

遺伝的アルゴリズムによる積層構造の乱れた磁気光学多層膜の設計

Genetic-Algorithm-Based Design of Magneto-Optical Films with Disordered Multilayer Structures

井上光輝・荒井賢一・藤井壽崇*・阿部正紀**

東北大学電気通信研究所, 宮城県仙台市青葉区片平 2-1-1 (☎980-8577)

*豊橋技術科学大学電気・電子工学系, 愛知県豊橋市天伯町雲雀ヶ丘 1-1 (☎441-8580)

**東京工業大学工学部電子物理工学科, 東京都目黒区大岡山 2-12-1 (☎152-8522)

M. Inoue, K. I. Arai, T. Fujii,* and M. Abe**

Research Institute of Electrical Communication, Tohoku University,

2-1-1 Katahira, Aoba-ku, Sendai 980-8577

*Dept. of Electrical & Electronic Engng., Toyohashi University of Technology,

1-1 Hibari-Ga-Oka, Tempaku, Toyohashi 441-8580

**Dept. of Physical Electronics, Tokyo Institute of Technology, 2-12-1 O-okayama, Meguro-ku, Tokyo 152-8522

A novel technique for designing magneto-optical films is presented: the algorithm, which automatically determines the multilayer structures of films with designated optical and magneto-optical properties, is regarded as an extension of the genetic algorithm. The film properties are designated by a simple fitness function $f(x)$, and the film structure that maximizes $f(x)$ is chosen as the optimum one. The present technique has been used to determine two kinds of film structure: one exhibits the largest Faraday rotation θ_F and the other exhibits high transmissivity T and large θ_F simultaneously. These films were obtained after the evolution of about 2000 generations: in one, $T=29\%$ but $\theta_F=-28 \text{ deg}/\mu\text{m}$ at $\lambda=1.15 \mu\text{m}$, while in the other, $T=70\%$ and $\theta_F=-16 \text{ deg}/\mu\text{m}$ at the same wavelength of light.

Key words: magneto-optical Faraday effect, disordered multilayer film, localization of light, enhancement of the Faraday rotation angle, genetic algorithm

1. はじめに

我々は、ビスマス置換イットリウム鉄ガーネット (Bi:YIG) 膜と SiO_2 膜からなる積層構造の乱れた多層膜の特性を理論的に調べ、積層構造の乱れに起因する光の弱い局在現象¹⁾によって、多層膜の磁気光学効果が増大することを示した^{2,3)}。最大のエンハンスメントは、強い光局在が発現する1次元フォトリック・クリスタル⁴⁾ (あるいは光マイクロキャビティ⁵⁾) で生じ、その増大率は160倍以上に達する^{6,7)}。この多層膜は、ファブリーペロ共鳴の条件から、各々の積層膜の厚さを光波長の1/4を基準として選べばよいので、設計指針は明確である。しかし、このようにして設計した多層膜は、大きなファラデー回転角 (θ_F) を示すものの、透過率 (T) が極端に低下し、透過光の利用は困難となる。このため、上述のファブリーペロ共鳴条件に合致する構造をもつ多層膜では、 θ_F と T が共に大きなものや、最小の積層数で大きな θ_F を示す多層膜は得にくい。特に、広い波長範囲にわたって多層膜の波長スペクトルを設計しようとする、Bi:YIG や SiO_2 とは異なる特性をもつ第3、第4の薄膜材料が必要となるが、この場合には材料の選択を含めて多層膜の設計は非常に煩雑なものとなる。

本研究は、非常に多くの対象の中からグローバルな最適値探索が可能な遺伝的アルゴリズム⁸⁾ (以下 GA と略記する) に着目し、この手法によりさまざまな要求を満たす磁気光学多層膜を得ようとするものである。本報では、光局在による磁気光学効果の増大が位相干渉を伴う光の多重散乱 (反射) に起因することを利用して GA を拡張し、多層膜構造探索を行った結果について述べる。またこの手法により膜構造を決定することで、大きな θ_F と T が共存する多層膜など、ファブリーペロ共鳴条件に従って設計した多層膜では得られないユニークな特性を示す多層膜が得られることを示す。

2. 多層膜の磁気光学効果の解析

任意の積層構造をもつ多層膜の磁気光学効果は、マトリックス・アプローチ法^{2),3)} を用いることで容易に解析できる。この手法の詳細はすでに報告しているので、ここでは GA を膜構造探索に用いる場合に重要となる膜構造の表現方法と、膜の特性を決定する光状態遷移マトリックス Φ について簡単に述べる。

Fig. 1 に示すように、厚さ d_M 、層数 n_M の Bi:YIG 層と厚さ d_S 、層数 n_S の SiO_2 層で構成した厚さ D 、全積層数 $n (=n_M+n_S)$ の多層薄膜を考える。一つの Bi:YIG 層および SiO_2 層をそれぞれ記号“1”と“0”で対応させると、Bi:YIG 層と SiO_2 層の並びは n 桁の2進数 b^n (2進構造因子) で表現できる (例えば $b^n=11010110\cdots1011$)。多様な膜構造が表現できるように、磁性体層数 n_M と SiO_2 層数 n_S を十分大きく選ぶ。この

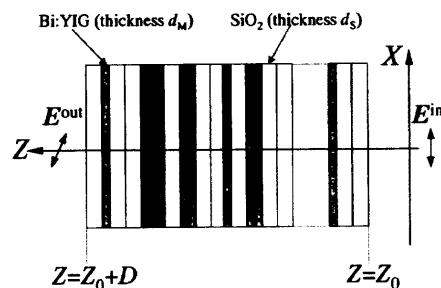


Fig. 1 Model used in the analysis: the cross-sectional view of the film.

とき、厚さ D の膜構造は、 b^* と磁性体密度 $\sigma = n_M d_M / D$ により決定されるので、 (D, σ, b^*) を一つの多層膜固有の因子、すなわち遺伝子に見立てることができる。

積層構造の決まった一つの多層膜の特性は、磁気光学効果を考慮したマクスウェル方程式を、膜中に存在する多数の不連続面での電磁境界条件を満たすように解くことで決定できる。この解析は、構造の定まった多層膜ではさほどむずかしくないが、積層数や積層順序、さらには構成材料さえも任意に選ばれる多層膜の場合には煩雑なものとなる。このような場合に、さまざまな多層膜を一般的に取り扱うことのできるマトリックス・アプローチ法^{2,3}は、非常に有効な手段といえる。この方法では、多層膜中の一つの積層膜を通過する光の状態変化を多重反射の寄与も含めて一つの状態マトリックスで表現する。すなわち、磁性層の状態マトリックスを Φ_M 、 SiO_2 層の状態マトリックスを Φ_S とすると、Fig. 1 に示す厚さ D の多層膜を通過する光の状態変化は、次式で記述できる。

$$\tau(Z_0 + D) = \Phi_M \cdot \Phi_S \cdot \Phi_M \cdots \Phi_M \cdot \tau(Z_0) \equiv \Phi \cdot \tau(Z_0) \quad (1)$$

上式の $\tau(Z) = (E_X, E_Y, H_X, H_Y)$ は光の状態ベクトルであり、膜面に平行な電磁界ベクトルを要素とする。(1)式で、状態マトリックス Φ_M と Φ_S を掛け合わせる順序は2進構造因子 b^* に対応しているので、構造の異なるどのような多層膜も最終的には一つのマトリックス Φ で記述できることになる。結局、出射光の状態 $\tau(Z_0 + D)$ は、入射光の状態 $\tau(Z_0)$ に Φ を作用させたもので与えられるので、(1)式の関係から任意の構造をもつ多層膜のファラデー回転角や透過率などの特性が決定できる。

3. 遺伝子アルゴリズムによる膜構造の決定

前節で述べた多層膜の構造を決定する遺伝因子を用いて、一つの多層膜 x_j ($j=1, 2, \dots, N$) を $x_j = (D_j, \sigma_j, b_j^*)$ で定義する（全積層数 n も任意である）。この N 個の多層膜を要素とする集合を $P_i = (x_1, x_2, \dots, x_N)_i$ とし、これを第 i 世代のポピュレーションとする。このとき、目的とする多層膜は、フィットネスと呼ばれる関数 $f(P_k)$ を最大にする P_k の要素として与えられる。フィットネス f は、要求する膜特性により任意に選ぶことができるので、例えば透過率 T とファラデー回転角 θ_F の両者とも大きな多層膜を探索する場合には、 $f = T \times \theta_F$ のように記述できる。

Fig. 2 に、GA による多層膜構造決定の手順を示す。この探索手順は、単純 GA⁸⁾ の基本操作であるセクション、クロスオーバー、ミューテーションに、次の操作を導入して多層膜構造探索の場合に拡張したものである：①任意可変長の遺伝子の導入、②遺伝情報に連続量の磁性体密度の追加、③クロスオーバーで異長遺伝子の結合の追加、④ミューテーションでウイルス性の変異（遺伝情報の全反転、遺伝子の切断と結合、遺伝子長の変化）の導入。またこれらの拡張に伴い、単純 GA にはないマッチングフェイズという操作を追加した。

3.1 セクションフェイズ

第 i 世代のポピュレーション $P_i = (x_1, x_2, \dots, x_N)_i$ の各々の多層膜 x_j についてフィットネス f_j を求め、 P_i の最大のフィットネス f_{\max} を $f_{\max} = \max(f_1, f_2, f_3, \dots, f_N)$ で定義する。また各々の多層膜の選択確率を $p_j = f_j / \sum f_m$ ($m=1 \sim N$) で定義する。こ

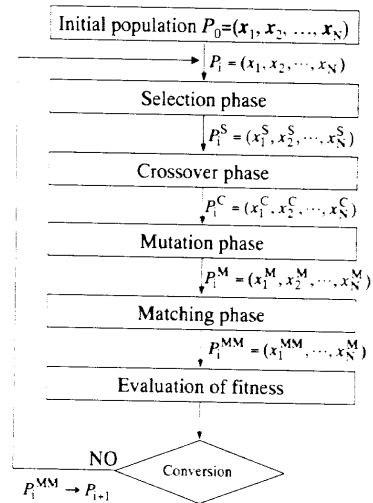


Fig. 2 Procedure for determining the film structure with the genetic algorithm.

のとき、最大のフィットネスをもつ多層膜を x_1^S として保存し、残り $N-1$ 個の多層膜 x_k^S ($k=2, \dots, N$) を P_i から選択確率 p_j により新たに選んだ。この手続きによって、セクション後の第 i 世代ポピュレーションとして、 $P_i^S = (x_1^S, x_2^S, \dots, x_N^S)_i$ が決定される。

3.2 クロスオーバーフェイズ

ポピュレーション $P_i^S = (x_1^S, x_2^S, \dots, x_N^S)_i$ について、隣合う二つの多層膜 x_j^S と x_{j+1}^S の2進構造因子 b_j^* と b_{j+1}^* 間で、互いのビット列の並びを適当な位置で切断し、入れ替えを行う（クロスオーバー）。この入れ替えは、Fig. 2 に示す手順で行った。まず整数乱数 C_j ($1 \leq C_j < \min(m, k)$) により b_j^* の切断点 C_j を決定した後、新たな乱数 r によって入れ替えを行うか否かの判定を行った。Table 1 に示すように、 $r < 0.9$ の場合にのみ入れ替えを行うこととし、 $0.01 \leq r < 0.9$ では b_{j+1}^* の切断位置 C_{j+1} を $C_j = C_{j+1}$ 、 $r < 0.01$ では別の整数の整数乱数 C を用いて $C_{j+1} = C_j + C$ ($1 \leq C \leq \max(k, 5)$) の関係で C_{j+1} を決定した。入れ替え位置をこのように細かに設定したのは、膜の積層状態を多様に変化させるためである。

このクロスオーバーによって積層状態が変化し、結果として多層膜 x_j^S と x_{j+1}^S の積層数と膜厚が変化するので、それぞれの

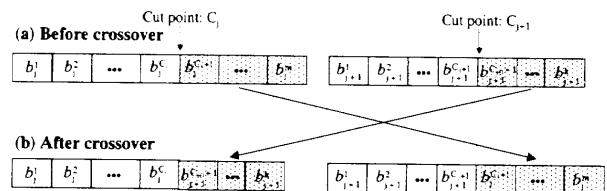


Fig. 3 Cross-over of the binary structure parameters.

Table 1 Definition of crossover point

Value of r	$r < 0.01$	$0.01 \leq r < 0.9$	$r \geq 0.9$
Crossover	Yes		
	$C_{j+1} = C_j + C$ $1 \leq C \leq \min(5, k)$	$C_{j+1} = C_j$	No

Table 2 Mutation operation

Value of R	D'_j, b'_j, m , and m	Each bit in b'_j
$R > 0.01$	No	No
$0.005 \leq R \leq 0.01$	No	Yes when $R' \leq 0.01$
$0.002 \leq R < 0.005$	Change of film thickness D'_j	$0.002 \leq R' \leq 0.001$: Change of material
$0.001 \leq R < 0.002$	Inversion of bit sequence in b'_j	$R' < 0.002$: Generation of cluster
$R < 0.001$	Change of number of layers m	

多層膜を $x_j^c = (D'_j, \sigma'_j, b'_j)$, $x_{j+1}^c = (D'_{j+1}, \sigma'_{j+1}, b'_{j+1})$ として、積層数は $m' = m_1 + k_2$, $k' = k_1 + m_2$ で定義した。また各々の膜厚は、(2) 式の関係で定義した。

$$\begin{aligned} D'_j &= d_{M_j} n_{M_{m_1}} + d_{S_j} (m_1 - n_{M_{m_1}}) + d_{M_{j+1}} n_{M_{k_2}} + d_{S_{j+1}} (k_2 - n_{M_{k_2}}) \\ D'_{j+1} &= d_{M_{j-1}} n_{M_{k_1}} + d_{S_{j-1}} (k_1 - n_{M_{k_1}}) + d_{M_j} n_{M_{m_2}} + d_{S_j} (m_2 - n_{M_{m_2}}) \end{aligned} \quad (2)$$

上式の $d_{M_j}(d_{S_j})$ および $d_{M_{j+1}}(d_{S_{j+1}})$ は、それぞれ x_j^c と x_{j+1}^c の磁性層 (SiO₂ 層) 1 層の厚さである。また $n_{M_{m_1}}, n_{M_{m_2}}, n_{M_{k_1}}, n_{M_{k_2}}$ は、それぞれ、Fig. 2 に示した 2 進構造因子 m_1, m_2, k_1, k_2 に含まれる磁性層の数である。以上の手順によって、クロスオーバーを施した第 i 世代のポピュレーション $P_i^c = (x_1^c, x_2^c, \dots, x_N^c)$ が得られる。

3.3 ミューテーションフェイズ

ポピュレーション $P_i^c = (x_1^c, x_2^c, \dots, x_N^c)$ に、Table 2 に示すミューテーションを施した。ここでは乱数 $R \leq 0.01$ の場合に、多層膜 $x_j^c = (D'_j, \sigma'_j, b'_j)$ 全体にわたる変化と 2 進構造因子 b'_j の個々ビットに変化が生じる 2 種類のミューテーションが発生するものとした。

多層膜 $x_j^c = (D'_j, \sigma'_j, b'_j)$ 全体にわたる変化には、①膜厚 D'_j の増減 ($0.002 \leq R < 0.005$)、②2 進構造因子 b'_j の反転 ($0.001 \leq R < 0.002$)、③積層数 m' の増減 ($R < 0.001$) を導入した。①、③のミューテーションは、最適な膜厚と積層数をもつ多層膜の出現を促すためである。②は、ファブリーペロ共鳴条件を踏まえて、対象な構造をもつ多層膜の出現を促すためである。

一方、2 進構造因子 b'_j の個々ビットに変化が生じる場合には、別の乱数 R' の値に応じて①一つのビット反転 (材料交換) ($0.002 \leq R' < 0.001$) と②膜中心付近でのクラスター形成 ($R' < 0.002$) を導入した。①のビット反転は、特定構造の多層膜が集中するのを防ぐためであり、②のクラスター形成は光局在化を促すためと膜構造を単純化するためである。

膜厚の増減は、一つの多層膜 $x_j^c = (D'_j, \sigma'_j, b'_j)$ の膜厚 D'_j について、 $D'_j \leftarrow D'_j + q \times 10 \text{ nm}$ の関係で変化させた。ここに q は、整数乱数 ($-10 \leq q \leq 10, q \neq 0$) である。積層数の増減は、整数乱数 $q' (-5 \leq q' \leq 5)$ を用いて、 $m'_j \leftarrow m'_j + q'$ の関係から変化させた。増加した各層の材料は別の整数乱数 q'' の符号に応じて、正ならば磁性層 (したがってそのビットは "1")、負ならば SiO₂ 層 ("0") とした。この場合、積層数の増減に伴って膜厚も $D'_j \leftarrow D'_j + d_{M_j} n_{M_{\text{add}}} + d_{S_j} n_{S_{\text{add}}}$ の変化を受ける。ここに $n_{M_{\text{add}}}$ と $n_{S_{\text{add}}}$ は、それぞれ追加・削減された磁性層と SiO₂ 層の数である。一方、クラスターの形成では、多層膜の中心で整数乱数 $q''' (1 \leq q''' \leq 10)$ の値のビット (層) をすべて "1" (したがって磁性層) に変更した。

以上の手順により、ミューテーションを施された第 i 世代のポピュレーションとして、 $P_i^M = (x_1^M, x_2^M, \dots, x_N^M)$ が得られる。

3.4 マッチングフェイズ

ポピュレーション $P_i^M = (x_1^M, x_2^M, \dots, x_N^M)$ に対して、個々の多層膜 x_j^M のフィットネス f が最大となるように磁性体密度 σ_j を $0.2 \leq \sigma_j \leq 0.8$ の範囲で最適化し、磁性層、SiO₂ 層 1 層当たりの膜厚 d_{M_j} と d_{S_j} を決定した。この操作で、新たな多層膜 x_j^{MM} がそのフィットネスと同時に得られ、 $x_j \leftarrow x_j^{MM}$ とすることで新たな世代のポピュレーション $P_{i+1} = (x_1, x_2, \dots, x_N)_{i+1}$ とそのフィットネスの集合 $F_{i+1} = (f_1, f_2, \dots, f_N)_{i+1}$ が決定される。

以上の操作を繰り返して、最大のフィットネス $f_{\max} = \max(F_{i+1})$ が得られる膜構造を探索した。世代交代に伴って、ポピュレーション中の多層膜 x_j は、互いに等しいかあるいは非常に類似したものがしだいに多くなり、任意に選択したフィットネス (環境) に適合した多層膜 (種) が主体となる。このため、一つのポピュレーションに含まれる多層膜の区別は困難になる。

4. 遺伝的アルゴリズムによる多層膜の探索結果

前述したアルゴリズムを用いて、多層膜の探索を試みた。計算は光波長 $\lambda = 1.15 \mu\text{m}$ に焦点を絞り、文献 5 に記した材料パラメータを用いた。膜特性を指定するフィットネス f は任意に選ぶことができるので、ファブリーペロ構造膜との比較ができるようにファラデー回転角の大きい多層膜 ($f = \theta_F$) と、ファラデー回転角と透過率の両者とも大きな多層膜 ($f = \theta_F \times T$) の探索を行った。

Fig. 4 は、波長 $\lambda = 1.15 \mu\text{m}$ でファラデー回転角 θ_F が最大となる膜構造探索を行った結果で、世代 G_i に対する最大のファラデー回転角 $\theta_{F\max}$ とそのときの透過率 T の変化を示した。同図から、約 1100 世代の進化で、 $\theta_F \approx -28 \text{ deg}/\mu\text{m}$, $T \approx 29\%$ の多層膜が得られることがわかる。この $\theta_{F\max}$ は、ファブリーペロ共鳴条件に従って設計した多層膜と同等で、大きな回転角が比較的高い透過率で得られる。一方、Fig. 5 は $f = \theta_F \times T$ として GA 探索した結果で、Fig. 4 と同様に $\theta_{F\max}$ と T の変化を世代 G_i に対して描いてある。この場合、約 1200 世代の進化で $\theta_F \approx -17 \text{ deg}/\mu\text{m}$, $T \approx 70\%$ の多層膜が得られ、高い透過率で大きなファラデー回転を示す多層膜の設計が可能であることがわかる。この膜特性は、ファブリーペロ共鳴条件

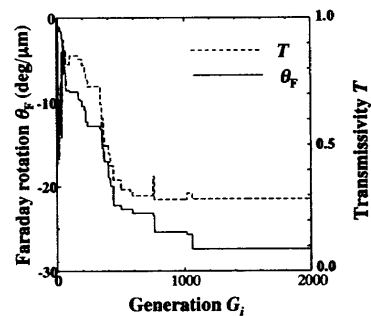


Fig. 4 Changes in θ_F and T of film associated with the evolution of generation G_i , where the fitness function was $f = \theta_F$.

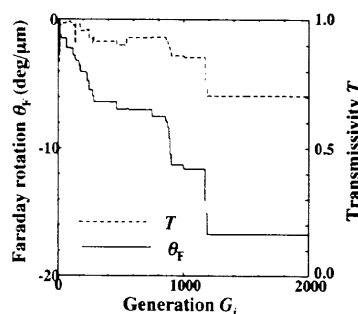


Fig. 5 Changes in θ_F and T of film associated with the evolution of G_i , where the fitness was $f = \theta_F T$.

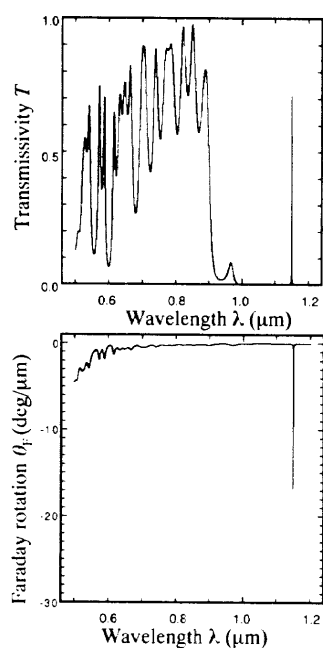


Fig. 6 T and θ_F spectra of the film in Fig. 4 after the evolution of 2000 generations.

に合致していないことを意味しており、このような多層膜が自動的に得られる GA 探索の魅力は大きい。

Fig. 6 ($f = \theta_F$) と Fig. 7 ($f = \theta_F \times T$) は、上述の手順で得た多層膜の波長スペクトルを示す。いずれの図も、Fig. 4, Fig. 5 で 2000 世代の進化をさせた後で得られたものである。 θ_F , T とともに波長 $\lambda = 1.15 \mu\text{m}$ で強い波長選択性を示し、光局在によってユニークな特性が発現したものといえる。

5. ま と め

GA を利用した多層膜の設計を試み、この手法で要求する特性をもつ多層膜が得られることを示した。目的とする多層膜は、膜特性をフィットネス関数でうまく表現することで得られるので、最小の積層数で優れた磁気光学効果を示す多層膜や、広い波長範囲で大きな磁気光学効果を示す多層膜など、パラエティに富んだ膜設計が可能である。またこの手法に、さまざま

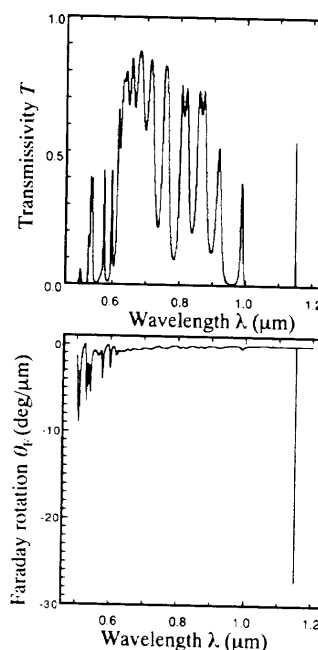


Fig. 7 T and θ_F spectra of the film in Fig. 5 after the evolution of 2000 generations.

な材料の特性をまとめたデータベースを組合せることで、必要とする特性を満たす多層膜を材料選定から行うシステムへの発展も期待できる。

本手法による多層膜の設計は、GA による最適値探索の性格から、複数の乱数を用いた条件判定を必要とする。これら条件判定のスレッシュホールド値は、明確な指針がないために最も収束性が高くなるように試行錯誤的に定めた。今後、このスレッシュホールド値の定め方を含めて、その意味の明確化が重要な課題といえる。

謝 辞 本研究の一部は、文部省科研費（基盤研究 (C), No. 09650356）により行ったものである。

文 献

- 1) 例えば, P.E. Wolf and G. Maret: *Phys. Rev. Lett.*, **55**, 2696 (1985).
- 2) M. Inoue and T. Fujii: *J. Appl. Phys.*, **81**, 5659 (1997).
- 3) 井上光輝, 藤井壽崇: 日本応用磁気学会誌, **21**, 187 (1997).
- 4) T. Hattori, N. Tsurumachi, and H. Nakatsuka: *J. Opt. Soc. Am. B*, **14**, 348 (1997).
- 5) J. Faist, J.-D. Ganiere, Ph. Buffat, S. Sampson, and F.-K. Reinhart: *J. Appl. Phys.*, **66**, 1023 (1989).
- 6) 井上光輝, 藤井壽崇, 荒井賢一, 阿部正紀: 電気学会マグネティクス研究会資料, MAG-97-111 (1997).
- 7) M. Inoue, K. I. Arai, T. Fujii, and M. Abe: *J. Appl. Phys.*, to be published.
- 8) 例えば, 安居院 猛, 長尾智晴著: ジェネティックアルゴリズム (昭晃堂, 1995).

1997 年 10 月 29 日受理, 1998 年 2 月 2 日採録