に対応して多層構造における各層ごとの薄膜の屈折率および厚さを適切に決定する必要がある。反射防止膜設計の困難点は、決められた波長域での反射率を最低にするような多層構造を明示的に定式化できない点にある。さらに、反射率を最低にするような屈折率が決定されたとしても、必ずしもその屈折率を持つ蒸着物質が存在するとは限らない。従来方法の一つとして、3層の構成を一単位として必要な屈折率を確保し、それを重ねることにより反射防止性能を得る方法がある¹⁾。この方法では層数の増加に伴う透過率の減少や制作コスト増大の恐れがある。

本研究では、遺伝的アルゴリズム²⁾³⁾(Genetic Algorithm : GA)を適用し、データベースから蒸着物質を選択して多層膜を構成することで、これらの困難点の解決をはかる。特定の波長域に対して反射率の設計目標値を達成するような多層膜の層数と各層の屈折率および膜厚を決定するいくつかの最適設計例を示し、手法の有効性について考察を行う。ここでは光学薄膜による反射防止膜の設計手法を提案するが、本手法は材料データベースを基準に、材料特性値の最適化を行う手法として応用分野が広いものと考えられる。

2. 反射防止多層膜の設計

2.1 反射防止膜

写真レンズなど光応用機器に用いられる光学部品は、蒸着を利用した多層の薄膜で構成される反射防止が施されている。反射防止膜の役割は光学部品面の反射率を最小にし、透過率を増加させることである。また、レンズへの入射光の一部が反射や乱射の影響により結像に不要な光となってフィルム面に到達し、本来の像のコントラストの低下や写真の色彩に濁りを生じさせるフレアや、フィルム面上の正規の位置以外に望ましくない像が生じてしまうゴーストの防止も重要な役目である。特に写真レンズにおいてはカラーバランス、レンズ表面の保護も目的としている^{4)~7)}。

2.2 多層膜の特性行列

図1に示すような屈折率 N_s の透明基板に、屈折率 $N_1, N_2, \dots, N_j, \dots, N_n$ 、幾何学的膜厚 $d_1, d_2, \dots, d_j, \dots, d_n$ の透明膜を蒸着する。 N_e は入射媒質の屈折率を表す。多層膜の各層が均質膜であると仮定したとき、電界ベクトルの振幅を E 、磁界ベクトルの振幅を H で表す。第 j 層への入射ベクトルの振幅を E_j, H_j とすると第 $j+1$ 層への入射ベクトルの振幅 E_{j+1}, H_{j+1} との関係は次式で与えられる¹⁾⁴⁾。

$$\begin{pmatrix} E_j \\ H_j \end{pmatrix} = [M_j] \begin{pmatrix} E_{j+1} \\ H_{j+1} \end{pmatrix} \quad (1)$$

ただし、 $[M_j]$ は j 層に関する2行2列の特性行列であり、次式のように表される。

* 原稿受付 平成9年4月21日

** 正 会 員 信州大学工学部 (長野市若里500)

*** 学生会員 信州大学大学院

Fig.1 Structure of multilayer films

$$[M_j] = \begin{bmatrix} \cos \beta_j & -\frac{i}{u} \sin \beta_j \\ -iu \sin \beta_j & \cos \beta_j \end{bmatrix} \quad (2)$$

$$\beta_j = \frac{2\pi}{\lambda} N_j d_j \cos \varphi_j \quad (3)$$

$$u = N_j \cos \varphi_j \quad (4)$$

ここで、 N は屈折率、 d は膜厚、 φ は入射角、 λ は入射光の波長である。

多層膜は各層に対応する特性行列の積で表現することができ、多層膜の特性行列は次式で表される。

$$[M] = \prod_{j=1}^n [M_j] = \begin{bmatrix} m_{11} & im_{12} \\ im_{21} & m_{22} \end{bmatrix} \quad (5)$$

ただし、 m は式(2)を用いて計算される実数を表し、 i は虚数単位である。

振幅反射率を r 、エネルギー反射率を R とすると次式が成立する。

$$r = \frac{(m_{11} + im_{12}P_s)P_e - (im_{21} + m_{22}P_s)}{(m_{11} + im_{12}P_s)P_e + (im_{21} + m_{22}P_s)} \quad (6)$$

$$R = |r|^2 \quad (7)$$

ただし、

$$P_e = N_e \cos \varphi_e \quad (8)$$

$$P_s = N_s \cos \varphi_s \quad (9)$$

垂直入射の時は次のようになる。

$$\begin{aligned} r &= \frac{(m_{11} + im_{12}N_s)N_e - (im_{21} + m_{22}N_s)}{(m_{11} + im_{12}N_s)N_e + (im_{21} + m_{22}N_s)} \\ &= \frac{(m_{11}N_e - m_{22}N_s) + i(m_{12}N_sN_e - m_{21})}{(m_{11}N_e + m_{22}N_s) + i(m_{12}N_sN_e + m_{21})} \end{aligned} \quad (10)$$

多層膜による反射防止膜の設計では、式(7)の R を最小にするように屈折率 N_j と膜厚 d_j を決定する必要がある。 d_j は連続量として取り扱うことができるが、 N_j は実用できる蒸着物質が限られているため、必要な値を任意に選ぶことはできない。

2.3 従来の設計手法

図2に従来の設計手順の例を示す。はじめに、設計波長(または波長域)に対する反射率分布の目標を設定する。

Fig.2 Conventional design process

(a) Equivalent film

(b) Initial structure

Fig.3 Conventional methods to compose films

次に従来手法の一つとして、前節で示した式を用い反射率を最低にするような単一層の蒸着物質の屈折率と膜厚を決定する。ここで算出した屈折率に該当する蒸着物質が存在しない場合は、図3(a)に示すように等価膜と呼ばれる2種類の蒸着物質で構成した対称型の3層膜を形成することで必要な屈折率を確保する¹⁾。この手法では等価膜の利用により屈折率の値の選択に大きな自由度を与えるが、膜数の増加、コスト増大の可能性がある。また3層膜以上では解を得るのが困難である。従来から行われているもう一つの手法の例としては、図2の右側および図3(b)に示すようにあらかじめ屈折率と層数を決めておき、各層の膜厚を設計パラメータとして最適な膜厚を決定することで多層膜構造を形成する方法がある⁸⁾。この場合には屈折率の組合せと層数は設計者の経験に依存するため、よりすぐれた設計解が存在する可能性がある。

2.4 データベース基準による最適設計

本研究では、あらかじめデータベースに保存されている蒸着物質の屈折率と、膜厚および層数の組合せを考え、その中から設計目標を達成するような最適な組合せを求める組合せ最適化問題を解くことで設計解を得る。ここでは最適化手法として遺伝的アルゴリズム (GA) を用いる。GAの適用については3章で説明する。

本研究におけるデータベースは図4に示すように蒸着物質の名称と屈折率により構成される。また膜厚も離散的な任意の値としてデータベースに含まれる。蒸着性やその他の制約条件を加えることも可能である。データベースを基準として最適設計を行うことにより、利用できる蒸着物質だけを用いて目標とする反射率分布を満たす多層膜構造が得られる。また、GAを適用することにより従来困難であった膜数の最適化も可能となる。

3. 反射防止多層膜設計へのGAの適用

3.1 設計パラメータの遺伝子表現

設計パラメータは蒸着物質の屈折率と膜厚であり、一層につき二つのパラメータが存在するので m 層の多層膜構造の場合、次式に示す $2 \times m$ 個の設計パラメータを取り扱う必要がある。

$$p = \{N_1, d_1, N_2, d_2, \dots, N_j, d_j, \dots, N_m, d_m\} \quad (11)$$

多層膜構造の設計に遺伝的アルゴリズムを適用する場合には、設計パラメータを遺伝子で表現する。ここでは、一つの層に対する各パラメータの組合せ、つまり、式(11)に示す設計パラメータである蒸着物質の屈折率と膜厚のすべての組合せを一つの順序番号 N_{ij} で表現する。ここで、 i は屈折率データを順番に並べたときの通し番号、 j は膜厚データを順番に並べたときの通し番号とすると、順序番号と設計パラメータの組合せとの関係は次式で与えられる。

$$N_{ij} = (i-1)J + j \quad (12)$$

Fig.4 Optimum design based on database

ただし、 J は膜厚データの総数である。例えば、表1に示すように順序番号45015は屈折率データ15番目の蒸着物質である酸化マグネシウムで作られた、膜厚データ3001番目の膜厚400nmの膜を表現している。したがって、遺伝的操作のうち突然変異は、遺伝子が整数値であるため、一つの整数値を乱数により別の整数値に変更することを意味している。

3.2 遺伝子表現の具体例

図5に示すように一つの遺伝子が一つの蒸着膜に対応している。すなわち、それぞれ各遺伝子が屈折率と膜厚の組合せの一つを表す。この遺伝子が連なって構成されたものが個体すなわち設計解である。一つの個体は一つの多層膜構造の設計候補を表現している。また、遺伝子番号が0のものは膜が存在しないことを意味する。例えば、図5の個体は5個の遺伝子で構成されているが二つの0を含むので3層膜を表現している。遺伝子の最大数は任意に設定できるため、最大膜数の制限が可能である。

3.3 適応度

各設計候補に対する設計目標の達成度は、個体の適応度

Table 1 Design parameters and sequential number

Refractive index No.	Thickness No.	Sequential number
$i = 1$	$j = 1$	1
1	2	2
1	3	3
⋮	⋮	⋮
⋮	⋮	⋮
1	3000	3000
1	3001	3001
2	1	3002
2	2	3003
⋮	⋮	⋮
⋮	⋮	⋮
15	3001	45015
16	1	45016
⋮	⋮	⋮
⋮	⋮	⋮
I	J	IJ

Fig.5 Coding to gene string

により評価する。適応度は次式のように設定する。

$$\text{Fitness} = c_1 \frac{1}{1+S} + c_2 \frac{v_{\max} - v}{v_{\max}} \quad (13)$$

ここで、 S は図6に示すように設計目標と反射率分布の囲む面積であり、 v は設計候補の多層膜の層数、 $v_{\max}$ は層数の最大値である。 c_1 、 c_2 は重み係数である。式(13)では、反射率分布が目標反射率に近づけば近づくほど、層数が少なくなればなるほどFitnessの値が増大する。

また、反射防止膜の性能を評価する指標や設計仕様の達成度を数値で表すことにより、別の評価項目も適応度に組み込むことが可能である。

3.4 設計手順

図7にデータベースを用いてGAにより最適化を行う手順を示す。Initializationにおいては、設計目標の反射率分布の設定および乱数によるGAの初期集団の生成を行う。Evaluationでは個体の遺伝子表現から多層膜構造を求め、データベースを参照することにより屈折率と膜厚を調べて式(7)により反射率分布を求める。そして、式(13)によりFitnessを計算する。Selectionでは決められた数の個体をFitnessに従って選択する。本研究では単純にFitnessの高い順に選択する。StopではGAの世代交代を終了するかどうかを判定する。各種の判定基準が考えられるが、ここでは世代数の上限をあらかじめ決定しておくものとする。Crossoverでは遺伝子の交叉を行う。一点交叉を用いるものとする。Mutationではあらかじめ決められた確率により遺伝子に突然変異をおこす。以上により、データベースから物性値を参照しながら個体である設計解を評価し、世代

交代を繰り返して最適解を得る。

4. 設計例

提案した本手法の有効性を示すため、いくつかの設計仕様に対して反射防止多層膜を設計した例を示す。設計例においてはGAのパラメータを、1世代における個体数20、1個体中の遺伝子数20、増殖率1.0、突然変異率0.3と仮定した。

なお、本論文では屈折率の波長依存性は考慮していないが、データベースが波長依存の構造を備えていれば容易に対応可能である。

4.1 例題1

例題1として、薄膜の層数を3層に固定して波長域 $\lambda = 300 \sim 800 \text{nm}$ に対する設計を行う。設計目標を、 $400 \text{nm} \leq \lambda \leq 600 \text{nm}$ のときの反射率を $R = 0\%$ と設定する。入射媒質を空気、基板材料の屈折率を1.52とし、垂直入射の場合を考える。本手法における適応度関数の重み係数は $c_1 = 1.0$ 、 $c_2 = 1.0 \times 10^{-5}$ と仮定した。蒸着物質のデータは31種類を用意した。

図8と表2に従来の手法による設計結果を示す。基準波長 $\lambda_0 = 490 \text{nm}$ とし、第1層、第3層の光学的膜厚を $N_1 d_1 = N_3 d_3 = 4/\lambda_0$ 、第2層膜は $N_2 d_2 = 2/\lambda_0$ とする¹⁾。図9に本手法による適応度の変化、図10にいくつかの世代における反射率分布、表3に最終世代(4000世代)において得られた多層膜構造の設計結果を示す。

目標反射率と設計結果の反射率分布の囲む面積を設計目

Fig.6 Example of target function (Design specification)

Fig.8 Results of reflectance distribution using conventional method (Example 1)

Fig.7 Flow chart of genetic algorithm

Table 2 Obtained structure (Conventional, Example 1)

Film No.	Material	Refractive index	Thickness nm
Medium	Air	1.00	—
3	MgF ₂	1.38	$4/\lambda_0$
2	Ta ₂ O ₅	2.10	$2/\lambda_0$
1	LaF ₃	1.65	$4/\lambda_0$
Base	Glass	1.52	—

標の達成度の指標にとると、この値が小さいほど目標反射率を満足しているものと考えられる。この例題では設計達成度の指標は、従来法で14.539、本手法で6.124となった。

4.2 例題2

次に本手法を用いて、より複雑な設計仕様に対する多層膜構造の設計を行う。設計目標は波長域 $\lambda=300\sim900\text{nm}$ に対し、 $300\text{nm}\leq\lambda\leq600\text{nm}$ のとき反射率 $R=80\%$ 、 $600\text{nm}<\lambda\leq900\text{nm}$ のとき反射率 $R=0\%$ と設定する。入射媒質を空気、基板材料の屈折率を1.52と仮定し垂直入射の場合を考える。重み係数、蒸着物質のデータは例題1と同様とする。

Fig.9 Fitness (Example 1)

Fig.10 Results of reflectance distribution using present method (Example 1)

Table 3 Obtained structure (Present, Example 1)

Film No.	Material	Refractive index	Thickness nm
Medium	Air	1.00	—
3	AlF ₃	1.23	99.00
2	Cd ₂ O ₃	1.63	103.50
1	CeF ₂	1.69	36.00
Base	Glass	1.52	—

図11に適応度の変化、図12にいくつかの世代における反射率分布の様子、表4に最終世代（5000世代）に得られた多層膜の構造を示す。図12から、反射率分布が世代の進行につれて設計目標値に向かって収束していることが分かる。本手法では多層膜の最大層数を20層として解析を行い、結果として6層の構造が得られた。なお、例題1と同様に膜の層数をあらかじめ固定して最適化を行うことも可能である。

Fig.11 Fitness (Example 2)

Fig.12 Results of reflectance distribution (Example 2)

Table 4 Obtained structure (Example 2)

Film No.	Material	Refractive index	Thickness nm
Medium	Air	1.00	—
6	AlF ₃	1.23	220.00
5	ZnTe	2.80	31.50
4	LiF	1.30	66.00
3	ZnTe	2.80	37.50
2	AlF ₃	1.23	330.50
1	ThO ₂	1.86	394.50
Base	Glass	1.52	—

Fig.13 Results of reflectance distribution (Example 3)

Fig.14 Fitness (Example 3)

4.3 例題3

次に、図13に示すように波長域 $\lambda = 300 \sim 900 \text{ nm}$ に対し設計目標を、 $300 \text{ nm} \leq \lambda \leq 500 \text{ nm}$, $700 \text{ nm} \leq \lambda \leq 900 \text{ nm}$ のときの反射率 $R = 0\%$, $500 \text{ nm} < \lambda < 700 \text{ nm}$ のときの反射率 $R = 80\%$ と三つの指定波長域で別々の目標反射率を設定した例題に本手法を適用する。重み係数、蒸着物質のデータは例題1と同様である。

図13にいくつかの世代における反射率分布の様子、図14に適応度の変化、表5に最終世代（5000世代）における多層膜の構造を示す。

以上の設計例から設計仕様が複雑になるにつれて薄膜の層数が増加していることがわかる。本手法では層数の最大値をあらかじめ設定する必要があるが、十分大きな値をとることにより、複雑さに対応できる。層数の設定を大きくしても計算コストへの影響は少ない。

設計仕様が複雑になるほど、各世代の個体の多様性が増している。このことは各例題に対するFitnessのグラフ（図9, 11, 14）から最大適応度と平均適応度の差が大きくなっていることから判断できる。これは、仕様が複雑になるに

Table 5 Obtained structure (Example 3)

Film No.	Material	Refractive index	Thickness nm
Medium	Air	1.00	—
12	NaF	1.34	214.00
11	CeF ₃	1.63	432.00
10	ZnTe	2.80	152.00
9	NaF	1.34	319.50
8	CeO ₂	2.20	45.00
7	CdS	2.57	464.00
6	SiO ₂	1.46	286.00
5	Sb ₂ S ₃	3.00	53.00
4	Ta ₂ O ₅	2.10	122.00
3	NaF	1.34	118.00
2	ThO ₂	1.86	458.00
1	Si ₂ O ₃	1.55	441.50
Base	Glass	1.52	—

したがって局所最適解の数が増加していると考えられ、このような場合に本手法はより有効に適用できるものと考えられる。

本手法による計算時間は、例題3においてはワークステーションにより3分程度であり十分実用的である。

5. おわりに

本研究では、反射防止膜の設計において、任意の波長域に対する目標反射率を達成するような、多層膜の層数と各層の屈折率および膜厚を決定する手法を提案した。光学薄膜データベースに基づき蒸着物質を選択する組合せ最適化問題をGAを用いて解き設計解を得た。従来法との比較および本手法による最適設計例を示し、手法の有効性を示した。本手法は、(1)利用可能な既存の蒸着物質から屈折率が選択される、(2)多層膜の層数も最適化され、あらかじめ設定する必要がない、(3)目標（設計仕様）とする反射率分布を任意に設定することが可能である等の特徴を有する。

参考文献

- 1) 草川 徹：レンズ光学，東海大学出版会，(1988) 261.
- 2) 坂和正敏，田中雅博：遺伝的アルゴリズム，朝倉書店，(1995).
- 3) D.E. Goldberg: Genetic Algorithms in Search Optimization, and Machine Learning, Addison-Wesley, New York, (1989).
- 4) 藤原史郎：光学薄膜，第2版，共立出版，(1985) 69.
- 5) 小瀬輝次，齋藤弘義，田中俊一，辻内順平，波岡 武：光工学ハンドブック，朝倉書店，(1986).
- 6) 辻内順平：光学概論Ⅱ，共立出版，(1979).
- 7) 鶴田匡夫：応用光学Ⅱ，培風館，(1990) 113.
- 8) OPTAS-FILM ユーザーズ・マニュアル，サイバネットシステムズ，(1996) 11-1.