層数および屈折率と膜厚の同時最適化による 斜入射コーティングの最適設計*

中 村 正 行** 小 林 憲 令*** 小 林 光 征†

Optimum Design of Oblique Incident Coatings by Simultaneous Optimization of Number of layers,
Refractive Index and Thickness

Masayuki NAKAMURA, Kazunori KOBAYASHI and Mitsuyuki KOBAYASHI

In a design of optical multilayer films at oblique incidence, reflectance and transmittance curves for two planes of polarizations (S and P polarizations) are different, so a large number of layers are required more than at normal one. Therefore the design process will be more complex. We have already developed the optimum design system of optical multilayer films using a genetic algorithm. In this paper, the design of oblique incident coatings is considered. The mathematical optimization method is applied to find the local optimum solution. And it is described how to consider the constraints for the design of multilayer coatings. Several coatings for non-polarizing edge filters and multiple narrow band filters to oblique incidence are obtained successfully.

Key words : optimum design, optical multilayer films, oblique incidence, polarized light

1. 緒 言

光学多層膜の設計では、多層膜の性能を表す分光反射率や分光透過率などの設計仕様を満たすように、各層の屈折率と膜厚、膜の層数を適切に設定する必要がある。しかし、機能に応じた反射率分布や透過率分布を表す多層膜構造を明示的に定式化できない点や、利用可能な蒸着物質の種類や数、蒸着性、実現可能な層数や膜厚などの多層膜製造上の制約がある。

斜入射光に対する光学多層膜の設計では、反射光および透過光の各偏光成分 (S 偏光, P 偏光) の光学特性が異なることを考慮する必要がある。光学系の機能によっては偏光成分の完全な分離または一致が要求される場合がある。また垂直入射に比べて斜入射の多層膜では設計仕様を満たすために必要な層数が多くなると言われている¹⁾。層数の増加に伴い決定すべきパラメータの数が増大するために、設計仕様を満たす多層膜構造を見いだすことが難しくなる。このため、多層膜の最適設計の際には大域的な最適化を行い、得られた設計解を初期値として局所的な最適化を行う²⁾などの提案がなされている。

著者らは設計者の負荷を軽減し、様々な設計仕様に対して有効な光学多層膜の最適設計システムの開発を行ってきた^{3) 4)}。これを垂直入射に対する多層膜の設計に適用してその有効性を確認している。開発したシステムは各層の屈折率と膜厚、多層膜の層数を遺伝的アルゴリズムにより同時に最適化するものである。本論文では、開発したシステムを用いた斜入射コーティングの最適設計について検討する。本システムで得られた設計解に数理最適化手法を援用することで局所最適解の探索の効率化をはかる。ここでは数理最適化手法として共役勾配法を用い、

その際必要となる感度解析について述べる。また、多層膜製造上の制約条件の考慮法について述べる。本手法の適用例として無偏光エッジフィルターおよび狭帯域多重フィルターの最適設計例を示す。

2. 斜入射コーティングの設計

2.1 最適設計システムによる最適化

光学多層膜の最適設計システムでは、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データの組合せを考え、その中から設計仕様を満たすような最適な組合せを求める組合せ最適化問題を遺伝的アルゴリズム(GA)により解くことで設計解を得る。設計パラメータは多層膜の層数 n と j 番目の層の屈折率 N_j と膜厚 d_j であり、 $n \times 2$ 個のパラメータがある。

斜入射コーティングでは、図1に示すようにS偏光とP偏光成分の分光反射率(R_s, R_p)および分光透過率(T_s, T_p)が異なり、要求される仕様により反射光と透過光の偏光を考慮する場合や考慮しない場合がある。偏光を考慮しない場合は、入射光がランダム偏光 (自然光) であるとして反射率を次式⁵⁾により計算する。

$$R = \frac{R_s + R_p}{2} \quad (1)$$

得られた反射率と目標反射率の間の面積 S に基づき、適応度関数を次式のように設定する。

$$F = \frac{1}{W} \quad (2)$$

ただし、

$$W = \frac{S}{S_{\max}} \quad (3)$$

$$S = \Delta\lambda \sum_{l=1}^L \sqrt{(R(\lambda_l, p) - R_T(\lambda_l))^2} \quad (4)$$

$$p = \{d_1, N_1, \dots, d_n, N_n\} \quad (5)$$

* 原稿受付 平成 12 年 11 月 14 日

** 正 会 員 信州大学工学部 (長野市若里 4-17-1)

*** 信州大学大学院

† 信州大学工学部

Fig.1 A structure of multilayer films

$$S_{\max} = \Delta\lambda \sum_{l=1}^L \left(\left| R_T(\lambda_l) - \frac{R_{\max}}{2} \right| + \frac{R_{\max}}{2} \right) \quad (6)$$

$S_{\max}$ は面積のとりうる最大値である。また $\Delta\lambda$ は波長の刻み幅で、 L は計算の対象となる波長の数、 $R_T(\lambda)$ は目標反射率、 $R_{\max}$ は反射率の最大値で $R_{\max}=100\%$ とする。

2.2 数値最適化手法の援用

本システムで得られた設計解を初期値として、数値最適化手法を適用し局所探索を行うことで、より精度の高い設計解を得る。最適化の概略を図2に示す。得られた多層膜構造の各層の屈折率 N_j と層数 n を固定し、数値最適化手法により膜厚 d_j の値を最適化する。なお数値最適化手法として共役勾配法 (Conjugate gradient method: CGM) を用いる。

CGM の評価関数は式(3)の W とする。最適化に伴い、 W は最小化され最小値 0 に近づく。

2.3 感度解析

本研究では CGM の計算に必要となる評価関数の微係数を、反射率 $R(\lambda, p)$ を設計パラメータで偏微分した感度解析により求める。反射率 R はエネルギー反射率を意味し、多層膜の特性マトリックス M^0 から得られる。図1に示すような n 層の多層膜の場合、 j 層目の特性マトリックス M_j は次式のように定義される。

$$M_j = \begin{pmatrix} \cos \tau_j & \frac{i}{p_j} \sin \tau_j \\ ip_j \sin \tau_j & \cos \tau_j \end{pmatrix} \quad (7)$$

$$\tau_j = \frac{2\pi}{\lambda} N_j d_j \cos \theta_j \quad (8)$$

$$p_j = \begin{cases} -N_j \cos \theta_j & (\text{S polarization}) \\ \frac{N_j}{\cos \theta_j} & (\text{P polarization}) \end{cases} \quad (9)$$

ここで θ_j は j 層目への光の入射角、 λ は入射光の波長であり、 p_j は j 層目の実効屈折率である。次式のように各層の特性マトリックスの積から多層膜全体の特性マトリックス M が求まる。

$$M = \prod_{j=1}^N M_{N+1-j} = \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{pmatrix} \quad (10)$$

全体の特性マトリックスの各成分より、振幅反射率 r 、エネルギー

Fig.2 An outline of optimization process

ギー反射率 R は次式を用いて計算できる。

$$r = \frac{(m_{11}P_e - m_{22}P_s) + i(m_{12}P_sP_e - m_{21})}{(m_{11}P_e + m_{22}P_s) + i(m_{12}P_sP_e + m_{21})} = \frac{A + iB}{C + iD} \quad (11)$$

$$R = |r|^2 = \frac{A^2 + B^2}{C^2 + D^2} \quad (12)$$

ただし、 P_s と P_e は基板材料と入射媒質の実効屈折率である。

j 層目設計パラメータを x_j とすると、反射率 R の感度は次式のように表せる。

$$\frac{\partial R}{\partial x_j} = \frac{2\{(C^2 + D^2)(AA' + BB') - (A^2 + B^2)(CC' + DD')\}}{(C^2 + D^2)^2} \quad (13)$$

ただし、

$$A' = \frac{\partial A}{\partial x_j} = P_e \frac{\partial m_{11}}{\partial x_j} - P_s \frac{\partial m_{22}}{\partial x_j},$$

$$B' = \frac{\partial B}{\partial x_j} = P_s P_e \frac{\partial m_{12}}{\partial x_j} - \frac{\partial m_{21}}{\partial x_j},$$

$$C' = \frac{\partial C}{\partial x_j} = P_e \frac{\partial m_{11}}{\partial x_j} + P_s \frac{\partial m_{22}}{\partial x_j},$$

$$D' = \frac{\partial D}{\partial x_j} = P_s P_e \frac{\partial m_{12}}{\partial x_j} + \frac{\partial m_{21}}{\partial x_j} \quad (14)$$

以上より特性マトリックスの偏微分から反射率の感度が求められる。 j 層目の特性マトリックスの偏微分は次式のように表せる。

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial m_{11}}{\partial x_j} & \frac{\partial m_{12}}{\partial x_j} \\ \frac{\partial m_{21}}{\partial x_j} & \frac{\partial m_{22}}{\partial x_j} \end{pmatrix} = \left(\prod_{k=1}^{N-j} M_{N+1-k} \right) (M_j)' \left(\prod_{k=N-j+2}^N M_{N+1-k} \right) \quad (15)$$

一方、式(3)より評価関数 W の微係数は次式のように表せる。

$$\begin{aligned} \frac{\partial W}{\partial x_j} &= \frac{1}{S_{\max}} \frac{\partial S}{\partial x_j} \\ &= \frac{\Delta\lambda}{S_{\max}} \sum_{l=1}^L \frac{R(\lambda_l, p) - R_T(\lambda_l)}{|R(\lambda_l, p) - R_T(\lambda_l)|} \frac{\partial R}{\partial x_j} \end{aligned} \quad (16)$$

式(16)に式(13)により表される反射率の感度を代入することで、評価関数の微係数が求まる。

2.4 膜厚の制約条件の考慮

多層膜の製造において、製造可能な各層の膜厚の値の制限を考慮する必要がある。そこで膜厚の制限を最適化の制約条件として、膜厚 d の関数であるペナルティ関数 $g(d)$ により考慮する。ここではペナルティ関数としてシグモイド関数を用いる。

2.3.1 CGM における制約条件の取扱い

CGM では連続量の解探索を行うため、膜厚の許容値の最大値と最小値を考慮する必要がある。そこでペナルティ関数を次式のように設定する。

$$g(d_j) = \frac{c}{1 + e^{-a_1 d_j + b_1}} + \frac{c}{1 + e^{-a_2 d_j + b_2}} \quad (17)$$

ただし、

$$a_k = \frac{2}{d_{\max} - d_l} \ln \frac{1 - \alpha}{\alpha} \quad (k=1, 2) \quad (18)$$

$$b_k = \frac{d_{\max} + d_l}{d_{\max} - d_l} \ln \frac{1 - \alpha}{\alpha} \quad (k=1, 2) \quad (19)$$

$$c = g_{\max} \quad (20)$$

ここで $d_{\max}$ は制約の境界となる値、 d_l は境界における許容範囲である。 α は許容範囲の割合、 $g_{\max}$ はペナルティ関数 $g(d_j)$ の最大値である。式(17)における右辺第 1 項は膜厚の最小値における制約、第 2 項は最大値における制約を表す。図 3 に式(17)のペナルティ関数の概略を示す。膜厚が許容範囲を超えるとペナルティ関数の値は増大する。

多層膜の層数を n とし、評価関数 W にペナルティ関数により求まるペナルティ項を加えた修正評価関数 W' を次式のように設定する。

$$W' = W + \frac{1}{ng_{\max}} \sum_{j=1}^n g(d_j) \quad (21)$$

各層の膜厚が許容範囲を超えると修正評価関数 W' の値が大きくなる。

2.3.2 GA における制約条件の取扱い

本システムで用いている GA では組合せ最適化問題を解くため、膜厚を離散値として扱う。このため膜厚のとりうる範囲はあらかじめ設定されている。しかし、交叉や突然変異などの遺伝操作の過程で、同じ材料の膜が重なると 1 つの層とみなされるため許容範囲を超える可能性がある。そこで膜厚の最大値をペナルティ関数により考慮する。このためペナルティ関数は、式(17)の第 1 項を省略した次式を用いる。

$$g(d_j) = \frac{c}{1 + e^{-a_2 d_j + b_2}} \quad (22)$$

GA では式(21)に式(22)を代入し、得られた修正評価関数 W' を式(2)の適応度関数に代入することで製膜上の条件を考慮する。

3. 設計例

最適設計システムに数理最適化手法を援用して斜入射コーティングの設計を行う。表 1 に GA のパラメータなどのシステムの入力データを示す。またシグモイド関数に用いる設定値は、 $g_{\max}=1.0$ 、 $\alpha=0.9$ 、 $k=1$ のとき $d_{\max}=10.0\text{nm}$ 、 $d_l=9.0\text{nm}$ 、また $k=2$ のとき $d_{\max}=300.0\text{nm}$ 、 $d_l=301.0\text{nm}$ とする。これにより各層の膜厚の製造可能範囲は $10.0\text{nm} \leq d \leq 300.0\text{nm}$ となる。

ここでは蒸着物質、入射媒質および基板材料の屈折率の波長分散は考慮しないものと仮定する。

3.1 無偏光エッジフィルター

エッジフィルターは、阻止帯と透過帯を有し、分光反射率が急激に変化する特性をもつフィルターである。無偏光エッジフィルターはこの特性に S 偏光と P 偏光の分光特性を一致させる必要があり、この 2 つの特性を同時に満たすことが困難である⁶⁾⁷⁾。主な用途としては、液晶プロジェクターなどの色分解に用いられるダイクロイックフィルターが挙げられる。

Fig.3 The schematic view of a penalty function

Table 1 Assumed parameters

Minimum thickness $d_{\min}$	30.0 nm
Maximum thickness $d_{\max}$	150.0 nm
Unit of thickness Δd	5.0 nm
Unit of wavelength $\Delta \lambda$	2.0 nm
Ratio of reproduction	1.0
Probability of mutation	0.3
Number of multi-point crossovers	1
Number of populations	100
Number of genes	70
Maximum number of generations	6000

ここでは S 偏光と P 偏光の反射率を考慮するため、適応度関数 F と評価関数 W は、次式に示すように各偏光成分の適応度 F_s 、 F_p および評価関数 W_s 、 W_p の重み付き代数和で表す。

$$F = c_1 F_s + c_2 F_p \quad (23)$$

$$W = c_3 W_s + c_4 W_p \quad (24)$$

ただし $c_1 \sim c_4$ は重み係数である。

エッジフィルターは分光特性の形状から短波長透過フィルター (SWPF: Short wave pass filter) と長波長透過フィルター (LWPF: Long wave pass filter) に分けられる。ここではこれら 2 つのフィルターの設計を行う。各フィルターの波長域とその目標反射率を表 2 に示す。光の入射角は 45° 、基板材料はガラス (BK7) で屈折率は 1.52 とし、入射媒質は空気 (屈折率 1.00) とする。利用可能な蒸着物質は 4 種類として全て誘電体とし、それらの屈折率を 1.38, 1.65, 1.95, 2.35 と仮定する。重み係数 $c_1 \sim c_4$ は 0.5 とする。

3.1.1 SWPF の設計結果

図 4(a) に GA により得られた SWPF の多層膜の分光反射率を示す。この多層膜構造を初期値として CGM により最適化を行って得られた多層膜の分光反射率を図 4(b) に示す。図 4 から CGM を適用することでリップルが大幅に減少していることが分かる。図 5(a) と図 5(b) に GA により得られた多層膜の各層の屈折率と膜厚を示す。また図 5(c) に CGM を適用して最終的に得られた各層の膜厚を示す。GA による最適化では多層膜の総数は 54 層となった。図 5(b) と図 5(c) から、得られた多層膜の各層の膜厚は既定した許容範囲内に収まっていることがわかる。

3.1.2 LWPF の設計結果

図 6(a) に GA により得られた LWPF の多層膜の分光反射率を、

Table 2 Design specifications for edge filters

	Wavelength nm	Reflectance %
SWPF	400 ~ 600	0
	600 ~ 700	100
LWPF	400 ~ 500	100
	500 ~ 700	0

(a) Obtained by GA

(b) Final results

Fig.4 Results of spectral reflectance (Short wave pass filter)

(a) Refractive index

(b) Thickness obtained by GA

(c) Thickness for final results

Fig.5 Obtained Structure of multilayer films (Short wave pass filter)

(a) Obtained by GA

(b) Final results

Fig.6 Results of spectral reflectance (Long wave pass filter)

図 6(b)に、引き続き CGM を適用して得られた多層膜の分光反射率を示す。GA で得られた分光反射率のリップルが大きい、CGM を適用することで大幅に改善されている。図 7 に図 5 と同様にして得られた多層膜の屈折率と膜厚の分布を示す。GA による最適化では層数は 53 層となった。図 7 から得られた多層膜も製造上の条件を満足していることが分かる。

最適設計システムで得られた SWPF と LWPF の多層膜構造を CGM を援用することで改善することができる。

3.2 狭帯域多重フィルター

最適設計システムにより垂直入射に対する狭帯域多重フィルターの設計を行い、設計仕様を満足する多層膜が得られている。ここでは斜入射光に対する狭帯域多重フィルターの設計を行う。狭帯域多重フィルターでは、狭い波長域における高反射率と低反射率の振幅が大きく、両者の反射率分布を同時に満たすことが困難である⁸⁾。

ここでは、反射率の計算に式(1)を用いる。波長域とその目標反射率を表 3 に示す。入射角、基板材料、入射媒質は無偏光エッジフィルターの場合と同じものを用いる。利用可能な蒸着物質は 2 種類の誘電体としそれらの屈折率を 1.46, 2.35 と仮定する。

図 8(a)に GA により得られた多層膜の分光反射率を、図 8(b)に GA の結果を初期値として CGM を適用して得られた多層膜の分光反射率を示す。GA による最適化で 35 層の多層膜が得られた。また図 9 に多層膜の屈折率と膜厚の分布を示す。図 9 より各層の膜厚は設定した許容範囲内におさまっていることが

Fig.7 Obtained structure of multilayer films (Long wave pass filter)

Table 3 Design specifications for narrow band filter

Wavelength nm	Reflectance %
420 ~ 530	1
530 ~ 570	99
570 ~ 600	1
600 ~ 650	99
650 ~ 700	1

(a) Obtained by GA

(b) Final results

Fig.8 Results of spectral reflectance (Narrow band filter)

Fig.9 Obtained structure of multilayer films (Narrow band filter)

分る。

ここに示した2種類の斜入射コーティングの設計においては、GAによる解は世代の後半ではほとんど変化せず収束しているものと考えられる。GAによる結果を初期値とすることでCGMが有効に働き、リップルの改善や分離波長での急峻さの確保がなされている。

4. 結 言

本研究では、著者らが開発したさまざまな設計仕様に対して有効な光学多層膜の最適設計システムを用いて、斜入射コーティングの設計を行った。GAによる大域的な探索で得られた多層膜を初期値として、数値最適化手法により局所探索を行った。その際に多層膜製造上の制約である各層の膜厚の許容範囲を考慮した。2種類の斜入射コーティングの設計例から、得られた多層膜は設計仕様を満足し、それと同時に設定した制約条件も満たしている。数値最適化手法を援用することで層数が多い場合の効率化が可能であり、本手法は偏光ビームスプリッターや無偏光ビームスプリッターなど斜入射を対象とした他の光学素子の設計に対しても有効であると考えられる。

参 考 文 献

- 1) Macleod, A.H.(著), 小倉繁太郎, 中島右智, 矢部 孝, 吉田国雄(訳): 光学薄膜, 日刊工業新聞社, (1989), pp.373-425.
- 2) オプトロニクス編集部(編): 光設計とシミュレーションソフトの上手な使い方, オプトロニクス社, (2000), pp.93-149.
- 3) 中村正行, 後藤孝章: 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, 精密工学会誌, **64**, 2, (1998), pp.215-220.
- 4) 中村正行, 磯野将之, 小林光征: 光学多層膜最適設計システムの開発, 1999年度精密工学会秋季大会学術講演論文集, (1999), p.531.
- 5) 村田和美: 光学, サイエンス社, (1979), pp.20-35.
- 6) 草川 徹: レンズ光学, 東海大学出版, (1986), pp.260-310.
- 7) Thelen, A.: Nonpolarizing edge filters. Journal of the Optical Society of America. **71**, 3, (1981), pp.309-314.
- 8) Tikhonravov, A. V., Trubetskov, M. K. and DeBell, G. W.: Application of the needle optimization technique to the design of optical coatings. Applied Optics. **35**, 28, (1996), pp.5493-5508.
- 9) Zorc, H., Janicki, V. and Persin, A.: Narrow-band reflector coatings: design procedures. Applied Optics. **37**, 19, (1998), pp.4249-4253.