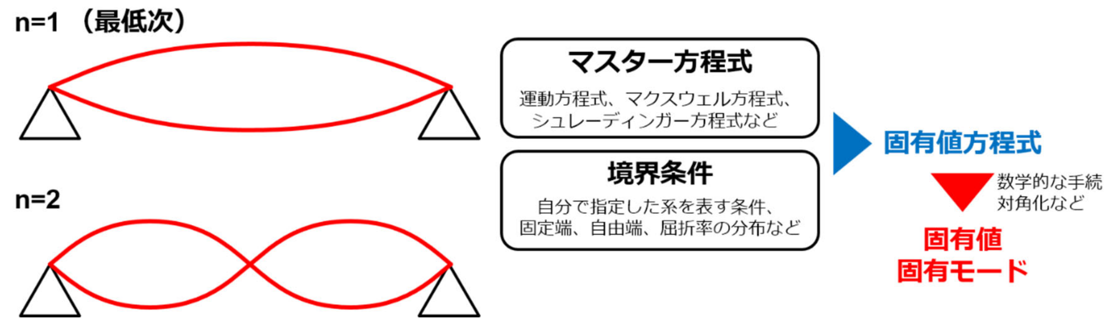
5　ナノフォトニクスのための準備

フォトニック結晶やメタマテリアルといった個々の研究の説明に入る前に、ナノフォトニクスにおいて用いられる共通の概念について学ぶ。

電磁固有モード

まず、「固有モード」という概念について触れておこう。ナノフォトニクスでは基本的に、用意した系（システム）の中にどのような固有モード（単にモードということが多い）が存在するのか（許されるのか）を考える。というか、実態はむしろ逆で、所望の固有モードを得るにはどんな構造であればよいか、を考える（設計する）ことが多い。ちなみに、マクスウェル方程式をマスター方程式として得られるモードは、電磁波の固有モード、「電磁固有モード」とも呼ばれる。第 3 章では、用意した系に光を入射した時に何が起きるのか（どのように物質が応答するか）というイメージしやすい問題を扱ってきたが、これから調べる、「固有モード」は少し様相が異なる。なぜなら、固有モードは、入射波のような「光源」がなくても、系を設定するだけで計算できるからだ。

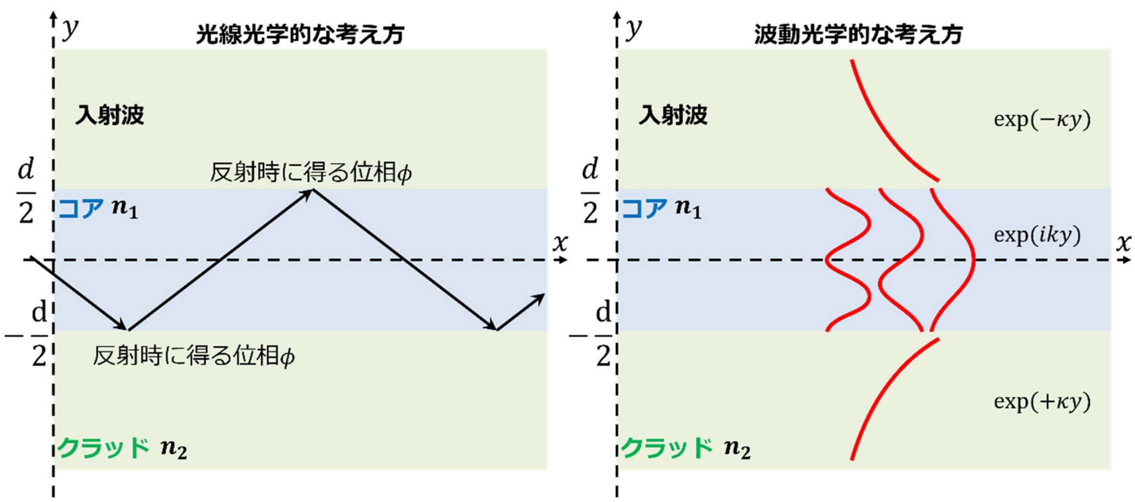
例を挙げよう。いきなり電磁モードの話をせずに、まずはイメージしやすい力学の問題を考えることにする。よく知られている固有モードに、ピンと張った弦の振動がある。図のような「振動モード」の絵をどこかで見たことがあるだろう。これは、「弦という系を設定した時点で求まる」固有モードである。つまり、弦を「どうはじくか」は、固有モードの計算には含まれていない。固有モードを求めるには、次のような手順をとる。まず、系を記述する「マスター方程式」を準備する。弦の場合は、連続体の運動方程式になる。そして、自分が設定した系を記述する条件式を用意する。このような式は一般に「境界条件」と呼ばれる。弦の場合は、「端で弦は動かない（固定端）」の境界条件を設定する。そして、これらを連立して、「固有値方程式」を得る。あとは数学的な手続に従って、固有値と固有モードを計算する。弦の場合固有値は、各振動モードの振動数（エネルギー）に対応し、固有モードは、弦の（空間的な）振動の仕方に対応する。多くの系は、複数の固有モードがあり、エネルギー（振動数）の低い順に名前（モード次数、mode index）をつける。弦の場合は「腹」や「節」の数を使って、次数を付けることができる。（図では腹の数を次数として用いた）



ナノフォトニクスのような電磁場の問題についても、流れを追っておこう。ナノフォトニック構造の電磁固有モードを計算するにはまず、マスター方程式として、マクスウェル方程式を用いる。そして、境界条件は、屈折率（誘電率・透磁率など）の空間的な分布を設定する。（より一般には、時間的な分布もあり得るが、ほとんど場合時間的に不変な構造を扱う）これらから、固有値方程式を得て、固有モードを計算する。フォトニック結晶のような周期的な構造の場合は、計算される固有モードを波数ごとにグループ分けできるので、波数ごとに固有値と固有モードを計算することが多い。そのようにして各波数で計算した固有値（周波数）を、横軸波数、縦軸周波数でプロットしたものが、バンド図となる。

スラブ導波路の電磁固有モード

一般に、ある系の固有モードが解析的に解けることはほとんどなく、数値計算によって求めることがほとんどである。一方で、解析的に解ける問題を例題として体感することは、複雑な系に対する理解を助ける。ここでは、単純なスラブ型導波路における固有モードについて見ておこう。



ここでは、図のような三層構造の中心部分（コア）を全反射によって光が進んでいくモードについて考える。これは光ファイバの原理そのものである。我々は、マスター方程式であるマクスウェル方程式から、コア内の電磁波が分散関係

$$\omega = ck/n_1$$

を満たすことを知っている。進行方向の波数β（伝搬定数）とスラブ厚さ方向の波数はそれぞれ

$$\beta = k\cos\theta = n_1 k_0 \cos\theta$$

$$\alpha = k\sin\theta = n_1 k_0 \sin\theta = \sqrt{k^2-\beta^2} = \sqrt{(n_1 k_0)^2-\beta^2} = \sqrt{\left(n_1\frac{\omega}{c}\right)^2-\beta^2}$$

と書ける。固有モードとは特定の周波数で同じ電磁場分布で振動するモードであるから、定在波になる条件を探すことになる。今x方向には伝搬し、y方向には閉じ込められているので、y方向の定在波条件を求めればいい。すると、厚さ方向の位相変化は以下の定在波条件を満たさなければならない。

$$\Delta\phi = 2d\alpha + 2\phi = 2dn_1 k_0 \sin\theta + 2\phi = 2m\pi$$

ここで、位相ϕは光反射するときに得る位相でありフレネルの式から解析的に求められる値である。また、mはモードの次数（コア内の定在波の腹の数）をあらわす。これを変形すると

$$\omega = \frac{c}{n_1}\sqrt{\beta^2+\left(\frac{m\pi-\phi}{d}\right)^2}$$

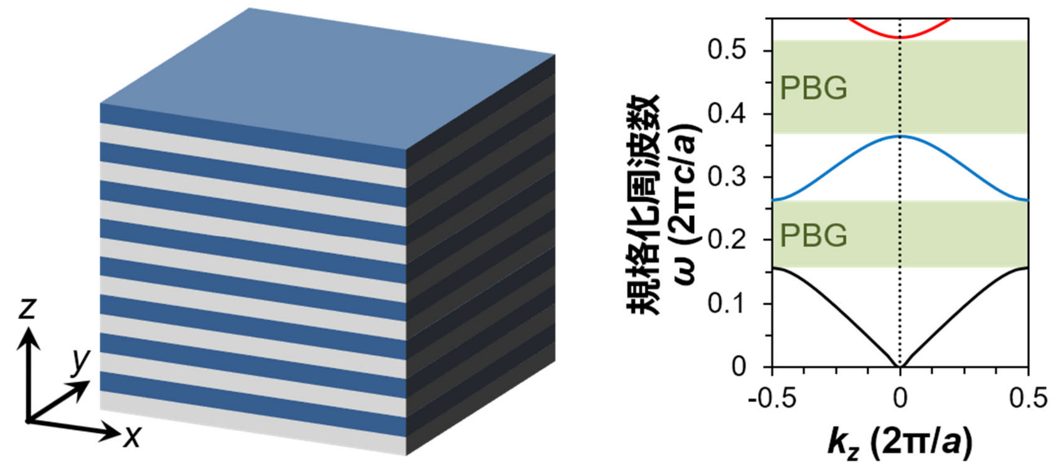
となって、周波数と進行方向の波数（伝搬定数）との関係、つまり導波モードの分散関係が求められた。ここで、位相ϕはフレネルの式からわかるように、偏光によって 2 種類の異なる値をとる。したがってこの導波モードは TE と TM の 2 種類に分類することができ、それぞれ異なる分散関係を示す。スラブ導波モードは全反射現象に由来するため、第 3 章でみた分散関係において、「全反射する領域（n_1でしか光が伝搬できない領域）」内のモードのみが、導波路モードになる。また導波路モード全般の特徴として、自由空間の分散関係と異なり、（mが有限の場合に）βがゼロのときにωがゼロにならならい。つまり、これよりも低い周波数では「モードが存在しない」ため、これ以下の周波数の光を導波させることはできない。このような現象をカットオフと呼び、その周波数をカットオフ周波数と呼ぶ。

ここまで光線光学的な取り扱いでモードを求めたが、波動的な取り扱いを用いても同じ結果が導かれる。今考えているモードは全反射によってn_1中のみを x 方向に伝搬し、n_2では y 方向に減衰する波（近接場・エバネッセント場）として存在している。それらの波が、屈折率境界における境界条件（マクスウェル方程式から得られる自然な境界条件）をみたしていることを

用いると、全く同じ分散関係が得られる。これは量子力学の序盤に出てくる井戸型ポテンシャルの問題と全く同じである。このように、スラブ導波路の問題は電磁気と量子力学がよく似ているわかりやすい例である。

1 **次元** PhC**・誘電体多層膜**

誘電体多層膜は、図のように異なる誘電体を交互に積層した構造であり、フォトニック結晶が生まれる以前から研究されフィルタやミラーなどの光学素子として現在も広く用いられている。PhCのアイデアが生まれる以前から存在していたものであるが、PhCの観点で見れば、誘電体多層膜はもっとも単純な「1 次元」PhC である。論文などでも、1D PhC と書かれている場合もあれば、Dielectric multilayer 等と表記されこともあり、その研究のコンテクストによって呼び名が変わっていることがあるので注意したい。(1 次元のグレーティング構造も 1 次元 PhC と呼ばれることがある）この 1 次元 PhC（誘電体多層膜）は、フォトニック結晶等の研究でよく出てくるフォトニックバンドの物理を理解するのに役立つので、ここで見ておこう 1D PhC（多層膜）の物理は、薄膜干渉で学んだように各層の境界で起こる多重反射によって理解される。PhC における様々な物理現象の根源は、多重反射（と干渉）によるものである。（これは、2 次元 PhC、3 次元 PhC の場合も、基本的には変わらない）



誘電体多層膜のフォトニックバンド

ここではまず、積層方向（多層膜の周期方向、ここでは z 方向）に進行する電磁波のモードを考える。PhC のアイデアは、結晶中の電子に対する光のアナロジーを考えることであった。

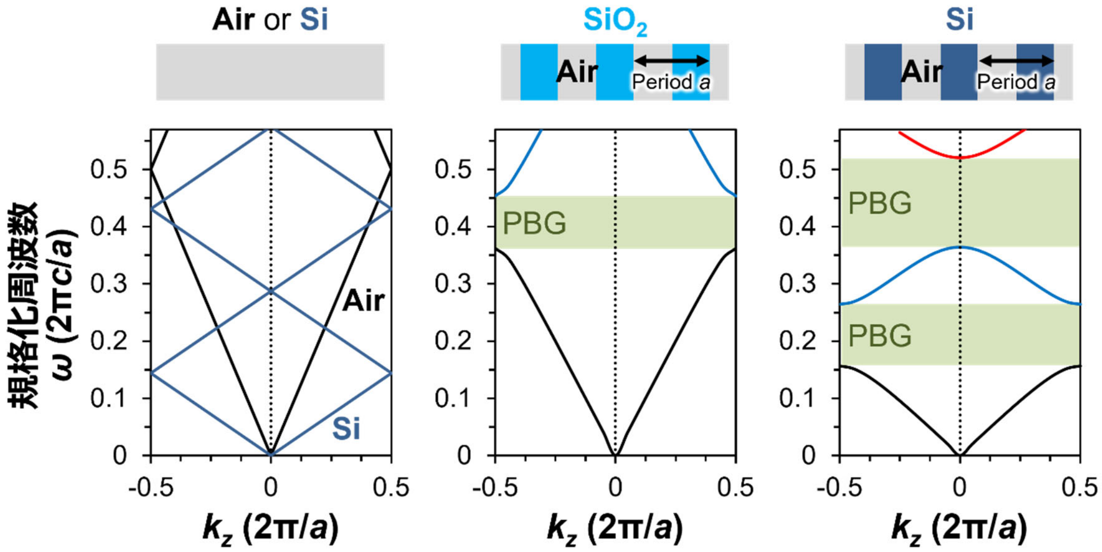
つまり、結晶（周期的に並んだ原子）が作る周期的なポテンシャル中を運動する電子と、フォトニック結晶による周期的な屈折率（誘電率）分布中を運動する光（フォトン）を対応付けて理解することである。そこで、固体物理のアイデアであるバンド図の概念を光に対して適用したフォトニックバンド（分散関係）を考える。

図の右側は、（やや非現実的ではあるが）空気(n=1)とシリコン(n=3.48)の多層膜に対して計算したフォトニックバンド図である。空間的に周期的なポテンシャル中の現象は、空間の振動数である波数によって特徴づけられるため、横軸を波数にとり、各波数においてどのようなエネルギー（周波数）の光が許されるのかを表している。ここで、縦軸の周波数も 2πc/a で規格化してよいのは、屈折率に周波数分散がない（一定値）の場合は、バンドの形は PhC の周期 a に依存せず同じ形になるためである。固体物理のバンド理論によれば、第 1 ブリルアンゾーン（BZ）内のバンドを見るだけで、その系が持っている情報を全て含んでいる。そこで、バンド図は第 1BZ 内のみを書くのが通例となっている。第 1BZ は、逆格子ベクトルを用いて定義されるので、フォトニック結晶においても周期の逆数を用いて波数が規格化される。

多層膜のバンドについて見ていこう。下から、黒、青、赤でバンドを描いているが、これは通常下から、第一、第二、第三バンド、などと呼ばれる。さらに注目したいのは、どの波数においてもモードが存在しない周波数、すなわちバンドギャップ（禁制帯）が存在していることである。これは、光版のバンドギャップなので、フォトニックバンドギャップ（PBG: photonic band gap）と呼ばれる。このような、絶縁体のバンドのような構造をもつため、フォトニック結晶は光の絶縁体と呼ばれることもある。光の絶縁体とは、つまり、その周波数帯の光は、PhC 内に存在できない（外から進入できない）ことを意味しており、これが PhC の特徴である。

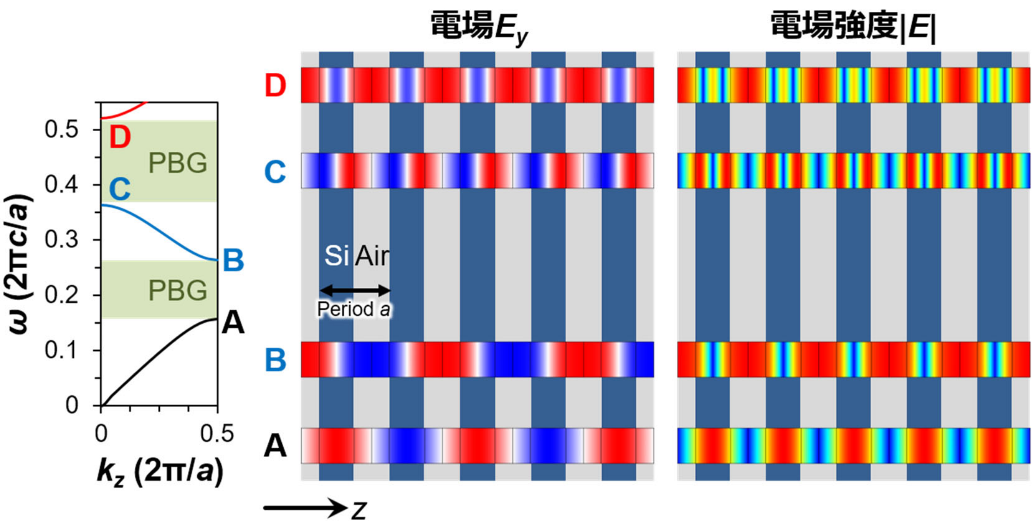
ここで、物理的な話に入る前に、バンド図いくつか見て見慣れておこう。ここでは 3 種類のバンド図を描いた。左は、空気 or シリコン中の分散関係をバンド図上に描いたものである。つまり、分散関係$\omega=ck/n$ を描いたものだ。これは厳密に言えば、バンド図とは言えない。なぜかというと、これはあくまで「均一な」媒質中の分散関係を描いているのであって、BZ 端における折り返しは、仮想的なものだからだ。ただ、PhC の場合と比較して、PBG がない、と言う点が分かりやすく描かれている。このように周期構造がない場合には、PBG はない。中央は石英（SiO_2）と空気の多層膜、右はシリコンと空気の多層膜のバンド図である。どちらも PBG があることがわかるが、PBG の（周波数方向の）大きさに違いがある。（ここで PBG

の大きさは、周波数範囲÷中心周波数で規格化して比較するべきものである）一般に、屈折率のコントラスト（差）が大きい方が、大きな PBG を形成できる。実は PBG が大きいほど、さまざまな応用に有利なため、このような特性は重要な意味をもつ。

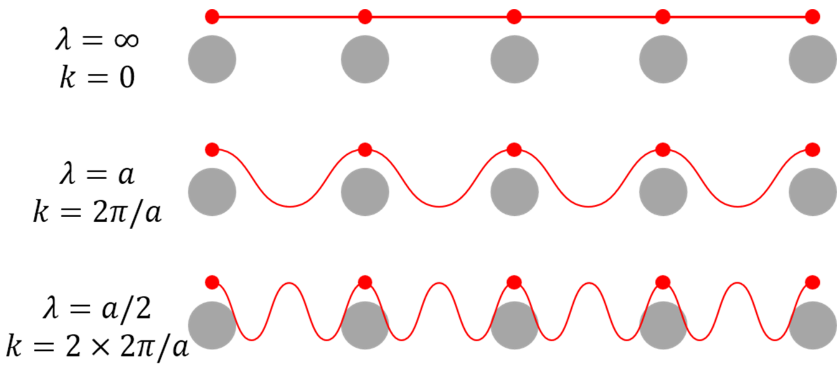


ここまでバンド（固有値、固有周波数）をみてきたが、電磁場（固有モード）の方も見ていこう。特に PBG になるところ（バンド端）でどのようなモードが形成され、それがどう PBG の形成につながるのかを理解しておくことは重要である。ここでは、空気／シリコンの多層膜を再度考える。図は、バンド端（band edge）A～D における、電場（x、または y 方向の電場）と電場強度（電場の絶対値）を、実空間上にプロットしたものである。まず、A と B の電場をみると、山（赤いところ）と谷（青いところ）が、周期ひとつ分ごとにくりかえしている。これは二つのモードが同じ波長、つまり波数をもっていることと整合する。また、波長が 2a なので、波数になおすと 2π/2a=π/a となり、確かにブリルアンゾーン端の波数と一致している。A と B の重要な違いは、山（谷）の位置である。A ではシリコン層で、B では空気層で振幅が大きくなっている。一般に、屈折率の高い部分に電磁場あると、そのモードの固有周波数は下がる。そのことを踏まえると、同じ波数であるにもかかわらず A と B で固有周波数が異なることが理解できる。また、電場強度を見ると、電場振幅をそのまま 2 乗した分布となっている。これは、A B のモードが定在波であることを意味している。定在波は、反対方向に向かうふたつの波が重なった結果、進行せずにその場で振動する波のことである。ブリルアン端では、層界面で反射されることで生じた±z 方向に進行する波がちょうど重なることで、このよ

うな定在波が形成される。このような定在波が、界面による反射と干渉で形成されることを考慮すると、実はブリルアン端の波数（波長）をもつ定在波はＡとＢの２種類しか許されない。（中途半端な位置で大きな振幅をもつ定在波はありえない。もし存在すれば、ＡとＢの間の周波数にモードが存在することになる）これが、フォトニックバンドギャップが生じる物理的な起源である。



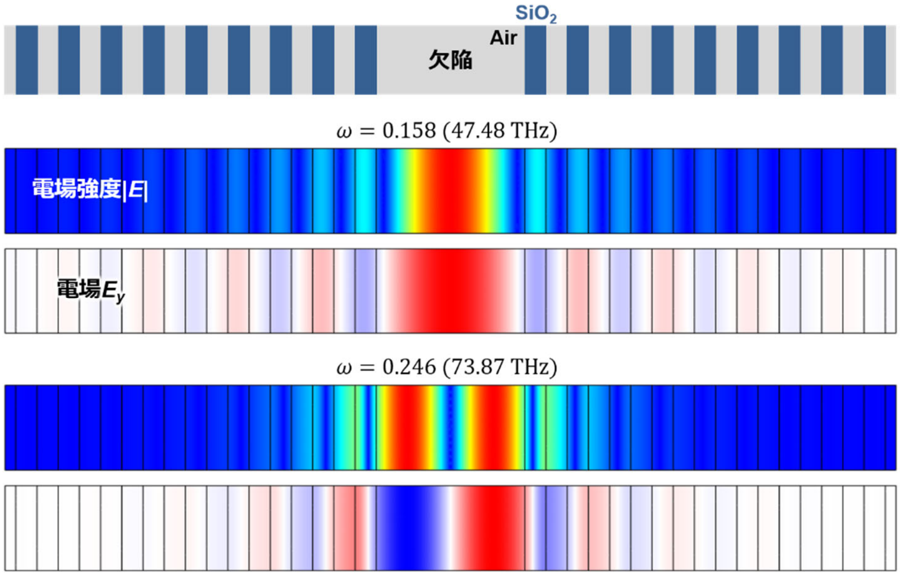
ついでに、第２バンドと第３バンドの間のＰＢＧとバンド端のモードＣ、Ｄについても見ておこう。C,D からなる PBG は下から数えて、２番目なので第 2BG と呼ばれる。Ｃ、Ｄでは、周期一つ分に振幅の大きい腹がふたつある。つまり、波長はＡ、Ｂの半分であり、波数は 2п/a となるはずであるが、波数が０のところにプロットされている。これは、まさに結晶であることによる効果で、周期 a の結晶では波数０と 2п/a（の整数倍）は「同じ」なのである。図では、格子点位置の赤い点を見ると、これらの波数では全く同じであることがわかる。そのため、原子からするとこれらのモードの波数は区別できない。



PhC に PBG 中の周波数の光を入射すると、PhC 中に光は進入できず全て反射され、PhC の中ではエバネッセント波として減衰する光になる（全反射の時と同じ状況）。一般に PBG の中心付近の周波数ほど、より強く（短い距離で）減衰する。これは、PBG 中では波数が純虚数になっており、PBG 中心ほど（絶対値の）大きな純虚数になっていることによる。PhC はバンドギャップ中の光に対しては高反射のミラーとして働くので、PhC で囲まれた領域は共振器になる。この時、BG の大きな PhC を使うほど、光が短い距離で減衰するので、よりモード体積の小さい（閉じ込めの強い）共振器を実現できる。共振器以外の応用についても、一般に大きな PBG の方が有利な場合が多い。ここで、「大きい」というのは、あくまで比較の問題であって、使用する実験条件や応用先によって必要な BG の幅は変わる。PBG の起源を理解すると、大きな BG を得るためには、バンドエッジの上下のモードの周波数差（エネルギー差）を大きくすればいい。具体的には、屈折率のコントラストを大きくしたり、各層の幅の比を調節したりすることで実現される。

欠陥における局在モード

ここまでの理解を基に、多層膜の PBG を利用した局在（欠陥）モードについて見ておこう。局在モードは、これまで考えてきた周期的な多層膜の一部に「欠陥」を導入することで実現される。例えば、途中の一層のみの厚さや屈折率を変えれば、その部分だけ周期性が乱され、「欠陥」を作ることができる。PBG 中の周波数をもつ光にとっては、完全に周期的な部分は、完全なミラーとして働くため、光は欠陥部に閉じ込められる。これはちょうど、量子力学で学ぶ、井戸型ポテンシャル中の波動と同じ状況である。（つまり 3 層スラブ導波路と基本的に同じである）そのため、光の状態は量子化し、取り得るエネルギーは離散化される。図は、21 周期の多層膜において、中央の三つのシリコン層をなくした構造である。図のように、この系では欠陥に局在したモードが確認でき、その固有周波数は確かに、PBG 中の周波数になっていることがわかる。ここでは、図の上下方向に進行しない波（膜方向の波数がゼロ）を示しているが、有限の波数をもつ場合は、欠陥層を導波する局在モードになる。ちなみに、そのような導波モードは、後に紹介する 2 次元 PhC の線欠陥導波路等で利用される。



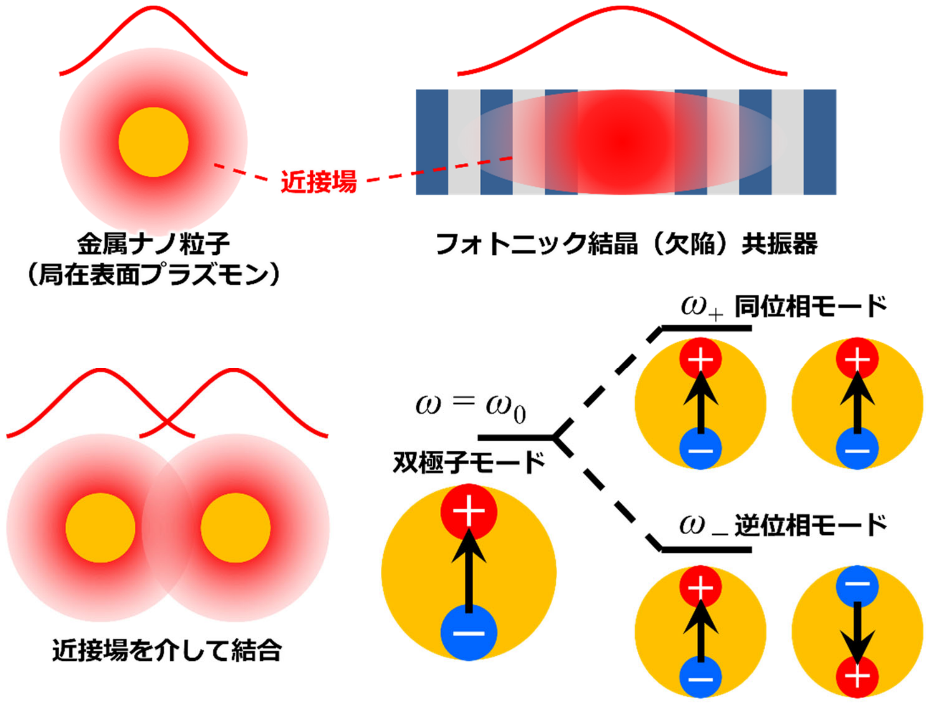
近接場による結合

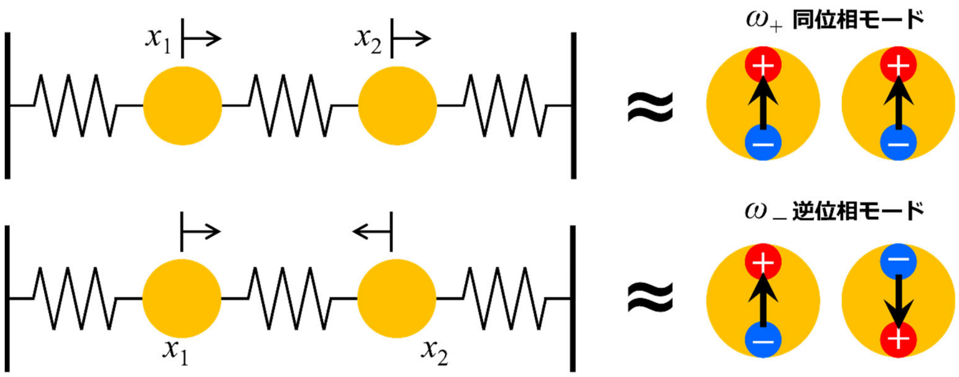
ここまでに何度か登場してきた近接場についてここで触れておきたい。なぜなら、ナノフォトニクスにおいて近接場は非常に重要な役割を果たすからである。まず近接場がどのような状況で発生するのかを考える。これまで、全反射の時に近接場が生じることを述べてきた。つまり波数の保存則により、波数が虚数になり、伝搬解ではなく減衰解（局在する解）が表れる場合である。それ以外でも様々な場面で近接場が生じる。例えば、金属ナノ粒子における局在モードでは、放射場（伝搬成分）のほかに、ナノ粒子周辺に近接場（局在成分）が生じる。またフォトニック結晶などで形成された光共振器の周辺にも、共振器から漏れ出した近接場が生じる。このように光が局在しているモードではその周辺に近接場が生じる。

重要なのは、これらの近接場同士が重なると、モード間の結合が生じる。その結合の強さは、近接場同士（電磁場分布同士の）重なりの大きさ（畳み込み積分）によって決まる。これは量子力学のタイトバインディングモデルなどで、ホッピング強度（結合）が波動関数の畳み込み積分で書かれることと同じである。例えば二つの金属ナノ粒子のモード間の結合を考える。各金属ナノ粒子の双極子モードを考える。これらは放射場のほかに近接場成分をもっている。この粒子からの近接場の染み出しは指数関数なので、粒子間の距離が離れている場合には、結合はほぼない。粒子が波長程度まで近づいてくると結合の効果が見えてくる。結合の強さは距離

に対して指数関数的に増加するので、粒子が近づくと急激に強くなる。ふたつの双極子モード間に結合が生じると、いわゆるモード混成が起こる。その結果、同位相モードと逆位相モードが形成される。これは、二つのバネ振動子の結合とまったく同様に理解できる。

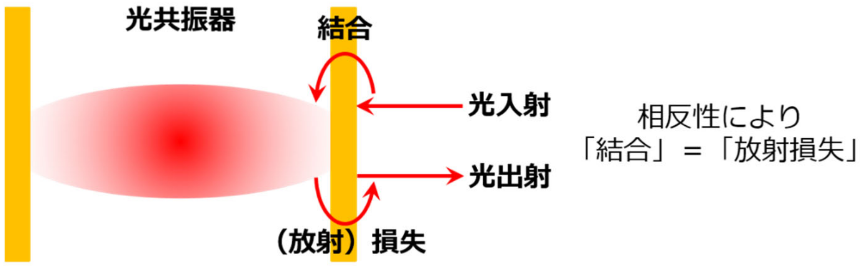
ここでは共振器について述べているが、局在モード（導波モードも含む）は一般に近接場をもっている。（このような状況を近接場が染み出している、と表現する）局在モードであればなんでもよく、フォトニック結晶共振器同士の結合や導波路モード同士の結合など様々な場面でこのような結合モードがあらわれる。3 個以上のたくさんの共振器（共振モード）間の結合や、異種のモード同士の結合（例えば導波路モードから染み出した近接場と共振器の近接場の重なりによる結合など）も起こる。近接場によるモード間の結合の制御は、様々な光応答を実現する上で中心的な役割を果たす。ここでは近接場による結合について述べたが、遠方場（伝搬波）による結合も当然あり得る。遠方場を介した結合では、近接場と異なり位相を考慮に入れる必要があり、一般に近接場ほど距離に敏感ではない。





モードの結合・損失・励起

ここまで固有モードや局在モード、共振器について考えてきたが、これらを利用するためには、光をこれらのモード（共振器）に「注入」しなければならない。まず、ファブリ・ペロー共振器を用いて考えてみよう。もしも両方のミラーの反射率が 100%なら、光を永遠に閉じこめられる完璧な光共振器になるが、反射率 100%のミラーは透過率が 0%なため、光を中に注入できず、せっかくの共振器を利用できない。この共振器に光を注入するためには、少なくとも片方のミラーの反射率が 100%を下回っていないとならない。ここで、「注入」というのをもう少し物理的な言葉にしておこう。共振器内に光が入るということは、自由空間のモード（普通の伝搬光）が、共振器内のモードに「結合」することによって生じる。したがって、これから光（のエネルギー）が他のモードに移ることを「結合する」という。さて、片方のミラーの反射率を下げたおかげで（部分反射鏡）光を結合させることができた。一方で、共振器内部の光が、外に出ていくことも可能になっていることがわかるだろう。この時、共振器の立場からすると「光を失う」ので、これを「損失」と呼ぶ。特に、図のように（熱などではなく）伝搬光としてエネルギーが失われる場合、「放射損失」と呼ぶ。つまり結合と（放射）損失はセットになっている。これは物理的には相反性に由来するものだが、難しいことを考えなくても、逆過程が成り立たなければならないという当たり前の事実である。



「励起」とは、入射光を特定のモードに結合させることである。フォトニック結晶や金属ナノ粒子などに光を当て、その（局在）モードを励起する。これは、ぴんと張った弦を指ではじくことと全く同じである。ファブリ・ペロー共振器の例でみたように、モードが励起可能ということは、すなわち放射損失が有限であることを意味する。つまり、「励起が可能かどうか」と「放射損失をもつか」は同じことを指した表現であり、主体が観測者か共振器か、という違いである。一般にモードを励起するときは、モードの共鳴周波数と同じ周波数（波長）の光を当てればよい。この「励起」を用いて我々はスペクトルから、モードの存在を確かめるのである。

構造の対称性の名前

ここでは、ナノフォトニック構造でよく議論される構造の対称性について触れておく。結晶や化学の分野で、構造の対称性の分類をするために点群が用いられることがある。ナノフォトニクスでも、対象とする構造の対称性と光学応答が密接に関連しているため、点群に倣った呼び方で対称性が議論されることがある。回転対称とは、ある構造を 1/n 回回した時に元の構造と重なるかという対称性で、点群では C_n と表す。図は、4 回回転や 2 回回転などの対称性を持つ構造の例である。ここで、黒破線で示した紙面垂直な面に対して鏡映対称性を持つ場合、さらに「v」を付けて、C_{4v} などと呼ぶ。ちなみに v は vertical のことで、垂直方向に鏡映面を持つという意味である。C_4 を例に挙げると、正方形は C_4 かつ鏡映面をもつので C_{4v} の対称性を持つが、下の卍のような形は鏡映面を持たないので C_4 の対称性をもつ。フォトニック結晶のような周期構造の場合は、構造そのものだけでなく周期性の対称性も加味しなければならない。たとえば、正方格子丸穴は C4v だが、正方格子三角穴になると、回転対称性を失ってしまう。また三角格子も穴の形状によって異なる回転対称性をもつことになる。ここまで実空間の対称性の話をしていたが、実は同じ名前の付け方が、波数空間（逆光子空間）のブリルアンゾーンについても言える。例えば、三角格子の K 点と呼ばれる点は、3 回の回転対称性を持っ

ている。このように対称性の高いは対称点と呼ばれ、伝統的な名前が付けられている（第６章参照）