

有限要素法によるフォトニック結晶ナノ共振器の多数の穴の自動最適化

Automated multi-hole optimization of photonic crystal nanocavity based on FEM simulation

NTT ナノフォニクスセンタ¹, NTT 物性基礎研² ○倉持 栄一^{1,2}, Martel, Théo², 北 翔太^{1,2},
新家 昭彦^{1,2}, 納富 雅也^{1,2}

NTT Nanophotonics Center¹, NTT Basic Research Labs.², °Eiichi Kuramochi^{1,2},
Théo Martel², Shota Kita^{1,2}, Akihiko Shinya^{1,2}, Masaya Notomi^{1,2}

E-mail: eiichi.kuramochi.bf@hco.ntt.co.jp

近年の計算機パワーの増大は複雑な構造パラメータを有するフォトニック結晶共振器の自動的な最適化[1]や既存の共振器の大幅な改良[2]を可能としている。しかし機械学習ベースの手法[2]では未知の共振器構造に対する dataset の準備に課題があり、簡易的な計算手法によるもの[1]は、別途 FDTD 法等の第一原理計算による検証を行う必要があった。今回我々は、様々な有用な特性を有する H1 スロットナノ共振器[3,4]を対象に、有限要素法による第一原理電磁界計算を行う COMSOL による共振器計算を実施しながら構造最適化を自動的に進めるプログラムを開発した。

COMSOL の application builder 機能を利用し外部 java プログラムから共振器の生成、COMSOL シミュレーションの実行、シフト量の最適化を遂行した。共振器の穴変調問題に適した最適化手法として Nelder-Mead algorithm [5]を選択した。 N 個の最適化パラメータ (穴シフト量) に対し $N+1$ 個の共振器を最初に生成する際、 i 番目の共振器の i 番目のシフト量を s_0 とし他は 0 (0 番目の共振器は全て 0) とすると、H1 スロットナノ共振器では s_0 を $0.15 \sim 0.25a$ とすると概ね良好な高 Q 値ナノ共振器が自動生成された。標準的な Nelder-Mead algorithm に対し、重心を共振器 Q 値による重み付けをして決定し、かつ反射/膨張/収縮操作の際の係数にも共振器 Q 値の分散を反映する、ナノ共振器最適化に特化した改良を加えることで、最適化を大幅に高速化した。図 1 に示す $N=22$ の H1 スロットナノ共振器の事例においては最適化反復回数約 100 回で Q 値 10^6 以上、同約 200 回で 10^7 程度まで高 Q 値化された。既知の高 Q 共振器設計を参照すること無く、様々な構造パラメータにおいて異なる穴配置の高 Q 値ナノ共振器が生成された。本プログラムで生成された共振器を実際に作製することで、前回報告[4]のように超純水中で 5 万を超える Q 値が得られたほか、空气中動作のため最適化した共振器では実験で以前の共振器[3]で得られた 34 万を上回る Q 値を確認している。本研究は JST、CREST(JPMJCR15N4)の支援を受けた。

[1] M. Minkov et al., Appl. Phys. Lett. 111, 131104 (2017).

[2] T. Asano and S. Noda, Opt. Express 26, 32704 (2018).

[3] 倉持栄一他、第 78 回秋季応用物理学会 6a-A405-1 (2017); https://doi.org/10.1364/CLEO_AT.2017.JTH3M.5.

[4] 倉持栄一他、第 66 回春季応用物理学会 11p-W631-7 (2019); https://doi.org/10.1364/CLEO_SI.2019.SM2J.6.

[5] J. A. Nelder and R. Mead, Computer J. 7, 308 (1965) など。

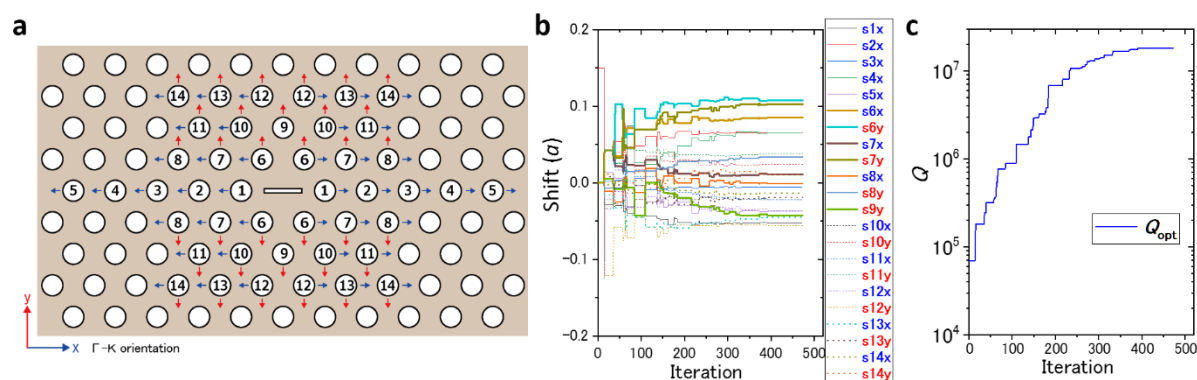


図 1 (a) H1 スロットナノ共振器のシフト対象穴($j=1-14$)とシフト方向(x, y)。シフトパラメータ総数(N)は 22。 (b-c) 最適化の進行に伴う穴シフト量(b)とベストな共振器の Q 値(c)の推移。対象共振器の構造パラメータは以下の通り。格子定数 a : 440 nm。屈折率: 3.46(Si), 1.0 (air)。穴半径 r : 100 nm。Si 層厚さ t : 220 nm。スロット長さ/幅: sl/sw : 410/30 nm。 (b)において $s_{jx(y)}$ は穴 j の $x(y)$ 方向のシフト量。最適化終了時の共振器波長 1560 nm, Q 値 1.8×10^7 , モード体積 $0.011 (\lambda/n)^3$ 。