

Transfer Matrix Methods による THz 帯反射防止構造の最適化

小宮 利通^A、余 希^A、宮島 顕祐^A
東京理科大学先進工学研究科物理工学専攻^A

Profile Optimization of Antireflective Structure for Terahertz Frequencies by Transfer Matrix Methods

T. Komiya^A, X. Yu^A, K. Miyajima^A

Department of Applied Physics, Graduate School of Advanced Engineering, Tokyo University of Science^A

Abstract

A moth-eye structure on a material surface is effective to reduce its reflection loss for THz region. We simulated reflectance spectra by the transfer matrix method from refractive index transitions of periodic structures, the size of which are consistent with the Klopfenstein taper. As a result of exhaustive simulation, compared to the Klopfenstein taper, the profile exhibiting the reduction of average reflectance of 62 % was found for UV Polymer. In addition, we evaluated the average reflectance using parameters including first or second derivative of refractive index and optical length. Dependence of the minimum values of average reflectance on the parameters will be available to obtain the appropriate profile for specific frequency region.

1. はじめに

0.1 ~ 10 THz の遠赤外領域に位置する電磁波を THz 波と呼ぶ。THz 波は医療 [1] やイメージング [2]、無線通信 [3] など様々な分野での応用が期待されている。特に無線通信において、現行の 5G より高速な 6G への割り当てが検討されているが、THz 帯は大気中の分子による吸収が大きく、信号が減衰しやすい [4]。更に THz 帯で最も利用されている Si、GaAs、などの半導体材料は反射損失が大きく、デバイスとしての応用には反射率を軽減することが重要である。試料表面へサブ波長オーダーの微細周期構造を加工することで、実効的な屈折率を緩や

かに変化させ、反射による損失を軽減できることが分かっている。このような周期構造は蛾の複眼から着想を得ていることからモスアイ構造と呼ばれる。これまでモスアイ構造の定性的な理解として、構成する突起が細長い程反射を防止できることが分かっているが、屈折率を高さ h の関数とした屈折率遷移 $n(h)$ と反射率との定量的な関係性は明らかになっていない。この屈折率遷移と反射率の関係性を導き出し、ターゲットとなる帯域、材料で最も反射率を軽減できる形状を見出すことが本研究の目的である。モスアイ構造の有効屈折率 n_{eff} は構造の周期が材料中での波長より小さいとき、空気と

材料の屈折率 n_{air} 、 $n_{material}$ と材料のその高さでの空間占有率 f を用いて

$$n_{eff} = \frac{1}{\sqrt{\frac{1-f}{n_{air}^2} + \frac{f}{n_{material}^2}}} \quad (1)$$

と表される[5]。

先行研究において、モスアイ構造での特徴的な4つの形状 (Stairs、Parabola、Triangle、Triangle-Stairs) に対して、屈折率遷移の1次導関数を含むパラメータと平均反射率には線形相関が報告されている[6]。

一方、特定の帯域にて反射率を決定する屈折率遷移として、Klopfenstein Taper が報告されている。Klopfenstein Taper の屈折率遷移 n_{eff} と反射係数 Γ はそれぞれ式 (2.1)、(2.2) であり、帯域と最大反射係数を決定することで屈折遷移を算出できる[7]。

$$n_{eff}(z) = \exp\left(\frac{1}{2} \ln n_{air} n_{material} + \frac{\Gamma_0}{\cosh A} A^2 \phi \left(\frac{2z}{L} - 1, A\right)\right) \quad (2.1)$$

$$\Gamma(L) = \Gamma_0 e^{-i\beta L} \frac{\cos\sqrt{(\beta L)^2 - A^2}}{\cosh A} \quad (2.2)$$

ここで L は全長(光路長)、 z は高さ(光路長)、 β は波数、 Γ_m は帯域での最大反射係数であり、 Γ_0 、 A はそれぞれ

$$\Gamma_0 = \frac{n_{material} - n_{air}}{n_{material} + n_{air}} \quad (2.3)$$

$$A = \cosh^{-1}\left(\frac{\Gamma_0}{\Gamma_m}\right) \quad (2.4)$$

で与えられる値である。

本研究では任意の屈折率遷移からモスアイ構造の断面形状への変換と反射スペクトルの計算を行い、得られたデータを0.5~

2.5 THz での平均反射率で分類した。またシミュレーションにより得られたデータから屈折率遷移 $n(h)$ を用いたパラメータで平均反射率を評価した。対象とする材料は、加工が容易であることから紫外線硬化樹脂(UV Polymer)とした。

2. 計算手法

本研究では Transfer Matrix Methods (TMM) による反射率シミュレーションを行った。TMM は多層膜の界面での透過・反射と層内部での位相のずれから反射率を導き出す計算である。Transfer Matrix の式と得られる反射率を式 (3.1)、(3.2) に示す[8]。

$$\begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} =$$

$$\prod_{t_{j+1,j}} \begin{pmatrix} t_{j+1,j} t_{j+1,j} - r_{j+1,j} r_{j+1,j} & r_{j+1,j} \\ -r_{j+1,j} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-i\phi_j} & 0 \\ 0 & e^{i\phi_j} \end{pmatrix} \quad (3.1)$$

$$R = \left| \frac{D}{C} \right|^2 \quad (3.2)$$

このように、隣り合う層の界面での反射係数 r 、透過係数 t と各層での位相のずれ ϕ から多層膜の反射率 R を求める。まずモスアイ構造と同等の屈折率遷移を持つ多層膜のモデルを作成する(図1)。各層の屈折率は n_{air} から $n_{material}$ までの間で均等に分けられた数値の中から、昇順に選んで割り当てている。その後周波数毎に TMM を行い、反射スペクトルを得る。この方法により、1時間で数千の屈折率遷移、断面形状、反射スペクトルのデータの取得に成功している。

本シミュレーションでは空気と UV Polymer の屈折率をそれぞれ $n_{air} = 1.00$ 、 $n_{UV} = 1.65$ [9]またモスアイ構造のモ

デルは高さ $116.7 \mu\text{m}$ 、ピッチ幅 $72.5 \mu\text{m}$ とした。これはの Klopfenstein Taper にて、 R の最大値 1% (平均値 0.5%)、帯域 $0.5 \sim 2.5 \text{ THz}$ を与えたときのサイズである。

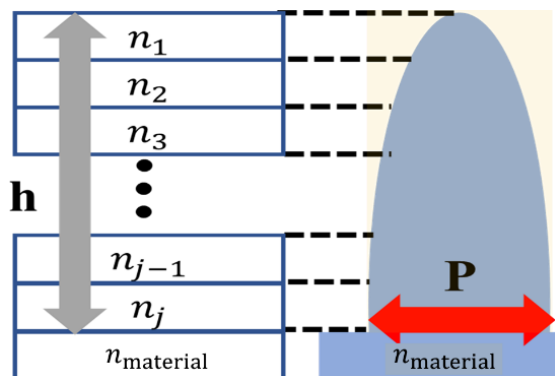


図 1 モosaic構造と多層膜モデルの対応関係。連続的な屈折率遷移を持つモosaic構造を有限の多層膜として計算を行う。 P は構造の周期。屈折率は $n_{\text{air}} < n_1 < n_2 < \dots < n_{j-1} < n_j < n_{\text{material}}$ となる。

3. 結果と考察

層数 5 で網羅的なシミュレーションを行った結果、 $0.5 \sim 2.5 \text{ THz}$ で最も反射を軽減できる形状の屈折率遷移、形状、反射スペクトルを得ることができた。最適化された形状での平均反射率は 0.19% であった。同サイズの Klopfenstein Taper の平均反射率が 0.5% であることから、約 62% の平均反射率の軽減が示された。平均反射率毎の屈折率遷移の傾向を捉えるため、 $R \approx 0.2\%$ 、 0.4% 、 0.5% の 3 つの反射率帯の屈折率遷移、断面形状、反射スペクトルの比較を行った(図 2)。

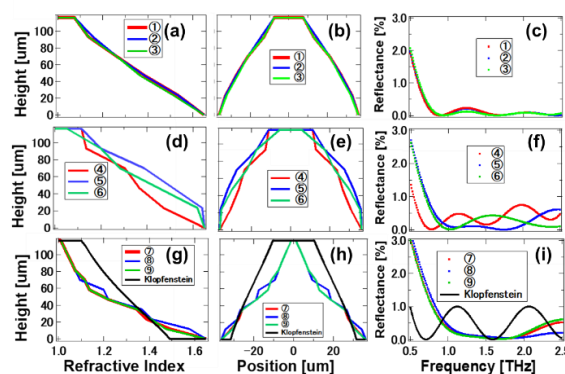


図 2 平均反射率帯毎の屈折率遷移、形状、反射スペクトルの比較 ((a)~(c) $R \approx 0.2\%$ 、(d)~(f) $R \approx 0.4\%$ 、(g)~(i) $R \approx 0.5\%$ のデータで、(a)、(d)、(g) 屈折率遷移、(b)、(e)、(h) 断面形状、(c)、(f)、(i) 反射スペクトルを示している。傾向を示すため、各反射率帯から 3 つずつデータを選択して掲載しており、①が最適化された形状で $R = 0.19$ 。(g)~(i) には同サイズの Klopfenstein Taper の理論値も示している。)

平均反射率ごとに屈折率遷移と形状を比較すると、平均反射率の高い形状ほど屈折率遷移の傾きの変化が大きく、また、低周波数側の $0.5 \sim 1.0 \text{ THz}$ での反射が大きい。反射スペクトルについては Klopfenstein Taper において、帯域の低周波端はテーパの光路長が長いほど低くなる[7]。以上から、平均反射率には屈折率遷移の 2 次導関数及び形状の光路長との関係があることが推測された。そこで、屈折率遷移の 2 次導関数の平均 $\text{Ave}[d^2n/dh^2]$ 、屈折率遷移の 2 次導関数の平均からのずれの 2 乗

$$\text{Ave} \left[\frac{d^2n}{dh^2} - \text{Ave} \left[\frac{d^2n}{dh^2} \right] \right]^2$$

、光路長の 3 つのパラメータで平均反射率の評価を行った。先

行研究の1次導関数を用いたパラメータと合わせて結果を図3に示す。

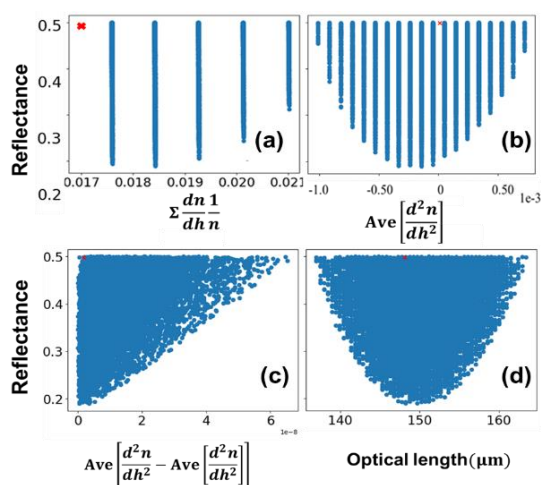


図3 平均反射率とパラメータの関係（縦軸:平均反射率、横軸:(a) $\sum \frac{dn}{dh}$ 、(b) $\text{Ave} \left[\frac{d^2n}{dh^2} \right]$ 、(c) $\text{Ave} \left[\frac{d^2n}{dh^2} - \text{Ave} \left[\frac{dn}{dh} \right] \right]$ 、(d) 光路長)

平均反射率の最小値にはそれぞれのパラメータへの依存性が見られた。上記のものを含む複数のパラメータを組み合わせることにより最適な屈折率遷移、形状を求めることが出来ると推測される。

4. まとめ

本研究ではTMMにより、5層条件下で最も反射を軽減できる形状のデータを取得できた。また平均反射率を屈折率の1次導関数、2次導関数を含むパラメータで評価することで、平均反射率の最小値が変化することが分かった。今後は1次導関数、2次導関数以外のパラメータも検討し組み合わせることで、任意の材料、周波数帯により詳細な屈折率遷移を取得する方法を探究

する。また本シミュレーションで得られたモデルを基にUV Polymerで試料の作成を行い、実際の反射率の評価を行う。

参考文献

- [1] Q.Sun et al, “Recent advances in terahertz technology for biomedical applications,” Quant. imaging medicine surgery 7, 345 (2017)
- [2] C. Jansen et al, “Terahertz imaging: applications and perspectives,” Appl. Opt. **49**, E48–E57 (2010).
- [3] 永妻 忠夫 “テラヘルツ波が拓く超高速無線通信—光ファイバ通信並みの高速無線の実現を目指して—”
- [4] 国立研究開発法人情報通信研究機構 “テラヘルツ波 大気減衰率データ 無料提供サービスの開始”
- [5] M Born ,E Wolf Principle of Optics 7 th Edition Cambridge University Press (2020)
- [6] Xi Yu et al, “Profile control of femtosecond laser-fabricated moth-eye structures on Si substrate” Optics and Lasers in Engineering **142** 106584 (2021).
- [7] D. M. Pozar, “Tapered Lines” Microwave Engineering 4 th edition, Willey, (2011).
- [8] B. E. A. Saleh, M. C. Teich, “Fundamentals of Photonics” Second Edition Wiley-Interscience (2007)
- [9] N. DUANGRIT et al, ‘Terahertz Dielectric Property Characterization of Photopolymers for Additive Manufacturing” IEEE Access **7** 12339 - 12347 (2019).