

# 応用ナノデバイス材料学／光物性・光学材料特論

## 講義ノート

2024年4月9日～5月21日

近藤高志

[tkondo@castle.t.u-tokyo.ac.jp](mailto:tkondo@castle.t.u-tokyo.ac.jp)

## 0 はじめに

### 0.1 講義の目標

レンズやプリズムなどから液晶ディスプレイや光ファイバ、通信用レーザまで、物質の光学的性質を巧みに利用した光デバイスが広範囲で使われている。こうした光機能デバイスに用いられる光学材料の基本的性質について光物性の基礎も含めて講義するとともに、それらの応用にも触れる。マテリアル工学科の学部講義「デバイス材料工学」、「半導体材料学」程度の知識を前提とするが、講義では基礎的な光物性から議論を始める予定なので、これらの科目の履修は必須ではない。

### 0.2 教科書・参考書

この講義では教科書は指定しない。初回の講義で配布するこの講義ノートと毎回配布する追加資料とで必要な範囲をすべてカバーする予定である。講義ノートと配付資料は次回以降も参照する場合があるので、講義時にまとめて参照できるよう準備すること。本講義に関する参考書として、以下のものを挙げておく。

- 「Fundamentals of Photonics, Third Edition」 B.E.A. Saleh, M.C. Teich 著 (Wiley) Part I: Optics と Part II: Photonics あわせて 1,560 ページ, 36,119 円 ([www.amazon.co.jp](http://www.amazon.co.jp))  
光学の基礎から各種光デバイスの実際まで、広い範囲をカバーした大部の教科書。学部上級から大学院初級程度のレベルで、最も標準的な教科書といえる。少々高価だが、本格的に勉強したいのならば現時点で最高の教科書だと思う。
- 「光物性物理学 (新装版)」 榎田孝司 著 (朝倉書店) 224 ページ, 3,570 円  
光物性に関する学部・大学院初等レベルの標準的教科書である。この講義で取り扱う光学材料の基礎となる光物性の大部分がカバーされている。
- 「光物性・デバイス工学の基礎」 中沢叡一郎・鎌田憲彦 編 (培風館) 292 ページ  
これも標準的な教科書の一つ。上記の教科書よりも多少デバイスよりで、かつ半導体の比重が高い。この講義だけのためならばこちらの方がお勧めかもしれないが、今では入手困難。
- 「Photonics: Optical Electronics in Modern Communications, 6th edition」 Amnon Yariv, Pochi Yeh 著 (Oxford University Press) 848 ページ, 5,874 円  
光デバイス分野の大御所 A. Yariv の大部の教科書。長い間、光エレクトロニクス分野の最も標準的な教科書の地位を保ってきた。日本語翻訳 (光エレクトロニクス) も出版されている。ただし、改訂に改訂を重ねた結果、いろいろな記述間の不整合が目立つようになってしまった。こうした矛盾、間違いなどに注意して批判的に読むと大変勉強になる。大学院上級レベル。

## 0.3 講義の概要と進め方

講義は以下のスケジュールで6回おこなう予定である。

- 1) 4/9 イントロダクション/Introduction  
光物性の基礎, 光学定数/Fundamentals of optical properties, Optical constants
- 2) 4/16 屈折率と光学材料/Refractive indices and optical materials
- 3) 4/23 屈折率差を利用した光学素子/Optical devices utilizing index differences
- 4) 4/30 偏光と光学的異方性, その利用/Polarized light and optical anisotropies
- 5) 5/14 化合物半導体とその光応用 (1)/Compound semiconductors and their applications (1)
- 6) 5/21 化合物半導体とその光応用 (2)/Compound semiconductors and their applications (2)

成績評価は, 講義最終回に出題するレポートに基づいておこなう。

講義の中でわからないことがあれば遠慮なく**その場で**質問してください。質問は他の受講生にとっても有益である場合が多いので, できるだけ講義中にしてもらいたい。

この講義に関する情報は以下のウェブページで公開している。

<http://www.castle.t.u-tokyo.ac.jp/lecture/>

この講義に関する質問, 要望などは私宛の電子メール ([tkondo@castle.t.u-tokyo.ac.jp](mailto:tkondo@castle.t.u-tokyo.ac.jp)) あるいは ITC-LMS のメッセージでも受け付ける。

## 1 屈折率と光学材料

### 1.1 マクスウェル方程式

光は電磁波の一種であるから, その振る舞いは電磁気学の基本法則を記述した以下のマクスウェル (Maxwell) 方程式を出発点にして議論できる。

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho \quad (1.1a)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (1.1b)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad (1.1c)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{i} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} \quad (1.1d)$$

ここで,  $\mathbf{E}$  は電場 (electric field),  $\mathbf{D}$  は電束密度 (electric flux density),  $\mathbf{H}$  は磁場 (magnetic field),  $\mathbf{B}$  は磁束密度 (magnetic flux density),  $\rho$  は電荷密度 (charge density),  $\mathbf{i}$  は電流密度 (current density) である。式 (1.1a) はガウス (Gauss) の法則, 式 (1.1b) は磁束密度に対するガウスの法則で磁気単極子が存在しないことを意味し, 式 (1.1c) はファラデー (Faraday) の電磁誘導の法則, 式 (1.1d) はアンペール (Ampère) の法則である。

## 1.2 真空中の電磁波・光の伝搬

### 1.2.1 真空中の電磁波

まず最初に、真空中でのマクスウェル方程式の解について考えてみよう。真空中では、

$$\mathbf{D} = \epsilon_0 \mathbf{E} \quad (1.2a)$$

$$\mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{H} \quad (1.2b)$$

の関係が成り立つ。また、当然、 $\rho = 0$ 、 $\mathbf{i} = 0$ である。この場合のマクスウェル方程式は

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = 0 \quad (1.3a)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (1.3b)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad (1.3c)$$

$$\nabla \times \mathbf{B} = \epsilon_0 \mu_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \quad (1.3d)$$

となる。

式(1.3c)の両辺に $\nabla \times$ をかけ、式(1.3d)を用いると

$$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{E}) = -\frac{\partial}{\partial t} \nabla \times \mathbf{B} = -\epsilon_0 \mu_0 \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} \quad (1.4)$$

となる。ベクトル恒等式

$$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{A}) = \nabla(\nabla \cdot \mathbf{A}) - \nabla^2 \mathbf{A} \quad (1.5)$$

を左辺に適用し、式(1.3a)を用いると、波動方程式

$$\nabla^2 \mathbf{E} - \epsilon_0 \mu_0 \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} = 0 \quad (1.6)$$

が得られる。

ほぼ同様の手順で、磁束密度に関する波動方程式

$$\nabla^2 \mathbf{B} - \epsilon_0 \mu_0 \frac{\partial^2 \mathbf{B}}{\partial t^2} = 0 \quad (1.7)$$

も得られる。これらの波動方程式は、電場と磁束密度がともに位相速度

$$c = \frac{1}{\sqrt{\epsilon_0 \mu_0}} = 2.99792458 \times 10^8 \text{ m/s} \quad (1.8)$$

の波動として伝搬することを示している。これがまさに**電磁波 (electromagnetic wave)**である。光は電磁波の一種である。電磁波の分類を図1\*1に示す。通常は、波長1 mm程度から10 nm程度までの間の電磁波を光と呼ぶ。

電磁波・光は電磁気学から導かれる古典的な波動であるが、同時に量子力学によって記述される粒子としての性質も備えている。光の粒子、すなわち、**光子 (photon)**は

$$E = h\nu = \hbar\omega \quad (1.9)$$

---

\*1 ここで用いた量の一つである波数は $\bar{\nu} \equiv 1/\lambda$  ( $\lambda$ は波長)で定義される。波数ベクトル $\mathbf{k}$ と紛らわしいが、波数ベクトルの大きさは $k = 2\pi/\lambda$ で、ここで出てきた波数 $\bar{\nu}$ と異なるので混同しないように。なお、波数 $\bar{\nu}$ の単位は、習慣的に、必ず $\text{cm}^{-1}$  (wavenumber と読む)を用いることになっている。

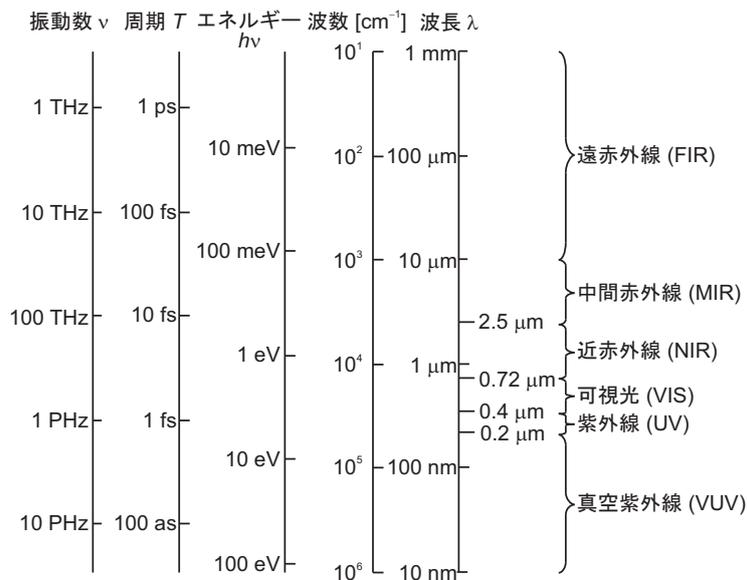
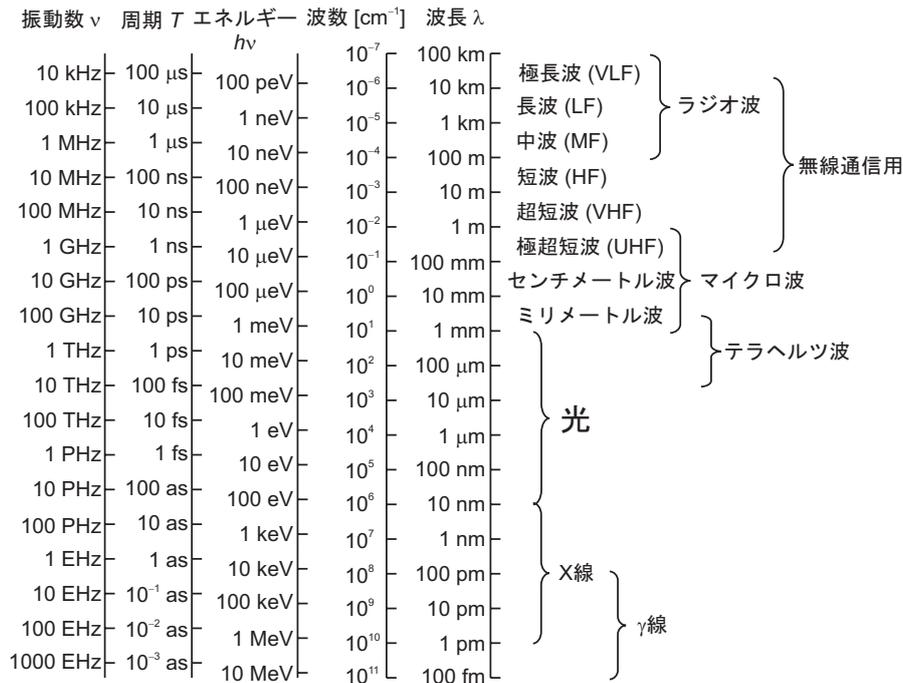


図1 電磁波と光の分類

のエネルギーならびに光に進行方向への運動量

$$p = \hbar k = \frac{h\nu}{c} \tag{1.10}$$

を持つ。

古典的波動としての電磁波・光を specify する index としては、通常、波長 (wavelength)  $\lambda$  が用いられる。一方、光子としてみる立場からは光子 (photon) エネルギー  $h\nu = \hbar\omega$  (通常は eV 単位が用いられる) が常用される。また、エネルギーに比例した量として分光学の分野では伝統的に波数 (wavenumber)  $\bar{\nu} = \nu/c = 1/\lambda$  (単位としては  $\text{cm}^{-1}$  が用いられる) が用いられてきた。

1 eV は  $8066 \text{ cm}^{-1}$  に相当し、光子エネルギー 1 eV の光の波長 (真空中) は  $1.24 \mu\text{m}$  である。例え

ば、可視光の中で緑色に見える波長  $0.50 \mu\text{m}$  の光のエネルギーは  $2.5 \text{ eV}$ 、波数は  $20000 \text{ cm}^{-1}$ 、振動数は  $0.60 \text{ PHz}$ 、その周期は  $1.7 \text{ fsec}$  である。

上記の波動方程式の最も単純な解として

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_0 \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t + \phi) \quad (1.11a)$$

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{B}_0 \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t + \phi) \quad (1.11b)$$

のような平面波を考えよう。式 (1.11a), (1.11b) を波動方程式に代入すると

$$\omega = c|\mathbf{k}| \quad (1.12)$$

という分散関係が得られる。さらに、式 (1.11a), (1.11b) をマクスウェル方程式 (1.3a)–(1.3c) に代入すると、

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{E}_0 = \mathbf{k} \cdot \mathbf{B}_0 = 0 \quad (1.13a)$$

$$\mathbf{k} \times \mathbf{E}_0 = \omega \mathbf{B}_0 \quad (1.13b)$$

が得られる。すなわち、 $\mathbf{k}, \mathbf{E}, \mathbf{B}$  は互いに直交しており（つまり、**電磁波は横波である!**）、 $\mathbf{k}, \mathbf{E}, \mathbf{B}$  の順で右手系をなしている。

平面波を式 (1.11a), (1.11b) のように実数表示するかわりに電磁場を以下のように複素数で表示すると、計算の都合上、大変便利である。<sup>\*2</sup>

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}'_0 \exp[i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)] \quad (1.14a)$$

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{B}'_0 \exp[i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)] \quad (1.14b)$$

ここで、振幅  $\mathbf{E}'_0 = \mathbf{E}_0 \exp(i\phi)$ 、 $\mathbf{B}'_0 = \mathbf{B}_0 \exp(i\phi)$  は一般に複素数で、**複素振幅 (complex amplitude)** とよばれる（実際の電場・磁束密度はこれらの式の実部であることに注意せよ）。この平面波複素数表示では、以下の演算子の置き換えが可能である。

$$\frac{\partial}{\partial t} = -i\omega, \quad \nabla \cdot = i\mathbf{k} \cdot, \quad \nabla \times = i\mathbf{k} \times \quad (1.15)$$

以下では、この**複素数表示**をしばしば用いる。

## 1.2.2 真空中の光の強度・エネルギー・パワー

マクスウェル方程式 (1.3c) に  $\mathbf{H} \cdot$  をかけた式と (1.3d)/ $\mu_0$  に  $-\mathbf{E} \cdot$  をかけた式とを足しあわせると

$$\mathbf{H} \cdot \nabla \times \mathbf{E} - \mathbf{E} \cdot \nabla \times \mathbf{H} = -\mu_0 \mathbf{H} \cdot \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} - \epsilon_0 \mathbf{E} \cdot \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \quad (1.16)$$

が得られる。左辺は  $\nabla \cdot (\mathbf{E} \times \mathbf{H})$  に等しく、右辺は  $-\frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{1}{2} \epsilon_0 E^2 + \frac{1}{2} \mu_0 H^2 \right)$  に等しい。したがって、

$$\nabla \cdot (\mathbf{E} \times \mathbf{H}) = -\frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{1}{2} \epsilon_0 E^2 + \frac{1}{2} \mu_0 H^2 \right) \quad (1.17)$$

が成り立つ。この式について平曲面内部の積分をとってガウスの定理を適用すると

$$\int_{\text{表面}} (\mathbf{E} \times \mathbf{H}) \cdot \mathbf{n} \, da = -\frac{d}{dt} \int_{\text{内部}} U \, dV \quad (1.18)$$

<sup>\*2</sup> あくまで計算が簡単になるというだけである。電磁気学に登場するすべての物理量は実数であることを忘れないように。

となる。ここで、

$$U = \frac{1}{2}\epsilon_0 E^2 + \frac{1}{2}\mu_0 H^2 \quad (1.19)$$

は単位体積あたりの電磁場のエネルギーなので、左辺の

$$\mathbf{S} = \mathbf{E} \times \mathbf{H} \quad (1.20)$$

は電磁波によって運ばれるエネルギーの流れの方向を向いたベクトルで、その大きさはこのベクトルに垂直な面の単位面積を単位時間通過するエネルギーを表している。これをポインティングベクトル (**Poynting vector**) と呼ぶ。真空中では、 $\mathbf{S} \parallel \mathbf{k}$ 、すなわち、電磁波のエネルギーは等位相面に垂直な方向に運ばれる\*3。電磁波の強度 (**intensity**) (単位面積を単位時間に通過するエネルギー) はポインティングベクトルの大きさの時間平均で与えられ、

$$I = \langle S \rangle = \frac{\epsilon_0 c}{2} |E_0|^2 \quad (1.21)$$

となる。強度の単位としては通常  $\text{W/cm}^2$  が用いられる。また、電磁波の**パワー (power)** (単位時間あたりのエネルギー) はこの強度を面積で積分したものとなる。当然、このパワーは光子のエネルギー  $\hbar\omega$  に単位時間あたりに通過する光子数をかけたものに等しい。

## 1.3 物質中の光の伝搬と吸収

### 1.3.1 透明媒質中の光の伝搬

電気的に中性な絶縁体 ( $\rho = 0, \mathbf{i} = \mathbf{0}$ ) 中を伝搬する電磁波・光について考えよう。物質の構成方程式

$$\mathbf{D} = \epsilon_0 \epsilon_r \mathbf{E} \quad (1.22a)$$

$$\mathbf{B} = \mu_0 \mu_r \mathbf{H} \quad (1.22b)$$

を用いると、マクスウェル方程式は

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = 0 \quad (1.23a)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (1.23b)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad (1.23c)$$

$$\nabla \times \mathbf{B} = \epsilon_r \mu_r \epsilon_0 \mu_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \quad (1.23d)$$

となる。このマクスウェル方程式から、波動方程式

$$\nabla^2 \mathbf{E} - \epsilon_r \mu_r \epsilon_0 \mu_0 \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} = 0 \quad (1.24a)$$

$$\nabla^2 \mathbf{B} - \epsilon_r \mu_r \epsilon_0 \mu_0 \frac{\partial^2 \mathbf{B}}{\partial t^2} = 0 \quad (1.24b)$$

が導かれる。これから、物質中での光の位相速度は

$$v = \frac{1}{\sqrt{\epsilon_r \mu_r \epsilon_0 \mu_0}} = \frac{c}{\sqrt{\epsilon_r \mu_r}} \quad (1.25)$$

\*3 通常の等方性の物質中でもこれは正しいが、異方性媒質内では成り立たない。これについては後述する。

であることがわかる。ここで、**屈折率 (refractive index)**

$$n = \sqrt{\epsilon_r \mu_r} \quad (1.26)$$

を導入することで、おなじみの

$$v = \frac{c}{n} \quad (1.27)$$

の関係が得られる。通常の誘電体では、ほぼ  $\mu_r = 1$  なので、

$$n = \sqrt{\epsilon_r} \quad (1.28)$$

である。<sup>\*4</sup>同時に、

$$|k| = \frac{n\omega}{c} = \frac{2\pi n}{\lambda} \quad (1.29)$$

であることも直ちに示される。また、多少の計算によって、物質中の光強度は光電場振幅  $E_0$  を用いて

$$I = \frac{\epsilon_0 n c}{2} |E_0|^2 \quad (1.30)$$

で与えられることも導出できる。

ところで、物質中での光の位相速度が屈折率の分だけ遅くなるのはなぜであろうか。これは、物質中に誘起される分極による付加電場の影響であると考えることができる。光のような高周波の電磁波では、物質中で動くことのできる荷電粒子は電子だけである。電子は電磁波の電場成分によってクーロン力を受け、運動する<sup>\*5</sup>。運動する電荷は、再び電磁波を放射するので、物質中の電磁波は、結局、外から入射した電磁波と物質内の各電荷の作る付加的な電磁波の総和となる。

$x$  軸上を加速度運動している電荷  $q$  の荷電粒子を考えよう。時刻  $t$  における電荷の座標を  $x(t)$  とすると、この電荷から距離  $r$  離れた点に生じる電場大きさは

$$E(t) = -\frac{q}{4\pi\epsilon_0 c^2} \frac{\cos\theta}{r} \ddot{x}\left(t - \frac{r}{c}\right) \quad (1.31)$$

で与えられる<sup>\*6</sup>。ここで、 $\theta$  は電荷から観測点を結ぶベクトル  $\mathbf{r}$  と  $x$  軸とのなす角である。また、その電場の向きは、 $\mathbf{r}$  と  $x$  軸を含む平面内で、かつ、 $\mathbf{r}$  に垂直である。次に、単振動的に運動する電荷が  $xy$  面内 ( $z = 0$  としよう) で面密度  $\eta$  で均一に分布している場合について考える。すべての電荷は同位相で振動しているとし、 $x(t) = x_0 \exp(-i\omega t)$  とする。この場合には、観測点  $z (> 0)$  での電場は、それぞれの電荷からの寄与を足し合わせたものとなるので、

$$\begin{aligned} E_r(z, t) &= \iint \frac{q\omega^2}{4\pi\epsilon_0 c^2} \frac{\cos\theta}{r} \exp\left[-i\omega\left(t - \frac{r}{c}\right)\right] dx dy \\ &\simeq -i\omega \frac{\eta q x_0}{2\epsilon_0 c} \exp\left[-i\omega\left(t - \frac{z}{c}\right)\right] \end{aligned} \quad (1.32)$$

となる。このことを踏まえて、 $z = 0$  にある上述の電荷シートの左側  $z = -\infty$  から  $x$  方向に振動する電場を有する平面波  $E_i(z, t) = E_i^0 \exp[i(kz - \omega t)]$  が入射したときに  $z > 0$  のある点での電場がどうな

<sup>\*4</sup> 最近になって、光の領域で、 $\epsilon_r \neq 1$  かつ  $\mu_r \neq 1$  であるような物質を人工的に作製できるようになってきた。このような物質を**メタマテリアル (metamaterial)** という。適切に設計することによって、 $\epsilon_r < 0$  かつ  $\mu_r < 0$  を満たすようなメタマテリアルを作り出すことができる。この場合には、 $n < 0$ 、すなわち屈折率が負になるという通常考えられないような状況が出現する。このような**負の屈折率 (negative index)** を利用しようという研究が進められている。

<sup>\*5</sup> 電荷は磁場によるローレンツ力も受けるが、こちらは電場によるクーロン力に比べるとはるかに小さいので、通常は無視できる。

<sup>\*6</sup> この式の導出は省略する。興味がある人は適当な電磁気学の教科書を参照すること。

るかを求めてみよう。電荷が入射電場  $E_i(0, t) = E_i^0 \exp(-i\omega t)$  に即座に追随して同位相で運動するならば、その座標は  $x(t) = x_0 \exp(-i\omega t)$  となるので、観測点におけるトータル電場は以下のようになる。

$$\begin{aligned}
 E^{\text{total}}(z, t) &= E_i(z, t) + E_r(z, t) \\
 &\simeq E_i^0 \exp[i(kz - \omega t)] - i\omega \frac{\eta q x_0}{2\epsilon_0 c} \exp\left[-i\omega\left(t - \frac{z}{c}\right)\right] \\
 &= E_i^0 \exp[i(kz - \omega t)] \left(1 - i \frac{\omega \eta q x_0}{2\epsilon_0 c E_i^0}\right) \\
 &\simeq E_i^0 \exp[i(kz - \omega t)] \exp\left(-i \frac{\omega \eta q x_0}{2\epsilon_0 c E_i^0}\right) \tag{1.33}
 \end{aligned}$$

この式は、電荷シートのために、ある位置  $z$  での光の位相が  $\frac{\omega \eta q x_0}{2\epsilon_0 c E_i^0}$  だけ進むことを意味している。すなわち、物質中では電荷が光電場に追随して振動するために、ある場所で見た光の位相の進みが早くなり、その結果、波長が短く、すなわち、位相速度が遅くなるのである。これが屈折率としてよく知られた量の物理的起源である。

### 1.3.2 吸収媒質中の光の伝搬—複素誘電率と複素屈折率

「絶縁体」という制限をはずした場合に、物質中の光の伝搬がどのように変わるかを見てみよう。マクスウェル方程式（アンペールの法則）より、

$$\mathbf{E} \cdot (\nabla \times \mathbf{H}) = \mathbf{i} \cdot \mathbf{E} + \mathbf{E} \cdot \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} \tag{1.34}$$

が得られる。ベクトル恒等式

$$\nabla \cdot (\mathbf{E} \times \mathbf{H}) = \mathbf{H} \cdot (\nabla \times \mathbf{E}) - \mathbf{E} \cdot (\nabla \times \mathbf{H}) \tag{1.35}$$

を用いると、

$$\begin{aligned}
 \mathbf{i} \cdot \mathbf{E} &= -\mathbf{E} \cdot \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} - \mathbf{H} \cdot (\nabla \times \mathbf{E}) - \nabla \cdot (\mathbf{E} \times \mathbf{H}) \\
 &= -\mathbf{E} \cdot \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} - \mathbf{H} \cdot \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} - \nabla \cdot (\mathbf{E} \times \mathbf{H}) \tag{1.36}
 \end{aligned}$$

となる。左辺は電場がする仕事であるので、右辺は電磁場に関連して媒質から失われるエネルギーである。実際、右辺第3項にはポインティングベクトルが現れている。媒質中の電場のエネルギー減少は右辺第1項で表されているが、これは

$$\mathbf{E} \cdot \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} = \epsilon_0 \mathbf{E} \cdot \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} + \mathbf{E} \cdot \frac{\partial \mathbf{P}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{\epsilon_0}{2} E^2 \right) + \mathbf{E} \cdot \frac{\partial \mathbf{P}}{\partial t} \tag{1.37}$$

と書き直せる。 $\mathbf{E} \cdot \frac{\partial \mathbf{P}}{\partial t}$  は、物質が電場との相互作用の結果吸収するエネルギーに相当する。

この媒質による電場（すなわち電磁波）エネルギーの吸収をもう少し詳しく調べてみよう。媒質中を流れる電流密度  $\mathbf{i}$  は通常は電場  $\mathbf{E}$  に比例し、

$$\mathbf{i} = \sigma \mathbf{E} \tag{1.38}$$

と書ける（ $\sigma$  は電気伝導率 (conductivity) である）。中性 ( $\rho = 0$ ) の非磁性体 ( $\mu_r = 1$ ) の場合のマクス

ウェル方程式は

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = 0 \quad (1.39a)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (1.39b)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad (1.39c)$$

$$\nabla \times \mathbf{B} = \mu_0 \sigma \mathbf{E} + \epsilon_r \epsilon_0 \mu_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \quad (1.39d)$$

となる。式 (1.39c) の両辺の rot ( $\nabla \times$ ) をとり、式 (1.39d) を用いると

$$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{E}) = -\frac{\partial}{\partial t} \nabla \times \mathbf{B} = -\mu_0 \sigma \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} - \epsilon_r \epsilon_0 \mu_0 \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} \quad (1.40)$$

となる。これから、最終的に波動方程式

$$\nabla^2 \mathbf{E} - \sigma \mu_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} - \epsilon_r \epsilon_0 \mu_0 \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} = 0 \quad (1.41)$$

が得られる。これに  $z$  方向に伝搬する平面波の解 (複素数表示)

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_0 \exp[i(kz - \omega t)] \quad (1.42)$$

を代入すると

$$-k^2 + i\sigma\mu_0\omega + \epsilon_r\epsilon_0\mu_0\omega^2 = 0 \quad (1.43)$$

が得られる。ここで

$$\epsilon_r + i\frac{\sigma}{\omega\epsilon_0} \equiv \tilde{\epsilon}_r \equiv \tilde{n}^2 \quad (1.44)$$

で定義される複素誘電率  $\tilde{\epsilon}_r$  と複素屈折率  $\tilde{n}$  を導入すると、

$$k = \frac{\sqrt{\tilde{\epsilon}_r}}{c} \omega = \frac{\tilde{n}}{c} \omega \quad (1.45)$$

となる。すなわち、波数ベクトル  $\mathbf{k}$  は複素数ベクトルであることがわかる。これを式 (1.42) に代入すると

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_0 \exp\left\{i\omega\left(\frac{n}{c}z - t\right)\right\} \exp\left(-\frac{\kappa\omega}{c}z\right) \quad (1.46)$$

と、伝搬に伴って電場振幅が指数関数的に減少することがわかる。これが吸収 (absorption) である。

なお、

$$\tilde{n} \equiv n + i\kappa \quad (1.47)$$

で、実部  $n$  は屈折率 (refractive index)、虚部  $\kappa$  は消衰係数 (extinction coefficient) と呼ばれる。複素誘電率を実部と虚部分けて

$$\tilde{\epsilon}_r \equiv \epsilon_1 + i\epsilon_2 \quad (1.48)$$

と書くと、

$$\epsilon_1 = n^2 - \kappa^2 \quad (1.49a)$$

$$\epsilon_2 = 2n\kappa \quad (1.49b)$$

あるいは、

$$n^2 = \frac{1}{2} \left( \epsilon_1 + \sqrt{\epsilon_1^2 + \epsilon_2^2} \right) \quad (1.50a)$$

$$\kappa^2 = \frac{1}{2} \left( -\epsilon_1 + \sqrt{\epsilon_1^2 + \epsilon_2^2} \right) \quad (1.50b)$$

が成り立つ。

### 1.3.3 透過率と吸収係数

式 (1.46) より, 光強度は

$$I(z) = I(0) \exp\left(-\frac{2\kappa\omega}{c}z\right) = I(0) \exp(-\alpha z) \quad (1.51)$$

と伝搬長に対して指数関数的に減衰することがわかる。ここで,

$$\alpha = \frac{2\kappa\omega}{c} \quad (1.52)$$

を吸収係数 (**absorption coefficient**) と呼ぶ (通常  $\text{cm}^{-1}$  の単位が用いられる)。吸収性媒質中を伝搬する光の強度は試料厚さに対して指数関数的に減少する。強度  $I_0$  の単色光が長さ  $L$  の媒質を透過して強度  $I_t$  になる場合, 透過率は次の式で与えられる。

$$T = \frac{I_t}{I_0} = \exp(-\alpha L) = 10^{-A} \quad (1.53)$$

ここで,

$$A = (\log_{10} e) \alpha L = 0.434 \alpha L \quad (1.54)$$

を媒質の光学密度 (**Optical Density, OD**) あるいは吸光度 (**absorbance**) という (これは無次元の量である)。\*7

### 1.3.4 界面での反射と透過

屈折率が互いに異なる物質が接した界面では, その界面に向かって入射した光のエネルギーの一部 (場合によっては全部) が入射側に戻ってくる。これをフレネル反射 (**Fresnel reflection**) という。

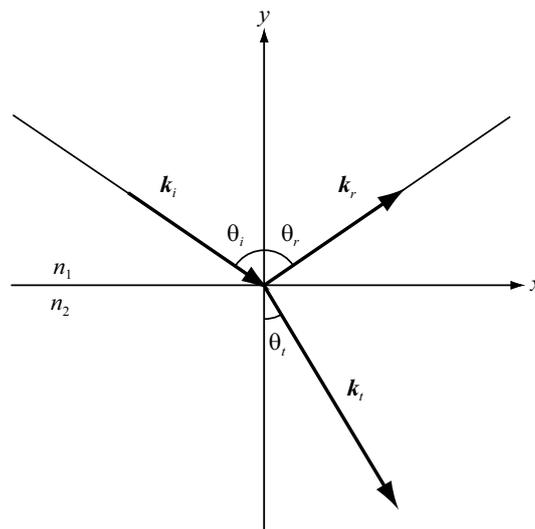


図 2 二つの媒質の境界面での入射光・反射光・透過光

\*7 物性の分野では通常お目にかからないが, 通信やエレクトロニクス方面では,  $-10 \log_{10}[I(L)/I(0)]/L$  で定義される伝搬損失 (単位は  $\text{dB/cm}$  が通常用いられる) が使用されている。光パワーについても,  $0 \text{ dBm} = 1 \text{ mW}$  で定義される  $\log$  スケールの単位が用いられる。

図 2 に示すように、屈折率  $n_1$  の媒質と  $n_2$  の媒質が接した界面に平面波光が入射角  $\theta_i$  で入射した場合を考えよう。入射光、反射光、透過光の電場をそれぞれ

$$\mathbf{E}_i = \mathbf{E}_i^0 \exp[i(\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r} - \omega_i t)] \quad (1.55a)$$

$$\mathbf{E}_r = \mathbf{E}_r^0 \exp[i(\mathbf{k}_r \cdot \mathbf{r} - \omega_r t)] \quad (1.55b)$$

$$\mathbf{E}_t = \mathbf{E}_t^0 \exp[i(\mathbf{k}_t \cdot \mathbf{r} - \omega_t t)] \quad (1.55c)$$

とする。ここで、入射光の波数ベクトル  $\mathbf{k}_i$  は  $xy$  面内にあるものとする（入射光の波数ベクトルと境界面の法線ベクトルを含む面を**入射面 (plane of incidence)**とよぶ)。まず、境界面での電場・磁場の連続条件が時刻  $t$  に依らず成り立たなければならないことから、 $\omega_i = \omega_r = \omega_t$  であることが直ちにわかる。次に、境界面上の全ての点で連続条件が成り立たなければならないことから、 $\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}_{xz} = \mathbf{k}_r \cdot \mathbf{r}_{xz} = \mathbf{k}_t \cdot \mathbf{r}_{xz}$  となる（ $\mathbf{r}_{xz}$  は境界面上の任意の点の座標）。これはすなわち、反射光・透過光の波数ベクトル  $\mathbf{k}_r, \mathbf{k}_t$  も入射面内にあり、

$$(\mathbf{k}_i)_x = (\mathbf{k}_r)_x = (\mathbf{k}_t)_x \quad (1.56)$$

であることを意味している。これからいわゆる反射の法則

$$\theta_r = \theta_i \quad (1.57)$$

と、屈折に関するスネルの法則 (Snell's law)

$$n_1 \sin \theta_i = n_2 \sin \theta_t \quad (1.58)$$

が得られる。これらは（式 (1.56) からあきらかなとおり）光子の運動量ベクトル  $\hbar \mathbf{k}$  の接線成分の保存則にほかならない。

垂直入射の場合 ( $\theta_i = \theta_r = \theta_t = 0$ ) について、反射率と透過率を求めよう。電場の接線成分が連続であるという境界条件から、直ちに  $E_i + E_r = E_t$  となる。一方、磁場の接線成分の連続性から、 $H_i + H_r = H_t$  となるが、マクスウェル方程式から、 $\mathbf{k} \times \mathbf{E} = \mu_0 \omega \mathbf{H}$  なので、この連続条件は  $\frac{n_1 \mu_0}{c} E_i - \frac{n_1 \mu_0}{c} E_r = \frac{n_2 \mu_0}{c} E_t$  となる。結局、解くべき連立方程式は

$$E_i + E_r = E_t \quad (1.59a)$$

$$n_1 E_i - n_1 E_r = n_2 E_t \quad (1.59b)$$

となる。これから、振幅反射率・透過率

$$r = \frac{E_r}{E_i} = \frac{n_1 - n_2}{n_1 + n_2} \quad (1.60a)$$

$$t = \frac{E_t}{E_i} = \frac{2n_1}{n_1 + n_2} \quad (1.60b)$$

と、パワー反射率・透過率

$$R = \frac{I_r}{I_i} = \left| \frac{E_r}{E_i} \right|^2 = \left| \frac{n_1 - n_2}{n_1 + n_2} \right|^2 \quad (1.61a)$$

$$T = \frac{I_t}{I_i} = \frac{n_2}{n_1} \left| \frac{E_t}{E_i} \right|^2 = \frac{4n_1 n_2}{(n_1 + n_2)^2} \quad (1.61b)$$

が得られる。

以上の議論は吸収性媒質に対しても同じように成り立つので、吸収性媒質の振幅反射率は

$$r = |r| \exp(i\phi_r) = \frac{\tilde{n}_1 - \tilde{n}_2}{\tilde{n}_1 + \tilde{n}_2} \quad (1.62)$$

で与えられる ( $\phi_r$  は反射に伴う位相変化)。したがって、 $n_1 = 1$  の空気 (真空) から複素屈折率  $\tilde{n} = n + i\kappa$  の媒質に垂直に入射した光に対する振幅反射率は

$$r = |r| \exp(i\phi_r) = \frac{1 - \tilde{n}}{1 + \tilde{n}} = \frac{1 - n - i\kappa}{1 + n + i\kappa} \quad (1.63)$$

パワー反射率は

$$R = \frac{(n - 1)^2 + \kappa^2}{(n + 1)^2 + \kappa^2} \quad (1.64)$$

となる。

ここでは、その導出過程は示さないが、垂直入射でない一般の場合についても同様の手順で反射率・透過率を求めることができる。一般に、透過率・反射率は、入射光の電場の振動方向が入射面 (図 2 では  $x$ - $y$  面) に垂直な場合 (**s 偏光 (s polarization)**) とよぶ) と平行な場合 (**p 偏光 (p polarization)**) とよぶ) とで異なる。s 偏光に対するパワー反射係数  $R_s$  と透過係数  $T_s$  は次式で与えられる。

$$R_s = \frac{\left( n_1 \cos \theta_i - \sqrt{n_2^2 - n_1^2 \sin^2 \theta_i} \right)^2}{\left( n_1 \cos \theta_i + \sqrt{n_2^2 - n_1^2 \sin^2 \theta_i} \right)^2} = \frac{\sin^2(\theta_t - \theta_i)}{\sin^2(\theta_t + \theta_i)} \quad (1.65a)$$

$$T_s = \frac{4n_1 \cos \theta_i \sqrt{n_2^2 - n_1^2 \sin^2 \theta_i}}{\left( n_1 \cos \theta_i + \sqrt{n_2^2 - n_1^2 \sin^2 \theta_i} \right)^2} = \frac{\sin 2\theta_i \sin 2\theta_t}{\sin^2(\theta_i + \theta_t)} \quad (1.65b)$$

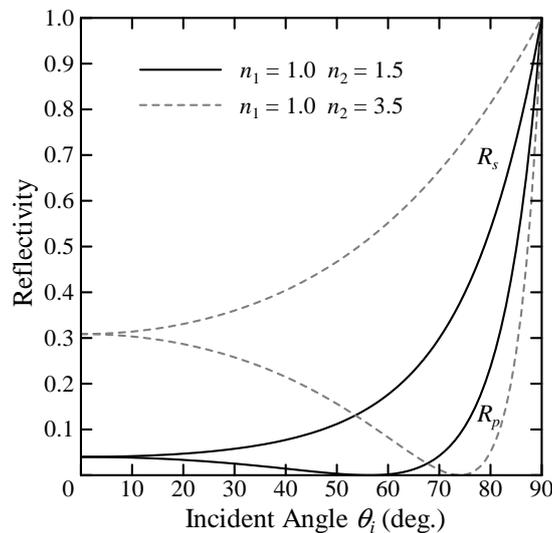


図 3 フレネル反射率

p 偏光の場合は

$$R_p = \frac{\left( n_2 \cos \theta_i - (n_1/n_2) \sqrt{n_2^2 - n_1^2 \sin^2 \theta_i} \right)^2}{\left( n_2 \cos \theta_i + (n_1/n_2) \sqrt{n_2^2 - n_1^2 \sin^2 \theta_i} \right)^2} = \frac{\tan^2(\theta_t - \theta_i)}{\tan^2(\theta_t + \theta_i)} \quad (1.66a)$$

$$T_p = \frac{4n_1 \cos \theta_i \sqrt{n_2^2 - n_1^2 \sin^2 \theta_i}}{\left( n_2 \cos \theta_i + (n_1/n_2) \sqrt{n_2^2 - n_1^2 \sin^2 \theta_i} \right)^2} = \frac{\sin 2\theta_i \sin 2\theta_t}{\sin^2(\theta_i + \theta_t) \cos^2(\theta_i - \theta_t)} \quad (1.66b)$$

となる。いずれも  $R + T = 1$  である。 $n_1 = 1, n_2 = 1.5$  の場合と  $n_1 = 1, n_2 = 3.5$  の場合の反射率の入射角依存性を図 3 に示す。常に  $R_s \geq R_p$  であることに注意。 $R_p = 0$  となる角度  $\theta_B$  を**ブリュースター角 (Brewster's angle)** といい、

$$\tan \theta_B = \frac{n_2}{n_1} \quad (1.67)$$

が成り立つ。

$n_1 > n_2$  の場合、入射角

$$\theta_c = \sin^{-1} \left( \frac{n_2}{n_1} \right) \quad (1.68)$$

(これを**臨界角 (critical angle)** とよぶ) で屈折角が  $90^\circ$  になり、それ以上の入射角に対しては第 2 媒質中を光が伝搬できなくなり、入射光の全エネルギーが反射されることになる。これが**全反射 (total reflection)** とよばれる現象である。全反射が起きているとき、第 2 媒質中の光は界面から内側へ向かって指数関数的に減衰する**エバネッセント波 (evanescent wave)** となっている。

## 1.4 屈折率の波長分散

材料の屈折率 (一般には光学定数) は異なる波長の光に対して異なる値となる。これを屈折率に**波長分散 (wavelength dispersion)** があるという。以下では、物質の屈折率の波長分散を、物質と光とともに古典的に扱う古典論的取扱いによって議論する。

### 1.4.1 双極子分散 (ローレンツモデル)

古典論の立場では物質をいろいろな固有振動数を持つ電気双極子の集まりとみなす。一つの電気双極子をバネで束縛された電荷とみなして、速度に比例する摩擦力を受けながら振動する調和振動子として扱う。このようなモデルを**ローレンツ (Lorentz) モデル**という。外部電場  $\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 \exp(-i\omega t)$  のもとでの運動方程式は

$$m \frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2} + m\Gamma \frac{d\mathbf{r}}{dt} + m\omega_0^2 \mathbf{r} = e\mathbf{E}_0 \exp(-i\omega t) \quad (1.69)$$

と書ける。ここで、 $m, e, \omega_0$  はそれぞれ荷電粒子の質量、電荷、固有振動数である。強制振動によって変位  $\mathbf{r}$  も角振動数  $\omega$  で振動すると考えられるので  $\mathbf{r} = \mathbf{r}_0 \exp(-i\omega t)$  を代入すると

$$\mathbf{r}_0 = \frac{e\mathbf{E}_0}{m(\omega_0^2 - \omega^2 - i\Gamma\omega)} \quad (1.70)$$

が得られる。このような振動子が体積  $V$  中に  $N$  個あるとすると、分極は  $\mathbf{P} = (N/V)e\mathbf{r}$  で与えられるので、 $\mathbf{D} = \epsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P} = \tilde{\epsilon}_r \epsilon_0 \mathbf{E}$  より

$$\tilde{\epsilon}_r = 1 + \frac{Ne^2/m\epsilon_0 V}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\Gamma\omega} \quad (1.71)$$

が導かれる。これを実部と虚部分けると

$$\epsilon_1 = 1 + \frac{Ne^2}{m\epsilon_0 V} \frac{\omega_0^2 - \omega^2}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \Gamma^2 \omega^2} \quad (1.72a)$$

$$\epsilon_2 = \frac{Ne^2}{m\epsilon_0 V} \frac{\Gamma \omega}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \Gamma^2 \omega^2} \quad (1.72b)$$

となる。ここまでは固有振動数が  $\omega_0$  の単一の振動子を考えたが、多数の振動子が体積  $V$  中に全部で  $N$  個あり、そのうち固有振動数  $\omega_j$  のものの割合が  $f_j$  とすると

$$\tilde{\epsilon}_r = 1 + \sum_j \frac{(Ne^2/m\epsilon_0 V)f_j}{\omega_j^2 - \omega^2 - i\Gamma_j \omega} \quad (1.73)$$

となる。ここで  $f_j$  は量子力学的に定義された**振動子強度 (oscillator strength)** に対応し、 $\sum_j f_j = 1$  を満たす。

固有振動数  $\omega_1$  の一つの振動子に着目し、他の固有振動数は  $\omega_1$  から十分に離れているとすると、

$$\tilde{\epsilon}_r = \epsilon_u + \frac{(\epsilon_l - \epsilon_u)\omega_1^2}{\omega_1^2 - \omega^2 - i\Gamma_1 \omega} \quad (1.74)$$

と書ける。ここで、 $\epsilon_u$  と  $\epsilon_l$  はそれぞれ比誘電率の上限 ( $\omega \rightarrow \infty$ ) と下限 ( $\omega \rightarrow 0$ ) での値である。 $\hbar\omega_1 = 4$  eV,  $\epsilon_u = 1$ ,  $\epsilon_l = 4$ ,  $\hbar\Gamma_1 = 1$  eV あるいは  $\hbar\Gamma_1 = 0$  としたときの  $\epsilon_1, \epsilon_2, n, \kappa, R, \alpha$  のスペクトル

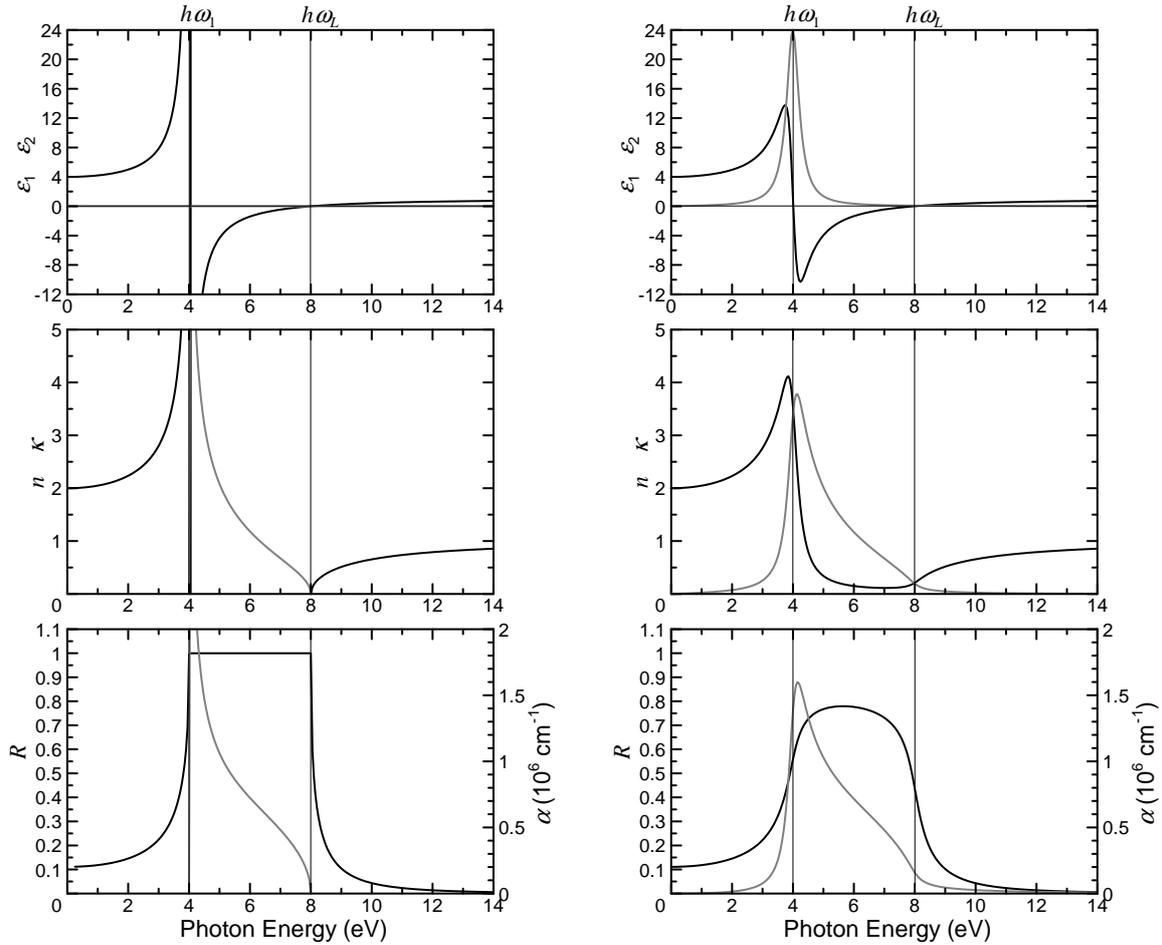


図4 ローレンツモデルによる分散。 $\hbar\omega_1 = 4$  eV,  $\epsilon_u = 1$ ,  $\epsilon_l = 4$  の場合について計算した。左は  $\hbar\Gamma_1 = 0$  の場合、右は  $\hbar\Gamma_1 = 0.5$  eV の場合。

を図 4 に示す。  $dn/d\omega > 0$  ( $dn/d\lambda < 0$ ) の場合を**正常分散 (normal dispersion)**,  $dn/d\omega < 0$  ( $dn/d\lambda > 0$ ) の場合を**異常分散 (anomalous dispersion)** という。ローレンツモデルではほぼ  $\omega_1 < \omega < \omega_L$  ( $\omega_L$  については後述) が異常分散領域となる。

ローレンツモデルでは吸収スペクトルのピークはほぼ振動子の固有振動数  $\omega_1$  の位置にある。また,  $\Gamma \rightarrow 0$  とすると  $\omega_1 < \omega < \omega_L$  の領域で全反射 ( $R = 1$ ) が起こる。通常は  $\Gamma \neq 0$  でも  $\Gamma$  は十分に小さいので,  $\omega_1 < \omega < \omega_L$  のエネルギー領域で高い反射率を示すことになる。すなわち, ローレンツモデルでは共鳴吸収帯のわずかに高エネルギー側で極めて高い反射率が得られることになる。

ところで,  $\epsilon_l = 0$  となる二つの振動数のうち高いほうを  $\omega_L$  とすると, 式 (1.74) から

$$\frac{\epsilon_l}{\epsilon_u} = \frac{\omega_L^2}{\omega_1^2} \left( 1 + \frac{\Gamma_1^2}{\omega_L^2 - \omega_1^2} \right) \quad (1.75)$$

が得られるが,  $\Gamma_1^2 \ll (\omega_L^2 - \omega_1^2)$  であれば, これは

$$\frac{\epsilon_l}{\epsilon_u} = \frac{\omega_L^2}{\omega_1^2} \quad (1.76)$$

と近似できる。これは**ライダン-ザックス-テラー (Lydanne-Sachs-Teller, LST) の関係式**とよばれる。これを使うと,  $\Gamma_1$  を無視して式 (1.74) は

$$\tilde{\epsilon}_r = \epsilon_u \frac{\omega_L^2 - \omega^2}{\omega_1^2 - \omega^2} \quad (1.77)$$

と書ける。

ローレンツモデルは誘電体中の**フォノン (phonon)** や**励起子 (exciton)** の振舞いをよく説明できることが知られている。 $\hbar\omega_1$  は (これまで暗黙のうちに仮定してきた通り) 横波 (横型光学 (TO) フォノンや横波励起子) の共鳴エネルギーである。これに対して, 縦波 (縦型光学 (LO) フォノンや縦波励起子) の共鳴エネルギーは  $\hbar\omega_L$  であることが示される。

式 (1.74) で共鳴振動数に極めて近い領域を除けば  $\Gamma_1$  の項は無視できるので,

$$n^2 = \epsilon_u + \frac{\epsilon_l - \epsilon_u}{1 - \omega^2/\omega_1^2} = A + \frac{B}{1 - C^2/\lambda^2} \quad (1.78)$$

と書くことができる。これに複数の振動子の寄与を取り入れるためには

$$n^2 = A + \sum_i \frac{B_i}{1 - C_i^2/\lambda^2} \quad (1.79)$$

とすればよい。式 (1.78) と式 (1.79) は屈折率に関する**セルマイヤ (Sellmeier) の分散式**とよばれる。通常は測定値に対してもっともよくフィッティングできるように未定係数  $A \sim C$  を決定する。この式は多くの物質の透明領域での屈折率の分散を与える式として利用されている。可視から近赤外の領域では, フォノンからの寄与を表す項では  $C \gg \lambda$  となるので

$$\frac{B_j}{1 - C_j^2/\lambda^2} \simeq -\frac{B_j}{C_j^2} \lambda^2 = -D_j \lambda^2 \quad (1.80)$$

としてしまうことが多い。図 5 に合成石英の屈折率分散の測定値とセルマイヤフィッティングの結果を示す。

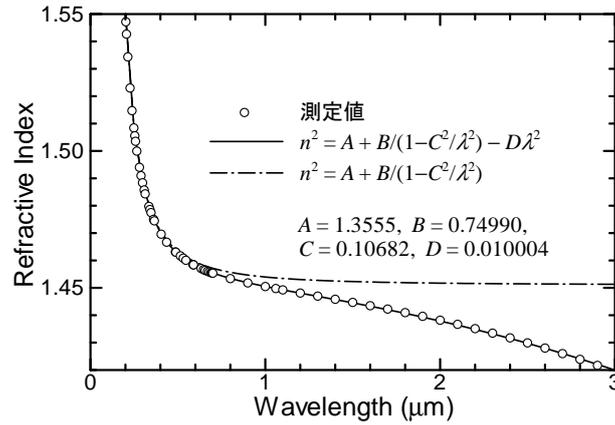


図5 合成石英の屈折率分散とセルマイヤの式によるフィッティング

### 1.4.2 自由キャリアによる分散（ドルーデモデル）

金属や半導体中の自由キャリア（電子や正孔）の場合には復元力が働かないので式 (1.69) の運動方程式で  $\omega_0 = 0$  としてよい。このようなモデルをドルーデ (Drude) モデルという。式 (1.71) で  $\omega_0 = 0$  とし、 $\tau = \Gamma^{-1}$  で定義される緩和時間（平均自由時間）を用いると

$$\begin{aligned}\tilde{\epsilon}_r &= 1 - \frac{(Ne^2/m^* \epsilon_0 V)}{\omega(\omega + i\tau^{-1})} \\ &= 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\tau^{-1})}\end{aligned}\quad (1.81)$$

が得られる。ここで、 $\omega_p = \sqrt{Ne^2/m^* \epsilon_0 V}$  はプラズマ振動数 (plasma frequency) と呼ばれる。 $\hbar\omega_p = 5 \text{ eV}$ ,  $\hbar/\tau = 0.1 \text{ eV}$  あるいは  $\hbar/\tau = 0$  としたときの  $\epsilon_1$ ,  $\epsilon_2$ ,  $n$ ,  $\kappa$ ,  $R$ ,  $\alpha$  のスペクトルを図 6 に示す。一般に  $\omega_p\tau \gg 1$  が成立するので、 $\omega \gg 1/\tau$  では

$$\tilde{\epsilon}_r = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}\quad (1.82)$$

と書ける。 $\omega < \omega_p$  では  $\sqrt{\tilde{\epsilon}_r}$  が純虚数に近くなってほぼ全反射となる\*8が、 $\omega > \omega_p$  では透明となる。また、 $\omega = \omega_p$  では  $n \approx 0$  となり、媒質中の波長が無限大となる。すなわち、この振動数の入射光の下では自由キャリアが位相を揃えてプラズマ振動数で振動することになる。

### 1.4.3 分散媒質中のパルス光の伝搬

ここまでは、光の伝搬を議論する際、単色コヒーレント光を暗黙のうちに仮定していた。単色であるとの仮定は、連続波 (continuous wave, CW) で発振しているレーザー光にはよくあてはまるが、光通信に用いられるような、高速変調されたレーザー光、特にパルス (pulse) 光ではこの仮定は破綻してしまう。以下では、このような短パルス光の伝搬について調べよう。

極めて短い時間領域にエネルギーの集中した短パルス光では、時間幅が狭くなるのに対応してエネルギー（周波数）幅が増大する。すなわち、周波数（あるいは波長）スペクトルに有限の幅が生じることになる。そのような短パルス光は単色波の重ね合わせで表すことができるが、分散性媒質中では

\*8 これが金属光沢の原因である！

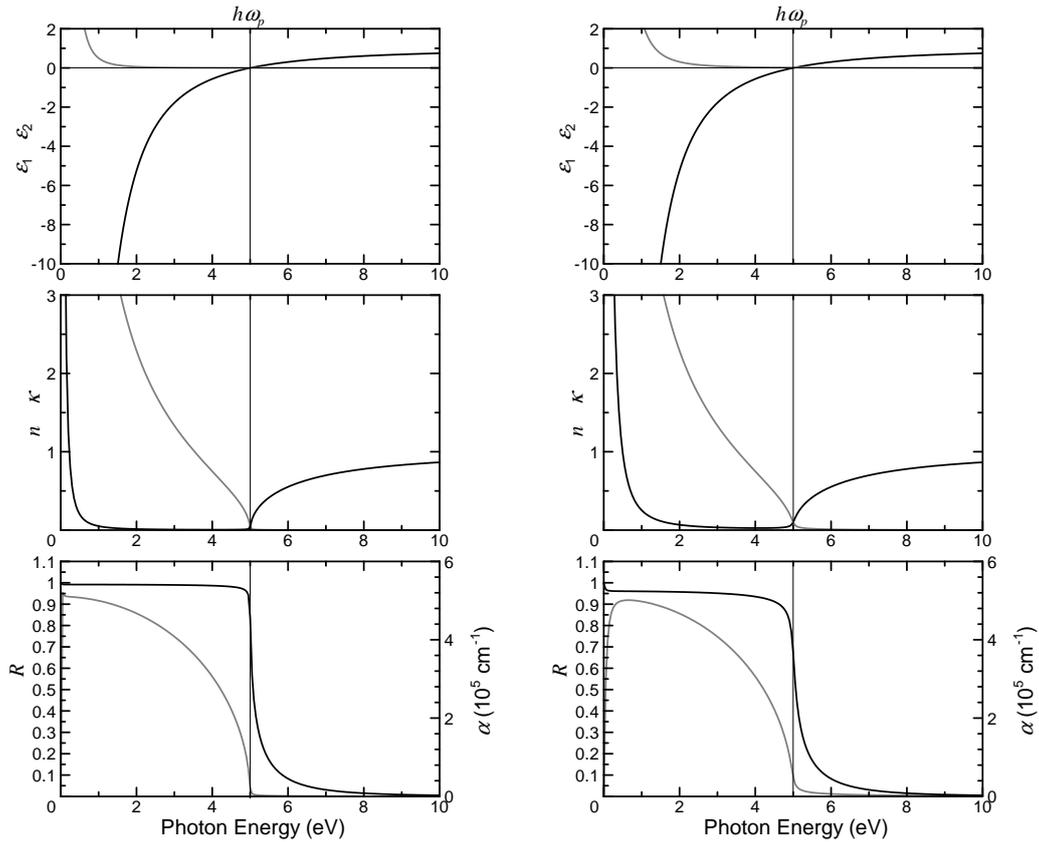


図 6 ドルードモデルによる分散。左は  $\hbar\omega_p = 5 \text{ eV}$ ,  $\hbar/\tau = 0$ , 右は  $\hbar\omega_p = 5 \text{ eV}$ ,  $\hbar/\tau = 0.1 \text{ eV}$  の場合。

振動数（波長）によって屈折率が異なる（そのために位相速度が異なる）ために、各振動数成分は互いに異なる位相速度で伝搬することになる。これは、通常、パルスの広がりをもたらすことになる。また、以下に示すように、パルス全体が位相速度と異なる速度で伝搬することにもつながる。

■群速度 簡単のために、以下では、 $z$  方向に伝搬する平面波を考えよう。スカラー光電場  $E(z, t)$  を単色平面波の重ね合わせ

$$E(z, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dk A(k) e^{i[kz - \omega(k)t]} \quad (1.83)$$

で表す<sup>\*9</sup>。各単色平面波成分  $e^{i[kz - \omega(k)t]}$  が波動方程式 (1.24a) の解であれば、上式も同様に波動方程式の解である。式 (1.83) を式 (1.24a) に代入すると

$$\omega(k) = \frac{c|k|}{n(\omega)} \quad (1.84)$$

という分散関係が得られる。今考えているレーザーパルスの中心周波数を  $\omega_0$ 、それに対応する波数を  $k_0$  として、式 (1.84) の  $\omega(k)$  を  $k = k_0$  のまわりでテイラー展開しよう。

$$\omega(k) = \omega_0 + \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k_0} (k - k_0) + \frac{1}{2} \left. \frac{d^2\omega}{dk^2} \right|_{k_0} (k - k_0)^2 + \dots \quad (1.85)$$

<sup>\*9</sup> ある時間（例えば  $t = 0$ ）でこの式を見ると、 $A(k)$  が  $E(z, 0)$  のフーリエ変換になっていることがわかる。 $|A(k)|^2$  のことを、光電場  $E(z, t)$  のフーリエ（パワー）スペクトルとよぶ。

まず最初に、式 (1.85) の第 3 項以降を落として式 (1.83) に代入してみよう。

$$\begin{aligned} E(z, t) &\simeq e^{-i\omega_0 t} \int_{-\infty}^{\infty} dk A(k) \exp\left\{i \left[ kz - \frac{d\omega}{dk} \Big|_{k_0} (k - k_0)t \right]\right\} \\ &= e^{i(k_0 z - \omega_0 t)} \int_{-\infty}^{\infty} dk A(k) \exp\left\{i \left[ z - \frac{d\omega}{dk} \Big|_{k_0} t \right] (k - k_0)\right\} \end{aligned} \quad (1.86)$$

この式の右辺は  $z - (d\omega/dk)_{k_0} t$  のみの関数なので、

$$E(z, t) \simeq e^{i(k_0 z - \omega_0 t)} \mathcal{E}\left(z - \frac{d\omega}{dk} \Big|_{k_0} t\right) \quad (1.87)$$

と書ける。この式は、レーザパルスがその包絡関数  $\mathcal{E}$  の形を変えずに伝搬すること、そして、パルスの伝搬速度が

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} \Big|_{k_0} \quad (1.88)$$

で与えられることを示している。これをレーザパルスの**群速度 (group velocity)** とよぶ<sup>\*10</sup>。一般に、 $(d\omega/dk)_{k_0} \neq \omega_0/k_0$  なので、群速度と位相速度は異なる。

分散関係 (1.84) は

$$k = n(\omega) \frac{\omega}{c} \quad (1.89)$$

と書き換えられる。これから容易に、位相速度は

$$v_p = \frac{\omega}{k} = \frac{c}{n(\omega)} \quad (1.90)$$

で与えられること、そして、群速度は

$$v_g = \left(\frac{dk}{d\omega}\right)^{-1} = \frac{c}{n + \omega(dn/d\omega)} \quad (1.91)$$

で与えられることが導ける。通常の正常分散領域 ( $dn/d\omega > 0$ ) では、群速度は位相速度よりも小さくなる。図 7 に石英の屈折率  $n$  と群速度屈折率

$$n_g \equiv \frac{c}{v_g} = n + \omega \frac{dn}{d\omega} = n - \lambda \frac{dn}{d\lambda} \quad (1.92)$$

の波長依存性を示す。約  $1.27 \mu\text{m}$  よりも長波長側では、短波長 (高周波) になるほど群速度が大きくなることに注目せよ。

■**群速度分散** ここまでは、媒質の屈折率分散があまり大きくないか、あるいはパルスの時間幅があまり狭くないとして、式 (1.85) の第 3 項を無視して議論を進めてきた。これまでの議論から容易に推測できるように、この第 3 項以降無視できなくなると、レーザパルスの広がりが見られることになる。この高次の項による効果を**群速度分散 (group-velocity dispersion, GVD)** とよぶ。これによって、パルス幅の広がりだけでなく周波数チャーピングなども生じる。

以下では、簡単のために、ガウシアン状のパルス広がりを有する光パルスの伝搬について調べよう。入力パルスが

$$\begin{aligned} E(z=0, t) &= e^{-\alpha t^2} e^{-i\omega_0 t} \\ &= e^{-i\omega_0 t} \int_{-\infty}^{\infty} d\Omega F(\Omega) e^{-i\Omega t} \end{aligned} \quad (1.93)$$

<sup>\*10</sup> これに対して、単色波の等位相面の伝搬速度  $v_p = \omega/k$  を**位相速度 (phase velocity)** とよんで区別する。

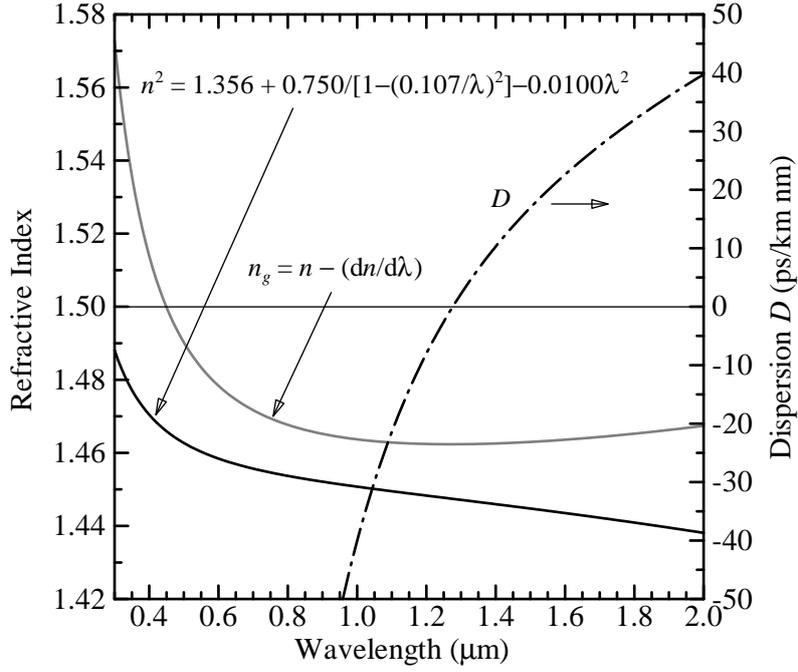


図7 石英の屈折率  $n$ ，群速度屈折率  $n_g = n - \lambda \left( \frac{dn}{d\lambda} \right)$ ，群速度分散  $D$  の波長依存性。

の場合を考える。ここで、 $F(\Omega)$  はガウシアン状の包絡関数  $e^{-\alpha t^2}$  のフーリエ変換

$$F(\Omega) = \sqrt{\frac{1}{4\pi\alpha}} e^{-\Omega^2/4\alpha} \quad (1.94)$$

である。式 (1.93) は角振動数  $\omega_0 + \Omega$  の単色波の重ね合わせであり、距離  $z$  だけ伝搬した後のパルス形状を求めるにはこの単色波成分にそれぞれ  $\exp[ik(\omega_0 + \Omega)z]$  をかけてもう一度重ね合わせればよい。波数  $k(\omega_0 + \Omega)$  を  $\omega_0$  のまわりでテイラー展開し、

$$k(\omega_0 + \Omega) = k(\omega_0) + \left. \frac{dk}{d\omega} \right|_{\omega_0} \Omega + \frac{1}{2} \left. \frac{d^2k}{d\omega^2} \right|_{\omega_0} \Omega^2 \quad (1.95)$$

と第3項まで残すことにしよう。これを用いて  $z > 0$  での光電場を計算すると

$$\begin{aligned} E(z, t) &= e^{-i\omega_0 t} \int_{-\infty}^{\infty} d\Omega F(\Omega) e^{-i\Omega t} e^{ik(\omega_0 + \Omega)z} \\ &= e^{i(k_0 z - \omega_0 t)} \int_{-\infty}^{\infty} d\Omega F(\Omega) \exp \left\{ -i\Omega \left[ \left( t - \frac{z}{v_g} \right) - \frac{1}{2} \frac{d}{d\omega} \left( \frac{1}{v_g} \right) \Omega z \right] \right\} \end{aligned} \quad (1.96)$$

となる。ここで、 $k_0 = k(\omega_0)$  である。光電場の包絡関数は

$$\mathcal{E}(z, t) = \int_{-\infty}^{\infty} d\Omega F(\Omega) \exp \left\{ -i\Omega \left[ \left( t - \frac{z}{v_g} \right) - a\Omega z \right] \right\} \quad (1.97)$$

で与えられ、パルス幅の広がりパラメータ

$$a = \frac{1}{2} \frac{d^2k}{d\omega^2} = \frac{1}{2} \frac{d}{d\omega} \left( \frac{1}{v_g} \right) = -\frac{1}{2v_g^2} \frac{dv_g}{d\omega} \quad (1.98)$$

で表される **1 次**の群速度分散によって引き起こされる。式 (1.97) に式 (1.94) を代入して積分を実行

すると,

$$\begin{aligned}\mathcal{E}(z, t) &= \sqrt{\frac{1}{4\pi\alpha}} \int_{-\infty}^{\infty} d\Omega \exp\left\{-\left[\Omega^2\left(\frac{1}{4\alpha} - iaz\right) - i\left(t - \frac{z}{v_g}\right)\Omega\right]\right\} \\ &= \frac{1}{\sqrt{1 + i4a\alpha z}} \exp\left[-\frac{(t - z/v_g)^2}{1/\alpha + 16a^2\alpha z^2}\right] \exp\left[-i\frac{4az(t - z/v_g)^2}{1/\alpha^2 + 16a^2z^2}\right]\end{aligned}\quad (1.99)$$

が得られる。これから、距離  $L$  だけ伝搬した後のパルス強度 ( $\propto |\mathcal{E}|^2$ ) の半値全幅が

$$\tau(L) = \sqrt{2 \ln 2} \sqrt{\frac{1}{\alpha} + 16a^2\alpha L^2} = \tau(0) \sqrt{1 + \left[\frac{(8 \ln 2)aL}{\tau^2(0)}\right]^2}\quad (1.100)$$

となるのがただちにわかる。 $|aL| \gg \tau^2(0)$  が成り立つ十分遠方では,

$$\tau(L) \simeq \frac{(8 \ln 2)aL}{\tau(0)}\quad (1.101)$$

となる。

実用上は、群速度分散を表すパラメータとして,

$$D \equiv \frac{1}{L} \frac{dT}{d\lambda} = \frac{d}{d\lambda} \left( \frac{1}{v_g} \right) = -\frac{2\pi c}{\lambda^2} \left( \frac{d^2k}{d\omega^2} \right)\quad (1.102)$$

が用いられる (光ファイバーなどで通常用いられる単位は ps/km·nm である)。ここで、 $T$  は長さ  $L$  の距離をパルスが伝搬するのに要する時間である。 $D = -(2\pi c/\lambda^2)a$  なので、式 (1.100) は

$$\tau(L) = \tau(0) \sqrt{1 + \left( \frac{2 \ln 2}{\pi c} \frac{\lambda^2 DL}{\tau^2(0)} \right)^2}\quad (1.103)$$

となる。 $DL$  を ps/nm,  $\lambda$  を  $\mu\text{m}$ ,  $\tau$  を ps 単位で表記すると,

$$\tau(L) = \tau(0) \sqrt{1 + \left( \frac{1.47 \lambda^2 DL}{\tau^2(0)} \right)^2}\quad (1.104)$$

である。

ここで、もう一度、式 (1.96) に戻ろう。式 (1.96) に式 (1.99) を代入すると,

$$\begin{aligned}E(z, t) &= e^{i(\omega_0 t - k_0 z)} \mathcal{E}(z, t) \\ &= \frac{1}{\sqrt{1 + i4a\alpha z}} \exp\left[-\frac{(t - z/v_g)^2}{1/\alpha + 16a^2\alpha z^2}\right] \exp\left[i(\omega_0 t - k_0 z) + i\frac{4az(t - z/v_g)^2}{1/\alpha^2 + 16a^2z^2}\right]\end{aligned}\quad (1.105)$$

が得られる。振動の位相は

$$\phi(z, t) = \omega_0 t - k_0 z + \frac{4az(t - z/v_g)^2}{1/\alpha^2 + 16a^2z^2}\quad (1.106)$$

となっているので、“ある瞬間の” 角振動数は

$$\omega(z, t) = \frac{\partial \phi}{\partial t} = \omega_0 + \frac{8az}{1/\alpha^2 + 16a^2z^2} (t - z/v_g)\quad (1.107)$$

であることがわかる。周波数はもはや定数でなく、**チャープ (chirp)** していることがわかる。 $a < 0$  ( $D > 0$ ) の分散性ファイバ中を伝搬したパルスの高周波成分は低周波成分よりも群速度が大きいため早く到着し、観測周波数は時間とともに線形に低下する。

## 1.5 屈折率の測定法

材料の光学応用を考える場合、その材料の屈折率の値を（多くの場合波長分散まで含めて）正確に知っておく必要がある。材料の屈折率測定は極めて古典的な主題であるが、高い精度で屈折率を決定することは実は大変に難しい。以下では、固体試料を対象とした代表的な屈折率測定法を列挙する。利用できる試料の形状、要求される屈折率の精度、光学的異方性の有無や屈折率を知る必要のある波長域など、様々な要素を考慮して適切な測定法を選択する必要がある。

### 1.5.1 クラマース・クローニツヒ解析

強度反射スペクトルの測定結果から屈折率と消衰係数の波長分散を求める巧妙な方法である。パワー反射率  $R$  と振幅反射率の位相  $\phi_r$  の間には

$$\phi_r(\omega) = -\frac{\omega}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{\ln R(\omega')/R(\omega)}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega' \quad (1.108)$$

の関係が成り立つ。これをクラマース・クローニツヒ (Kramers-Kronig) の関係式という。実験的に得られた垂直入射光に対する反射スペクトル  $R(\omega)$  からこの積分変換 (クラマース・クローニツヒ変換, あるいは KK 変換という) で  $\phi_r(\omega)$  を計算し,

$$n = \frac{1 - R}{1 + R + 2\sqrt{R} \cos \phi_r} \quad (1.109a)$$

$$\kappa = \frac{2\sqrt{R} \sin \phi_r}{1 + R + 2\sqrt{R} \cos \phi_r} \quad (1.109b)$$

の関係をを用いて複素屈折率の波長分散を求めることができる。ただし、実験的に測定できる反射スペクトルは有限の振動数範囲であるのに、上式の積分範囲は  $0 \sim \infty$  であるので、なんらかの方法で反射スペクトルを外挿する必要がある。この任意性が残るため、光学材料の屈折率の高精度な測定法として用いられることはあまりなく、物性研究の分野での利用が中心となっている。

しかしながら、他の方法では吸収係数が小さすぎて精度良く決定できない場合に、

$$n(\omega) - 1 = \frac{2}{\pi} P \int_0^{\infty} \frac{\omega' \kappa(\omega')}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega' \quad (1.110a)$$

$$\kappa(\omega) = -\frac{2}{\pi} P \int_0^{\infty} \frac{\omega n(\omega')}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega' \quad (1.110b)$$

の関係式 (これもクラマース・クローニツヒの関係式とよばれる) を用いて、広範囲で測定された屈折率データから特定波長域の消衰係数を補正する手法は、実用的な光学材料に対しても有効である。

### 1.5.2 臨界角法

測定対象物質から参照プリズムへの屈折光の臨界角の測定値から被測定物質の屈折率を決定する方法である。市販の装置が容易に入手でき、比較的手軽な方法である。図 8 に示すように、参照プリズムの配置の異なる 2 種類の測定法がある。図 8(a) はアッペ屈折計、図 8(b) はプルフリッヒ屈折計とよばれる。いずれも、屈折率が事前にわかっているプリズム (屈折率  $n_p$ ) の上に屈折率  $n$  の被測定物質を密着させ、わずかに集光した光を試料側からプリズムとの界面へすれすれに入射する。臨界角  $\theta_c$  よりも大きな角度で出射する光は存在しないので、プリズム出射端から観察すると臨界角に相当する

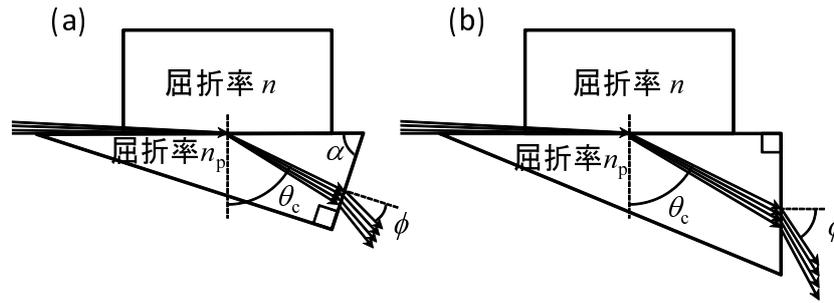


図8 臨界角を用いた屈折率測定法。(a)はアッペ屈折計、(b)はプルフリッヒ屈折計である。

角度に明瞭な境界を持つ明暗のコントラストが観測できる。プリズムの出射端から観測される明暗境界の角度  $\phi$  から試料の屈折率が決定できる。アッペ屈折計では、

$$n = \sqrt{n_p^2 - \sin^2 \phi} \sin \alpha \pm \sin \phi \cos \alpha \quad (1.111)$$

プルフリッヒ屈折計では、

$$n = \sqrt{n_p^2 - \sin^2 \phi} \quad (1.112)$$

である。ここで、 $\alpha$  は参照プリズムの頂角であり、式 (1.111) での符号は、出射光がプリズム出射面法線よりも試料よりに屈折するときには +、反対に屈折するときには - をとる。

臨界角を利用する原理からあきらかなように、 $n_p > n$  でなければならないので、参照プリズムに用いる材料の屈折率よりも高い屈折率を有する試料の測定ができないという制限がある。しかし、装置が簡便で測定が容易な上、十分注意して測定をおこなえば  $10^{-3} \sim 10^{-4}$  という比較的高い精度での測定が可能のため、有用な測定法である。上記の2種類の屈折計は精度などにおいてほとんど差はないが、アッペ屈折計の方が小型化に適しているため、市販の簡易屈折率計は多くがアッペ屈折計である。波長 589 nm での屈折率 ( $n_D$ ) の測定を中心にしたものが多いが、適切な単色光源を用いれば屈折率の波長分散も正確に測定できる。また、異方性試料の場合も、試料の方位と入射光の偏光を適切に設定することで測定が可能となる。

### 1.5.3 最小偏角法

プリズム状に加工した試料をゴニオメータに載せ、試料の側面から光を入射しながら入射角を変えて、入射光と出射光のなす角（偏角）の最小値を決定することによって屈折率を測定する。偏角の最小値  $\theta_m$  が得られているときには、図9のように光路はプリズム頂角の2等分線に対して対称となる。試料の屈折率は

$$n = \frac{\sin [(\theta_m + \alpha)/2]}{\sin(\alpha/2)} \quad (1.113)$$

で与えられる。ここで、 $\alpha$  はプリズムの頂角である。通常、高精度のゴニオメータとコリメータ、テレスコープを装備した装置が測定に用いられる。同じ装置を使ってオートコリメーション法で頂角の精密な測定もおこなえる。試料の入出射面の平坦性と頂角測定の精度がこの方法による屈折率測定の精度を決定することになる。よく準備された試料で注意深く測定をおこなえば、 $10^{-5}$  程度までの極めて高い精度が達成できる。ただし、 $10^{-5}$  程度の精度まで要求する場合には、測定時の雰囲気（空気）の屈折率を考慮して補正をおこなう必要がある。

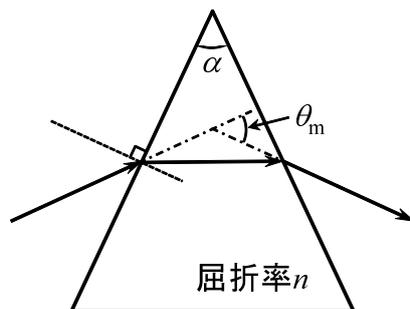


図9 最小偏角法の概略。偏角  $\theta$  が最小になる配置では、光路はプリズムの頂角の二等分線に対して対称となる。

最小偏角法は固体の屈折率測定法として最も精度の高い方法であり、多くの材料の屈折率の標準値はこの方法で測定されてきた。測定できる屈折率の大きさに制限がないのも重要な長所である。測定光源に様々な波長の単色光を用いることで屈折率の波長分散も測定できる。異方性試料の場合も、適切な方位の試料に対して適切な偏光配置で測定すればよい。高品質なプリズム状試料の作製が可能ならば、屈折率測定には最小偏角法を用いるべきである。

#### 1.5.4 液侵法

上記の二つの方法では大型の試料の加工が必要となる。あまり大きな試料が得られない場合などに用いられる屈折率測定法に液侵法がある。液体中に置いた固体試料を透過配置で観察すると、液体と固体の屈折率が違うときには固体試料と液体の境界線に沿ってベッケ線とよばれる明るい線が観測される。液体の屈折率が固体のそれと一致すると、このベッケ線が見えなくなる。種々の屈折率の侵液を準備しておき、ベッケ線が見えなくなる侵液を特定することができれば、その侵液の屈折率が試料の屈折率ということになる。侵液と試料固体の屈折率の大小は、観察に用いる顕微鏡の鏡頭、あるいは試料ステージを上下させたときのベッケ線の移動方向から判別できる。1.3~2.1 程度までの様々な屈折率を有する屈折率侵液が市販されており、これをそのまま使うこともできるが、高屈折率のものは着色しており短波長域では使用できない、また、一般に高屈折のものは毒性が強いという難点がある。精度の高い測定をするためにはこれら市販の屈折液を濃度を変えて混合して、さらに測定精度を上げることもできる。侵液の屈折率はアッペ屈折計などで測定できる。この方法の測定精度は意外に高く、辛抱強く測定を繰り返せば  $10^{-4}$  程度の精度も達成できる。光源の波長を変えれば屈折率の波長分散も測定できるし、試料の方位が特定できれば、偏光顕微鏡を用いて異方性試料の測定も可能である。

#### 1.5.5 干渉法

薄膜状試料に対して透過スペクトル、あるいは反射スペクトルの測定をおこなうと、試料内での光の多重反射干渉効果によって、図 10(a) のようなフリンジ状のスペクトルが得られる。厚さ  $t$  で屈折率  $n(\lambda)$  の透明な（フリースタンディングな）薄膜状試料の垂直入射光に対する透過率  $T(\lambda)$  と反射率  $R(\lambda)$  は次式で与えられる。

$$T(\lambda) = \frac{(1 - R_0)^2}{(1 - R_0)^2 + 4R_0 \sin^2 [2\pi n(\lambda)t/\lambda]} \quad (1.114)$$

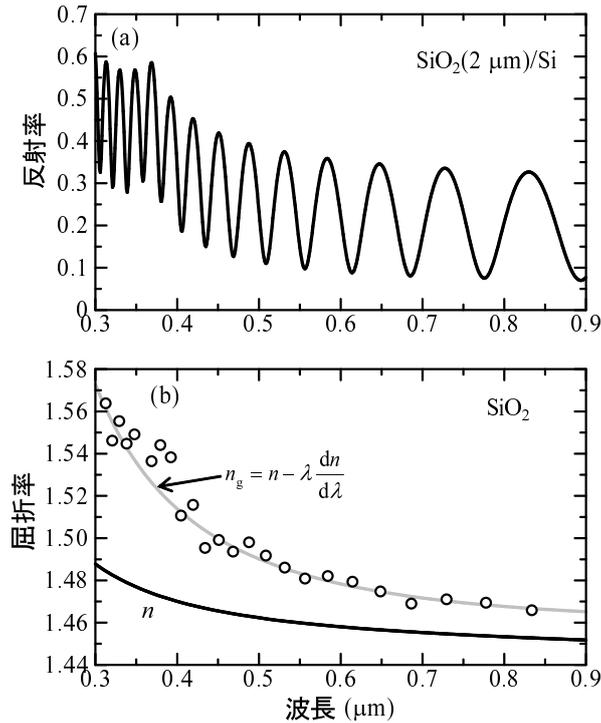


図 10 Si 基板上の 2.0  $\mu\text{m}$  厚  $\text{SiO}_2$  薄膜の反射スペクトル (a) と  $\text{SiO}_2$  の屈折率 (b)。 (b) 図中の白丸は (a) の反射スペクトルの極大、極小点の波長から式 (7) を用いて求めた屈折率。

$$R(\lambda) = \frac{4R_0 \sin^2 [2\pi n(\lambda)t/\lambda]}{(1 - R_0)^2 + 4R_0 \sin^2 [2\pi n(\lambda)t/\lambda]} \quad (1.115)$$

ここで、 $R_0 = [(n(\lambda) - 1)/(n(\lambda) + 1)]^2$  は試料表面の反射率である。透過率の極大を与える（反射率の極小を与える）波長  $\lambda_m$  では

$$\frac{2\pi}{\lambda_m} n(\lambda_m)t = m\pi \quad (m \text{ は自然数}) \quad (1.116)$$

が成り立つので、何らかの方法で干渉の次数  $m$  を決定することができれば、その波長  $\lambda_m$  での屈折率  $n(\lambda_m)$  を求めることができる。ただし、非常に薄い薄膜試料の場合を除いて、この干渉次数  $m$  を誤りなく知るのは容易ではない。 $m$  の誤差はそのまま屈折率の誤差に直結するので、干渉次数の決定は慎重におこなう必要がある。

干渉次数がわからなくとも、試料が十分厚くて隣り合う極大波長の間隔がそれほど広くない場合には、両極大波長における屈折率が同一であるとみなして

$$n = \frac{\lambda_m \lambda_{m+1}}{2(\lambda_m - \lambda_{m+1})t} \quad (1.117)$$

の式を用いて屈折率を求めることがしばしばおこなわれる。しかし、屈折率の波長分散が小さい場合でも、この方法で決定した屈折率は正しくない。実際、式 (1.117) から求まる屈折率は、通常の屈折率  $n$ （位相屈折率ともよばれる）ではなく、

$$n_g = n - \lambda \frac{dn}{d\lambda} \quad (1.118)$$

で与えられる群屈折率である。図 10(b) に、Si 基板上  $\text{SiO}_2$  薄膜の反射スペクトル（図 10(a)）から式 (1.117) を用いて決定した屈折率を白丸でプロットしたが、確かにこれは群屈折率になってしまっ

ている。この問題を克服するために、干渉法によって求めた群屈折率から屈折率（位相屈折率  $n$  を推定する方法がいくつか考案されている。しかしながら、屈折率の波長分散に適切なモデル（セルマイヤーやコーシーの分散式など）を仮定する必要がある、そのモデルの妥当性や得られた値の精度などについて慎重な考慮が必要である。

なお、**図 10(b)** の白丸のデータは極めてばらつきが大きいことに注目していただきたい。このデータは波長精度  $\delta\lambda = 0.2 \text{ nm}$  で  $\lambda_m$  を読み取って求めたものであるが、隣り合う極値波長間隔  $\lambda_m - \lambda_{m+1}$  が波長読み取り精度  $\delta\lambda$  に比べてそれほど大きくないことがこの誤差の一因である。また、短波長側では基板材料である Si の複素屈折率スペクトルの形状を反映した構造が現れており、これも干渉法による屈折率決定の誤差を大きくしている。屈折率測定法として干渉法を用いる場合には、こうした数々の制約をよく理解して利用すべきである。

異方性試料の場合、適切な直線偏光の光を使うことで面内の異方性は問題なく測定できる。しかし、表面に垂直な電場成分を持つ偏光に対する屈折率の測定は難しい。p 偏光の斜め入射光を使えば、原理的には測定可能ではあるが、精度を高めるのは容易ではない。

この方法は、薄膜状試料に対する最も簡便な屈折率測定法であるが、試料の厚さ  $t$  を事前に別な方法で決定しておかなければならない点も泣きどころの一つである。 $t$  の測定精度がそのまま屈折率の測定精度の上限を決めてしまうが、一般に、薄膜試料の膜厚測定の精度は通常の屈折率測定に求められる精度と比べてはるかに低い場合が多い。

### 1.5.6 楕円偏光解析法（エリプソメトリ）

十分に平滑な表面の試料に偏光を斜めに入射して反射光の偏光状態を調べることによって試料の屈折率を知ることができる。反射光は一般に楕円偏光となるので、この方法を楕円偏光解析法（エリプソメトリ）と、この方法に基づいた測定装置をエリプソメータとよぶ。入射光の偏光のさせかたや反射光の偏光状態をどのように評価するかで種々の異なる測定法が開発されているが、エリプソメトリの基本的な原理は、

$$\frac{r_p}{r_s} = \tan \psi \exp(i\Delta) \quad (1.119)$$

で与えられる s 偏光と p 偏光の振幅反射率の比を測定することにつぎる。反射楕円偏光の測定をおこなうことで、振幅反射率の絶対値の比  $\tan \psi$  と位相差  $\Delta$  の二つのパラメータを求めることができる点がこの方法の巧妙な点である。一つの測定で二つのパラメータが得られるので、以下のように二つの未知数を同時に決定することができる。

- 不透明バルク試料の場合、複素屈折率の実部  $n$ （屈折率）と虚部  $\kappa$ （消衰係数）を同時に決定できる。
- 透明薄膜単層試料の場合、屈折率  $n$  と膜厚  $t$  が同時に決定できる（基板材料の屈折率は事前に知っておく必要がある）。
- 不透明単層薄膜試料では、事前に膜厚  $t$  がわかっているならば  $n$  と  $\kappa$  が同時に決定できる。

エリプソメトリが特に威力を発揮するのは、薄膜試料の屈折率測定である。上述のように、透明試料ならば膜厚と屈折率が一つの測定で決定できてしまうのが強みではあるが、膜厚は完全に一意に決まるわけではなく、とびとびの候補値から膜厚に関する事前の他の情報に基づいて妥当なものを選び出す必要がある。これを回避するには、測定波長や入射角を変えて複数の測定をおこなえばよい。入射角を変えて複数の測定をおこなえばこの問題は解決できるし、さらに、異方性試料の屈折率測定も

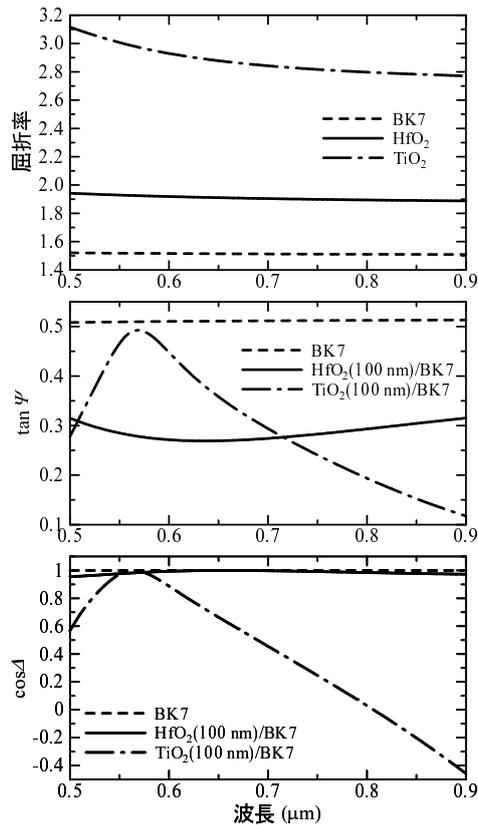


図 11 分光型楕円偏光解析法（エリプソメトリ）のデータの例。光学ガラス BK7 のバルク試料と、BK7 基板上の  $\text{HfO}_2$  薄膜、 $\text{TiO}_2$  薄膜（厚さはいずれも 100 nm）について示した。

この方法で可能となる。最近では、幅広い波長範囲で連続的にエリプソメトリ測定がおこなえる分光エリプソメータが普及し、広く用いられるようになってきている。分光エリプソメトリは膜厚の非一意性の問題を回避できる上、試料の屈折率波長分散を測定できるため、極めて強力な測定法であるといえる。特に、数 100nm 以下（0.1 nm のオーダーまで評価可能な場合がある）の薄膜には極めて有効な測定法である。図 11 に分光エリプソメトリデータの例をしめした。光学ガラス BK7 のデータと、BK7 基板上の 100 nm 厚の  $\text{HfO}_2$  薄膜試料、BK7 基板上の 100 nm 厚の  $\text{TiO}_2$  薄膜試料のデータを比較した。

エリプソメトリの測定とそのデータの解析には細心の注意が必要である。エリプソメトリは nm 程度、あるいはそれ以下のサイズの極薄薄膜や表面、界面の評価に威力を発揮することが知られているが、これは逆に言えば、測定データが試料表面や界面の平坦性や均質性に極めて敏感に依存することを意味している。正確な測定をおこなうためには、表面の平坦性や界面の急峻性、膜厚の均一性などに細心の注意を払う必要がある。また、透明基板上の薄膜試料の測定では、基板裏面からの反射光の影響を排除しなければならない。基板表面と裏面を非平行にして裏面反射光を分離する、裏面を磨りガラス状にして裏面反射光の影響を小さくするなどの処置をしておかないと、意味のある測定が不可能となるので、注意が必要である。

最後に、水を差すようだが、エリプソメトリによる屈折率測定に関しては、過信は禁物であるということを強調しておきたい。上で述べたようにエリプソメトリは極端に表面敏感な測定法なので、得られる屈折率の絶対値の精度には限界があると思っておいた方がよい。実際、エリプソメトリで測定

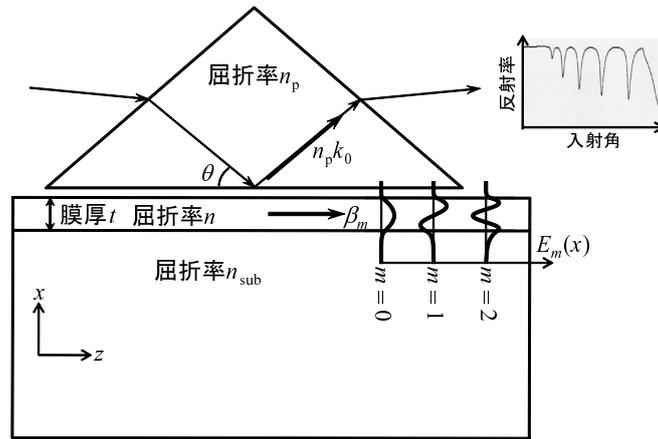


図 12 プリズムカップリング法の概略

された Si の屈折率には最小偏角法の測定値と比較して  $10^{-2}$  に近い差が見られる。

### 1.5.7 プリズムカップリング法

周囲よりも高い屈折率を持つ薄膜中の光は、臨界角以上の角度で界面で全反射して薄膜の中に閉じ込められて定在波として膜中を伝搬する場合がある。これは、導波モードとよばれる（薄膜導波路（スラブ導波路、あるいは平板導波路ともよばれる）はこの導波モードの光を用いる光機能素子である）。十分な厚さの薄膜の場合、膜厚方向の定在波の節の数に応じて異なる伝搬の仕方を示す複数の導波モードが膜中を伝搬できるようになる。これらの導波モードの膜内での伝搬は

$$E(x, z) = E_m(x) \exp(i\beta_m z) \quad (1.120)$$

と記述でき、各導波モードの伝搬定数  $\beta_m$  は

$$\beta_m = \frac{2\pi}{\lambda} n_m^{\text{eff}} = k_0 n_m^{\text{eff}} \quad (1.121)$$

で与えられる。ここで、 $k_0 = 2\pi/\lambda$  は真空中の光の波数である。 $n_m^{\text{eff}}$  は等価屈折率とよばれ、薄膜試料の膜厚  $t$  と屈折率  $n$ 、基板材料の屈折率  $n_{\text{sub}}$  の関数である。伝搬定数  $\beta_m$  を測定することで薄膜の屈折率  $n$  の決定することが可能である。プリズムカップリング法は伝搬定数（ひいては等価屈折率）を高い精度で決定することのできる、優れた測定法である。

プリズムカップリング法の概略を図 12 にしめす。屈折率  $n_p > n^{\text{eff}}$  のプリズムを薄膜試料の表面に近づけると、プリズム内で全反射した光のエバネッセント成分が薄膜試料に接し、

$$k_0 n_p \cos \theta = \beta_m^{\text{eff}} \quad (1.122)$$

の条件が満足されると、薄膜中の導波モードが効率よく励起される。入射角を変えながら反射率を測定すると、式 (1.122) を満足する場合に反射率の低下が観測され、そのときの入射角から  $n_m^{\text{eff}}$  が決定できる。十分に厚い膜の場合、複数の導波モードが異なる入射角で観測でき、それらの  $n_m^{\text{eff}}$  の測定値から薄膜の屈折率  $n$  と膜厚  $t$  を同時に決定できる。

プリズムカップリング法は、ここで取り上げた薄膜屈折率測定法の中で最も精度が高い。均質な試料に対して慎重に測定をおこなえば  $10^{-3}$ 、あるいはそれ以上の精度を出すことができる。基板裏面の反射光が測定結果にほとんど影響しないため、透明基板上の薄膜の測定で特別な配慮が必要ないこ

とや、薄膜中の進行波を利用するので極端な表面・界面感性を持ち合わせないことも屈折率測定法としての長所である。p 偏光入射光を使って TM モードの測定をおこない 3 つ以上のモードが観測できれば、異方性まで含めた屈折率決定が可能になる。また、入射光の波長を変えれば屈折率の波長分散もまったく問題なく測定できる。2 つ以上のモードを保持できないような薄い薄膜には適用できない（可視光領域では、おおざっぱに言って数 100 nm 以上の膜厚が必要であろう）こと、プリズムの屈折率よりも高い屈折率の膜の評価ができないことが制限事項である。

## 1.6 代表的な光学材料

光学材料というと、その光学的性質を利用することのできる材料全般をさし、レーザ材料や非線形光学材料まで含めた膨大な材料群である。ここでは、材料の屈折率を積極的に利用する各種デバイスに使用される光学材料に限ってその代表的なものを概観する。

上記のような意味での狭義の光学材料は、高度の光学的均一性と再現性が実現できるガラス材料と（等方性）結晶材料が主役を務めてきた。最近になって、ガラスの一部を結晶化させた結晶化ガラス（ガラスセラミクスともよぶ）の高品質化が進み、様々な分野での光学応用が進んでいる。ここでは、ガラス材料を中心に議論を進め、結晶性材料について異方性を持たないものについてのみ、ごく一部を紹介するにとどめる。<sup>\*11</sup>

光学材料の最も重要な性質はもちろん光学的性質である。屈折率とその波長分散、吸収・損失特性が代表的な材料の特性指標となる。実用的な材料としては、これらの均一性や再現性、長期安定性なども重要な要求特性となる。なお、光学材料の屈折率波長分散の指標として、以下の式で定義される **アッベ数 (Abbe's number)** が伝統的に用いられている。

$$\nu_d = \frac{n_d - 1}{n_F - n_C} \quad (1.123a)$$

$$\nu_D = \frac{n_D - 1}{n_F - n_C} \quad (1.123b)$$

$$\nu_e = \frac{n_e - 1}{n_{F'} - n_{C'}} \quad (1.123c)$$

ここで、

|          |                                       |
|----------|---------------------------------------|
| $n_d$    | フラウンホーファー線の d 線（波長 587.56 nm）に対する屈折率  |
| $n_D$    | フラウンホーファー線の D 線（波長 589.29 nm）に対する屈折率  |
| $n_F$    | フラウンホーファー線の F 線（波長 486.13 nm）に対する屈折率  |
| $n_C$    | フラウンホーファー線の C 線（波長 656.28 nm）に対する屈折率  |
| $n_e$    | フラウンホーファー線の e 線（波長 546.07 nm）に対する屈折率  |
| $n_{F'}$ | フラウンホーファー線の F' 線（波長 479.99 nm）に対する屈折率 |
| $n_{C'}$ | フラウンホーファー線の C' 線（波長 643.85 nm）に対する屈折率 |

である。同じ  $n_d$  ( $n_D, n_e$ ) で比較すると、アッベ数  $\nu_d$  ( $\nu_D, \nu_e$ ) が大きいほど波長分散は小さい。

光学材料に要求される特性は上記の光学的性質だけではない。耐湿性や耐環境性、薬品に対する耐性、隣接する材料との間の反応性などの化学的性質、硬度や膜としたときの付着力、内部応力などの

<sup>\*11</sup> 異方性結晶は偏光を利用した光学デバイスに多用されるが、これについては後述する。また、光学的等方性・異方性の如何を問わず、半導体結晶の最も重要な光学的応用の一つは発光デバイスであるが、これについても後の章で別に論じる。

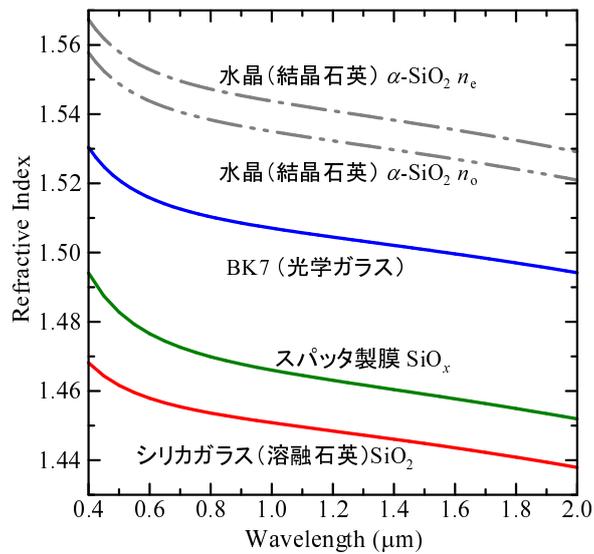


図 13 結晶石英と熔融石英（シリカガラス）、スパッタ製膜シリコン酸化膜、BK7 の屈折率波長分散。スパッタ製膜シリコン酸化膜の屈折率は製膜条件によって大きく変化する。

機械的特性，作製の容易さやプロセス適合度，膜としたときの平坦性や界面の急峻性などのプロセス関係のパラメータなど，数多くの要求を満足しなければならない。

### 1.6.1 無機ガラス系材料

無機ガラスは最も古くから広く用いられてきた光学材料であり，現在でも最も重要なキーマテリアルの一つである。レンズやプリズムなどの光学デバイスの多くはバルクガラスが用いて作製される。大型で高品質，かつ均一であることが要求されるこうしたガラス材料を，特に**光学ガラス (optical glass)** とよぶ。

ガラスは光ファイバの材料としても重要である。

反射防止膜などの光学コーティング用の薄膜材料としても，無機ガラス系材料は重要な役割を果たしている。こうした薄膜光学材料の屈折率などの光学定数は，製膜方法や製膜条件によって様々に変化する（図 13 にシリコン酸化膜（ $\text{SiO}_x$ ）の屈折率分散の一例をしめした）。光学薄膜作製や設計の際には，こうしたプロセス依存性が材料にあることを十分に考慮しておく必要がある。

■**酸化物材料** 酸化物材料は一般に高硬度で化学的に安定なものが多く，最も一般的なガラス材料である。

シリカガラス（石英ガラス，熔融石英，熔融シリカともよばれる）は石英（ $\text{SiO}_2$ ）から作製される高純度ガラスで，最も重要なガラス材料である。紫外域から中赤外域まで透明（光ファイバーを除く通常の光学部品では波長  $0.2\sim 9\ \mu\text{m}$  で使用可能）で低分散であるというめざましい特徴を有し，特に，紫外域で使用されるレンズや窓材として多用される。また，比較的低屈折率であるため， $\text{SiO}_2$  薄膜は後述の高屈折率酸化物薄膜と組み合わせて誘電体多層膜コーティングには無くてはならない材料となっている。

誘電体多層膜コーティングで，低屈折率材料である  $\text{SiO}_2$  と組み合わせて使用される高屈折率材料としては， $\text{TiO}_2$ ， $\text{Nb}_2\text{O}_5$ ， $\text{Ta}_2\text{O}_3$ ， $\text{ZrO}_2$ ， $\text{HfO}_2$  などが使用される。 $\text{TiO}_2$  は可視域で透明な酸化物としては最も屈折率が高い（図 11 参照）が，吸収のために波長  $0.4\ \mu\text{m}$  では使用できないのが泣きどころである。 $\text{Nb}_2\text{O}_5$  と  $\text{Ta}_2\text{O}_3$ ， $\text{ZrO}_2$  はいずれも可視域で 2 を超える屈折率を持ち，高屈折率膜材料と

してしばしば用いられる。HfO<sub>2</sub> は紫外から中赤外域まで透明であるにもかかわらず、かなり高い屈折率を持つ（図 11 参照）ので、これも誘電体多層膜コーティング用材料として広く使用されている。用途によっては中間的な屈折率を持った材料が必要な場合もあり、こうした場合に多用される材料が Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> である。

さて、シリカガラスに関してなんといっても重要なのは、究極まで不純物を減らす超高純度化の技術の進展によってほぼ理論限界の超低損失化（波長 1.55 μm において 0.2 dB/km 以下）が可能である点である。光ファイバ材料には、他の光学部品と比較して桁違いに高い光学的品質（低損失、低分散、高純度、高均質性）、高精度導波路構造作製のためのプロセス、長期信頼性（化学的安定性、高強度）、経済性など、数多くの極めて厳しい要求条件が課される。シリカガラスはこれらの要請をことごとく満足し、長距離光ファイバ通信のキーデバイスの一つである低損失光ファイバの基盤材料となっている。光ファイバのコア部の屈折率を高くするために、GeO<sub>2</sub> をドーピングした SiO<sub>2</sub> が用いられる。センサ応用などを念頭に置いて開発が進められている中赤外用光ファイバの材料としては、中赤外域での吸収が強い SiO<sub>2</sub> に替わって GeO<sub>2</sub> ガラスが検討されている。コア分の高屈折率化には Sb<sub>2</sub>O<sub>5</sub> が使われる。波長 2 μm で損失 4 dB/km の GeO<sub>2</sub>-Sb<sub>2</sub>O<sub>5</sub> 系光ファイバが報告されている。

レンズやプリズムなどのバルク光学部品の材料としては、極めて多数の多成分酸化ガラス（光学ガラス）が利用されている。たとえば、最もメジャーな光学ガラスである BK7 は典型的なホウケイ酸系ガラスで、その主成分である SiO<sub>2</sub> と B<sub>2</sub>O<sub>3</sub> に Na, K, Ba などが数 % ずつ添加されたものである。これ以外にも数百種類にもものぼる光学ガラスが開発され市販されている。光学ガラスの特性は、特定の波長での屈折率（たとえば波長 587.56 nm での屈折率  $n_d$ ）とその波長分散の大きさをあらわすアッペ数（たとえば  $\nu_d$ ）の 2 つのパラメータを使って整理することが一般におこなわれる。図 14 にその一例を示す。一般に、屈折率が高くなると分散も大きくなる（すなわちアッペ数が小さくなる

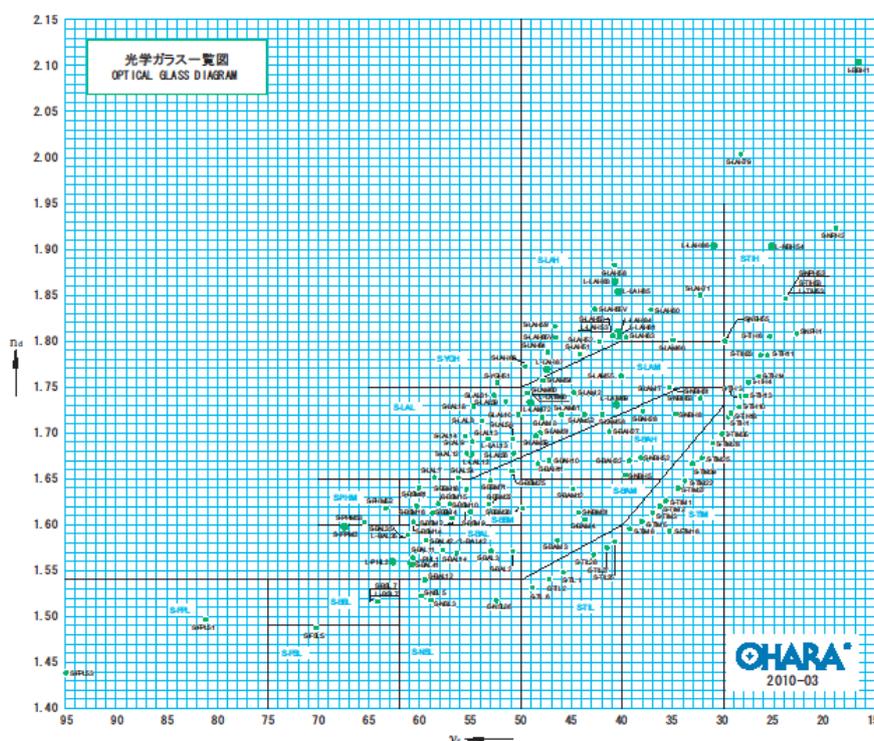


図 14 市販光学ガラスの  $n_d$ - $\nu_d$  ダイアグラム（株式会社オハラの光学ガラスデータ <http://www.ohara-inc.co.jp/jp/product/optical/list/index.html>）

る)という相関関係がある。また、高屈折率になるほど比重が高く(すなわち重く)なるという傾向もある。

■フッ化物材料 陰イオンとしてフッ素を含むフッ化物ガラスは、酸化物ガラスと比較して一般に、屈折率が低く、真空紫外から赤外域の幅広い波長領域で透明であるという特徴を有する。代表的なフッ化物光学材料である  $\text{MgF}_2$  は  $0.11\sim 4\ \mu\text{m}$  で透明で、その屈折率は 1.4 以下である。光学コーティングの低屈折率膜材料として広く用いられている。真空紫外光リソグラフィに用いられる光学コーティングでは酸化物材料が使用できず、 $\text{GdF}_3$  や  $\text{LaF}_3$  (いずれも最短使用可能波長  $\sim 0.2\ \mu\text{m}$ ) などが高屈折率層の材料として  $\text{MgF}_2$  と組み合わせて使用される。

一方、 $\text{ZrF}_4$  は赤外域で良好な透過性を示し、赤外線透過材料として用いられる他、赤外光ファイバの材料として盛んに研究されている。代表的な赤外光ファイバー材料である ZBLAN ( $\text{ZrF}_4\text{-BaF}_2\text{-LaF}_3\text{-AlF}_3\text{-NaF}$ ) は  $0.3\sim 7\ \mu\text{m}$  という広い透過窓を有し、波長  $2\ \mu\text{m}$  以上の領域で  $1\ \text{dB/km}$  を切る低損失ファイバーが既に報告されている。光ファイバー用フッ化物材料のもう一つの重要な特徴は、Er, Pr, Tm などの希土類元素を添加すると高効率発光が得られることにある。これら添加希土類イオンの遷移を利用したファイバーレーザやファイバー光増幅器などのホスト材料としてフッ化物ガラス材料は極めて重要な役割を果たしている。

■カルコゲナイドガラス 酸素の代わりに S, Se, Te を陰イオンとして含むカルコゲナイドガラスは、構成元素が重いための中赤外・遠赤外域での透過性が著しく向上するという際だった特徴を有し、赤外カメラ用のレンズなどに使用されている。赤外光ファイバー材料としても Ge-S 系, As-S 系, As-Ge-Se 系, Ge-Se-Te 系ガラスなどが検討され、波長  $8\ \mu\text{m}$  帯で  $1\ \text{dB/m}$  を切る GeSeTe ファイバーが報告されている。

また、カルコゲナイドガラスは酸化物ガラスやフッ化物ガラスと比較して遙かに高い非線形性を示すので、高機能光集積回路の基盤材料としての研究も活発化している。

### 1.6.2 プラスチック材料

光学材料としてのプラスチックは、無機ガラスと比較して、高耐衝撃性・軽量・低価格・射出成形による生産性の高さ・生体適合性といった特徴を有する。また、分子設計によって屈折率や分散の大きさを制御できる可能性があることも有利な点とされる。光ディスクや各種フラットパネルディスプレイ、光ファイバー、レンズなど、多くの分野で光学プラスチックが活躍している。

最も代表的な光学プラスチックはポリカーボネート(PC)である。PCは汎用エンブレの中で唯一透明であり、CD、DVD、BD(Blu-ray disk)等の光ディスクの基板材料として大量に使用されている。また、PCは光学プラスチックの中では軽量である(比重 1.20)にもかかわらず比較的高い屈折率( $n_D = 1.586$ )を有し、デジタルカメラやリアプロジェクションテレビなどのレンズ用途での利用も拡大している。しかし、PCは分散が大きく(アッペ数  $\sim 30$ )、眼鏡用レンズのような単レンズ・広波長域用途には向かない。PCの用途として重要性が増しているのは液晶ディスプレイである。拡散フィルムや反射シート、バックライト導光板、位相差フィルムにPCが利用されている。

ポリメチルメタクリレート(PMMA)は光学ガラスとしては最も古くから研究・開発がおこなわれた材料で、VTRピックアップレンズに用いられた。PMMAは軽量(比重 1.19)、低屈折率( $n_D = 1.492$ )、低分散(アッペ数 57)を特徴とし、光学プラスチックの中では比較的耐光性にも優れている。また、生体適合性を備えていることから、初期のハードコンタクトレンズの材料として用いられた。PMMAはプラスチック光ファイバー(POF)の材料として重要な役割を果たしてきた。波

長 0.57  $\mu\text{m}$  で 60 dB/km 程度のものが実現されている。さらに低損失化を実現するために、重水素化やフッ素化による赤外吸収の低減がはかられており、完全フッ素化ポリマーコアの POF では波長 1.31  $\mu\text{m}$  で 10 dB/km 程度までの低損失化が実現している。

シクロオレフィンポリマー (COP) は軽量 (比重 1.01) であり、PMMA や PC と比較してはるかに吸湿性が小さく吸湿変形しにくいという特徴があり、 $n_D = 1.53$ ,  $\nu = 56$  というまずまずの光学特性を示すので、レンズやフラットパネルディスプレイ用各種光学部品に広く使用されている。

無機ガラスの場合と同様、プラスチックもフッ素化によって低屈折率化・低分散化が実現できる。また、フッ素系樹脂は紫外線耐性、低酸素劣化という特徴を有し、高い耐候性をしめす。パーフルオロ樹脂の一つである CYTOP (旭硝子) は、 $n_D = 1.34$  と極めて屈折率が低く、かつ  $\nu = 90$  と超低分散であるため、反射防止膜の材料として使用されるようになってきている。また、紫外線耐性の高さを買われて紫外線フォトリソグラフィ工程において無反射コーティングやペリクル膜の材料として使用されている。

眼鏡用レンズは軽量化への要求が特に強く、無機ガラスと比較して比重の低い光学プラスチックの最も重要なターゲットの一つとなっている。眼鏡用レンズは単レンズであるため、複数のレンズを組み合わせた色分散補正ができない。そのため、低分散でかつ (軽量化のためにレンズを薄くする必要がある) 高屈折率であるという、極めて難しい要求仕様が課される。この分野のエポックメイキングな材料はアリルジグリコールカーボネート (ADC) 樹脂 (PPG 社の商品名 CR-39) であった。ADC は屈折率 1.50, アッベ数 58, 比重 1.32 とバランスの取れた材料であり、現在まで広く利用されている。しかしながら ADC は機械的特性に劣り、通常は高硬度シリコン樹脂を用いたハードコーティングが施される。より高屈折率な光学プラスチックの開発が活発に進められ、屈折率 1.6 程度 (アッベ数は 40 前後, 比重 1.35) のチオウレタン系プラスチック (これが現在市販されている高屈折率レンズの主流である) や、さらに高屈折率なエピスルフィド化合物を主成分とするプラスチック (屈折率 1.7 以上, アッベ数 30~40, 比重 1.4~1.5) などが市販眼鏡用レンズに使用されている。

### 1.6.3 金属

金属はそのプラズマ周波数以下で全反射というめざましい光学現象を示すので、ガラス基板等に薄膜としてコートしてミラーとして使用される。 図 15 に代表的な金属の反射スペクトルと光学定数をしめす。Au は赤外域でのミラーとして多用される。他の金属と比べて化学的安定性に優れるが、基板ガラスとの密着性が悪い場合には Cr などの下地層を使用する必要がある。Ag は可視から赤外域にかけて良好な反射特性を示すが、空気中で硫化されて黒ずんでしまうという難点があるので、裏面鏡として使用されることが多い。表面鏡として使用する場合は SiO<sub>2</sub> や MgF<sub>2</sub> などの誘電体材料薄膜で保護する必要がある。Al は紫外から可視、赤外域にかけてよい反射特性をしめす材料で、ミラーに最も広く用いられている。空気中での酸化による特性劣化を避けるために、これも Ag と同様、保護層が必要である。また、Al の反射率は波長 0.8  $\mu\text{m}$  付近で多少低下する (図 15 参照) ので注意が必要である。

金属のもう一つの特徴はその良好な電気伝導性にある。金属薄膜も十分に薄ければある程度の透過率が稼げるので、さほど高い透過率が要求されないような応用では、(半)透明電極材料として使用される。

また、金属の光学定数は誘電体材料とまったく異なる波長分散特性を可視域で示すので、金属薄膜と誘電体薄膜を組み合わせた広帯域無反射コーティングなどに応用された例もある。

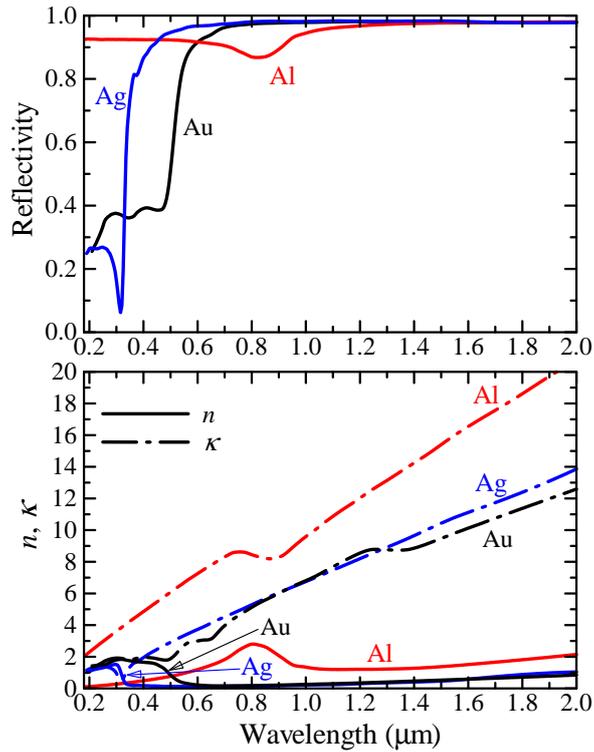


図 15 Al, Au, Ag の反射スペクトルと光学定数

#### 1.6.4 半導体

通常の（発光や受光ではなく、屈折率を利用した光学用途のための）光学材料として見たときの半導体材料の特徴は、高い屈折率を持つことと、赤外域で良好な透過特性を示す材料があることである。図にいくつかの半導体の屈折率波長分散をしめた。Ge（透過波長域 1.7~23 μm）と ZnSe（透過波長域 0.55~15 μm）は中赤外から遠赤外にもおよぶ広い透過窓を有し、赤外光用レンズの材料として用いられる。Ge は特に屈折率が大きくまた硬度も高く、優れた赤外光用レンズ材料である。ZnSe は

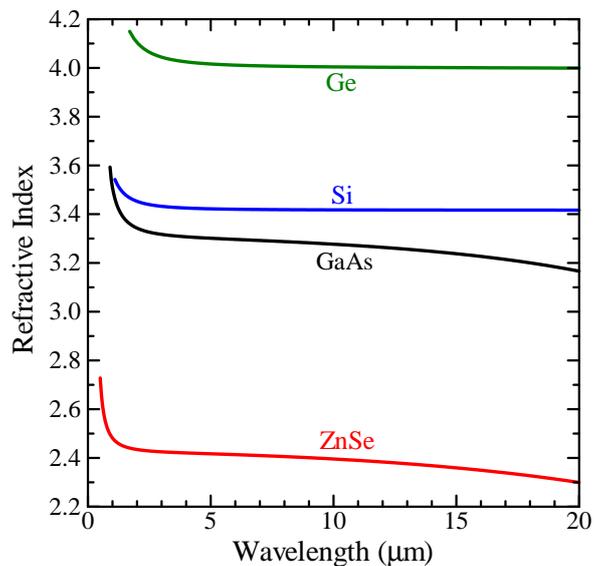


図 16 Ge, Si, GaAs, ZnSe の屈折率波長分散

Ge に比べると屈折率が低いうえに最長使用可能波長も短く、機械的強度に劣るために取り扱いに注意が必要であるが、赤色光を透過するので可視光を用いた光学系調整が可能である点が歓迎される場合も多い。

Si の通常のバルク光学部品としての用途はフィルター程度しかないが、その安定な酸化物である  $\text{SiO}_2$  との屈折率差が極めて大きいことから、 $\text{SiO}_2$  をクラッドとした高屈折率差 Si 細線導波路が作製できるため、これを積極的に用いた微小光学デバイスやそれらを集積化した光集積回路を実現しようという、いわゆるシリコンフォトリソグラフィの研究が現在活発に進められている。

## 1.7 屈折率差を利用した光学デバイス

屈折率差を利用した光学素子（光学部品）として最も代表的なものは、レンズやプリズムなどのバルク光学部品であるが、ここでは、薄膜状の光学材料をベースにした2つの光学デバイス（光学コーティングと光導波路）についてのみ述べることにする。

### 1.7.1 光学コーティング

基板材料の上にそれと異なる屈折率を有する薄膜を、光の波長と同程度、あるいはそれ以下の膜厚でコーティングすると、薄膜中で光の反射と干渉によって薄膜のない裸の基板表面とはまったく異なる光学特性を示すようになる。これを利用して、無反射コーティングや波長選択フィルターなどが作製できる。光学コーティングは、用途に応じて単層の場合だけでなく、透明誘電膜を数層以上積層した誘電体多層膜を用いる場合も多い。

■**反射防止膜** 反射防止膜は光学薄膜の最もポピュラーな応用であり、通常は、垂直入射してくる光の反射率を低くする（反射率 0 が理想であるが、以下で見るようにいつでも実現できるとは限らない）ために光学薄膜を基板表面にコーティングする。

まず、もっとも基本的な反射防止膜である単層膜コーティングについて考えよう。図 17 に示したように、屈折率  $n_s$  の光学材料の表面に屈折率  $n_1$ 、膜厚  $d_1$  の透明単層膜が形成されており（外部（通常は空気）の屈折率は  $n_0$  とする）、ここに波長  $\lambda$  の単色光が入射角  $\theta_0$  で入射したとしよう。境界

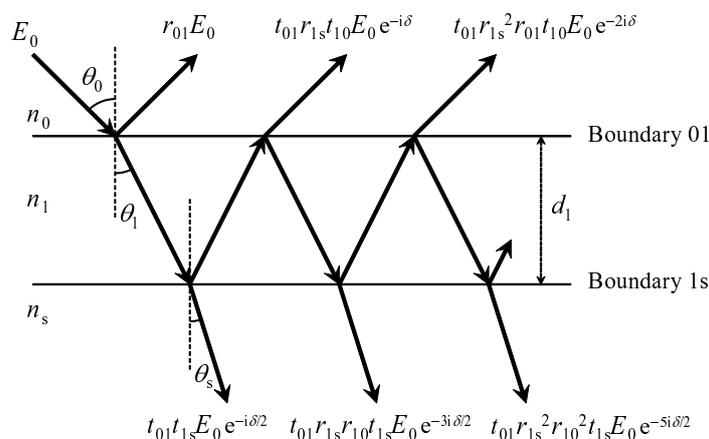


図 17 単層膜コーティング中の光波

面 01 での振幅反射率と振幅透過率は次の式で与えられる。

$$r_{01}^s = \frac{n_0 \cos \theta_0 - n_1 \cos \theta_1}{n_0 \cos \theta_0 + n_1 \cos \theta_1} = -\frac{\sin(\theta_0 - \theta_1)}{\sin(\theta_0 + \theta_1)} \quad (1.124a)$$

$$t_{01}^s = \frac{2n_0 \cos \theta_0}{n_0 \cos \theta_0 + n_1 \cos \theta_1} = \frac{2 \cos \theta_0 \sin \theta_1}{\sin(\theta_0 + \theta_1)} \quad (1.124b)$$

$$r_{01}^p = \frac{n_1 \cos \theta_0 - n_0 \cos \theta_1}{n_1 \cos \theta_0 + n_0 \cos \theta_1} = \frac{\tan(\theta_0 - \theta_1)}{\tan(\theta_0 + \theta_1)} \quad (1.124c)$$

$$t_{01}^p = \frac{2n_0 \cos \theta_0}{n_1 \cos \theta_0 + n_0 \cos \theta_1} = \frac{2 \cos \theta_0 \sin \theta_1}{\sin(\theta_0 + \theta_1) \cos(\theta_0 - \theta_1)} \quad (1.124d)$$

図 17 のように膜中で多重反射したすべての光波の寄与を足しあわせると、この透明単層膜構造の振幅反射率と振幅透過率が得られる。

$$r = \frac{r_{01} + r_{1s} \exp(-i\delta_1)}{1 + r_{01}r_{1s} \exp(-i\delta_1)} \quad (1.125a)$$

$$t = \frac{t_{01}t_{1s} \exp(-i\delta_1/2)}{1 + r_{01}r_{1s} \exp(-i\delta_1)} \quad (1.125b)$$

ここで、 $\delta_1$  は膜内での一往復で生じる位相遅れ

$$\delta_1 = \frac{4\pi}{\lambda} n_1 d_1 \cos \theta_1 \quad (1.126)$$

である。よって、パワー反射率、パワー透過率は

$$R = |r|^2 = \frac{r_{01}^2 + r_{1s}^2 + 2r_{01}r_{1s} \cos \delta_1}{1 + r_{01}^2 r_{1s}^2 + 2r_{01}r_{1s} \cos \delta_1} \quad (1.127a)$$

$$T = 1 - R = \frac{n_s \cos \theta_s}{n_0 \cos \theta_0} \frac{t_{01}^2 t_{1s}^2}{1 + r_{01}^2 r_{1s}^2 + 2r_{01}r_{1s} \cos \delta_1} \quad (1.127b)$$

で与えられる。垂直入射の場合には

$$R = \frac{(n_0^2 + n_1^2)(n_1^2 + n_s^2) - 4n_0 n_1^2 n_s + (n_0^2 - n_1^2)(n_1^2 - n_s^2) \cos \delta_1}{(n_0^2 + n_1^2)(n_1^2 + n_s^2) + 4n_0 n_1^2 n_s + (n_0^2 - n_1^2)(n_1^2 - n_s^2) \cos \delta_1} \quad (1.128a)$$

$$T = \frac{8n_0 n_1^2 n_s}{(n_0^2 + n_1^2)(n_1^2 + n_s^2) + 4n_0 n_1^2 n_s + (n_0^2 - n_1^2)(n_1^2 - n_s^2) \cos \delta_1} \quad (1.128b)$$

となる。図 18 にしめすように、反射率  $R$  は単層膜の光学膜厚  $n_1 d_1$  の周期関数となり、 $n_s > n_1 > n_0$  のときに

$$n_1 d_1 = (2m + 1)\lambda/4 \quad (m : \text{integer}) \quad (1.129)$$

で反射率の極小値

$$R_{\min} = \left( \frac{n_0 n_s - n_1^2}{n_0 n_s + n_1^2} \right)^2 \quad (1.130)$$

が得られる。これが反射防止膜に用いられる。特に、

$$n_1 = \sqrt{n_0 n_s} \quad (1.131)$$

のときに、 $R_{\min} = 0$  とできる (図 18 では  $n_1 = 1.23 \approx \sqrt{n_s}$  がこの場合にあたる)。

式 (1.129) で  $m = 0$  の場合が実用的で、これを  $\lambda/4$  単層コーティングとよぶ。BK7 のような光学ガラスの場合、理想的なコーティング材料の屈折率は  $n_1 = \sqrt{n_s} \approx 1.23$  ということになるが、このよ

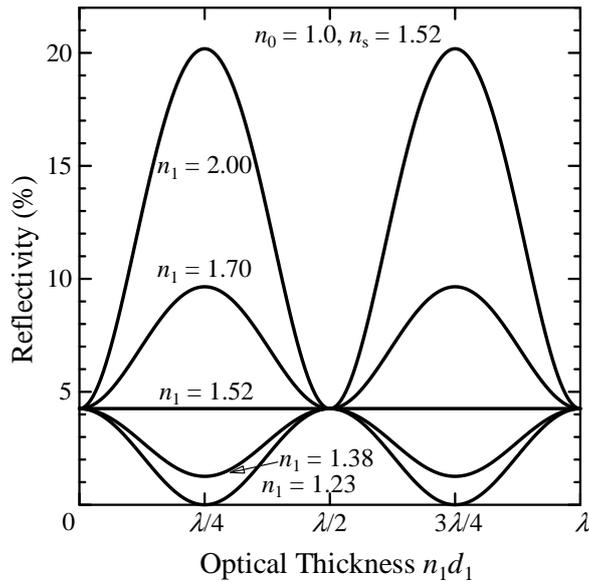


図 18 単層コーティングの反射率と光学膜厚 (BK7 ( $n_s = 1.52$ ) 基板上の単層膜に空気 ( $n_0 = 1.0$ ) から垂直入射 ( $\theta_0 = 0$ ) した場合)

うに低屈折率でかつ耐久性に優れた薄膜材料は存在しない。そこで、通常は安定で比較的低屈折率な  $\text{MgF}_2$  ( $n \sim 1.38$ ) が使用される。BK7 上  $\text{MgF}_2$   $\lambda/4$  単層膜 ( $\lambda/4 @ 0.55 \mu\text{m}$ ) の分光反射スペクトルを図 19(a) にしめす。設計波長である  $\lambda_0 = 0.55 \mu\text{m}$  での反射率は 1.3 % である。また、反射率極小の位相条件 (1.129) は特定の波長でしか満足されないので、このように設計波長以外では反射率が大きくなってしまふ。極小反射率をさらに 0 に近づけたり、低反射率の帯域を広げるために、多層膜構造の光学コーティングが使用される。

多層膜光学コーティングには見通しの良い汎用性のある設計指針があるわけではなく、通常、コンピュータシミュレーションを用いて設計最適化せざるを得ない。しかしながら、2層、あるいは3層

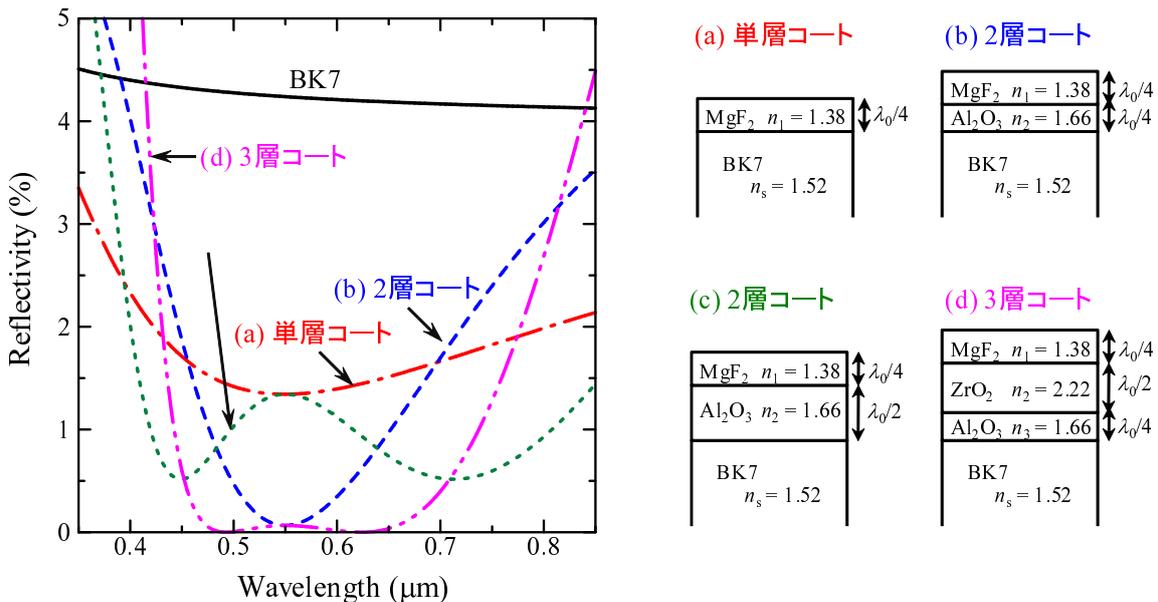


図 19 光学ガラス BK7 上の反射防止コーティングの例。いずれも中心波長  $\lambda_0 = 0.55 \mu\text{m}$  でシミュレートした。

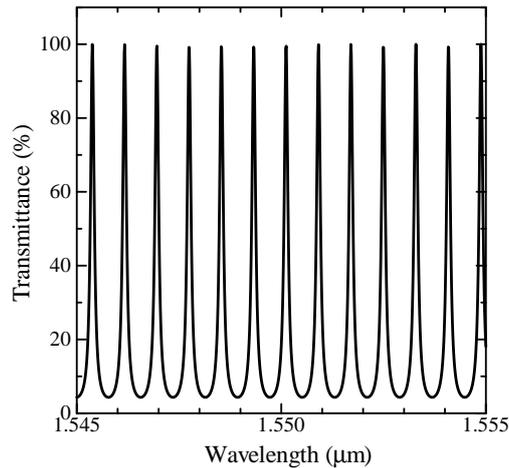


図 20 誘電体多層膜コーティングを用いたソリッドエタロンの透過率スペクトル（1.037 mm 厚の石英スペーサの両端に HLH（H は  $n = 2.3$  の高屈折率膜，L は  $n = 1.44$  の低屈折率膜）3 層  $\lambda/4$  コーティング反射鏡を設けた場合）

程度ならば，ある程度見通しの良い設計も可能である。ここでは， $\lambda/4$  膜のみ，あるいはこれに  $\lambda/2$  膜を加えた 2 層，3 層コーティングの例を紹介する。図 19 にしめすように，適切な屈折率と膜厚の多層膜構造を採用することで，最低反射率をほぼ 0 にしたり，広帯域で低反射率のコーティングを実現することができる。

**■波長選択フィルタ** 波長の変化に対して急峻な透過率・反射率変化を示す多層膜の特性を活かした光学デバイスが波長選択フィルタである。特定の波長でのみ極めて高い反射率をしめす狭帯域反射鏡や，特定の波長のみを透過させる狭帯域バンドパスフィルタ，特定の波長を境にして片側の波長域の光のみを反射，あるいは透過させるエッジフィルタなどがある。

狭帯域バンドパスフィルタの基本は，2 つの  $\lambda/4$  誘電体多層膜ミラーで  $\lambda/2$ （あるいはその整数倍）膜を挟み込んだファブリ-ペローエタロンである。図 20 に波長分割多重（WDM: Wavelength Devision Multiplexing）光ファイバ通信用ソリッドエタロンの分光透過スペクトルの例をしめす。

### 1.7.2 光導波路

異なる屈折率を有する異種誘電体界面での全反射を利用すれば，光を一定の領域に閉じ込め，回折による損失なしに望みの方向に光波を伝搬させることが可能となる。これが光導波路である。光エレクトロニクス分野のキーコンポーネントである半導体レーザや電気光学変調素子，アレイ導波路回折格子などは，いずれも薄膜構造をベースとした典型的な導波路素子である。また，光ファイバーは円形断面構造を有する代表的な光導波路デバイスである。ここでは，薄膜構造をベースにした光導波路について概観する。

**■薄膜導波路における光伝搬** 光導波路の基本となるのは，図 21 のような 3 層構造の薄膜導波路（スラブ導波路，平板導波路ともいう）である。厚さ  $t$  で屈折率  $n_1$  のコア（導波）層を下部から屈折率  $n_2$  の下部クラッド層，上部から屈折率  $n_3$  の上部クラッド層ではさんだ構造（各層は  $yz$  面内に無限に広がっているとす）で，屈折率は  $n_1 > n_2 \geq n_3$  となっているとする。

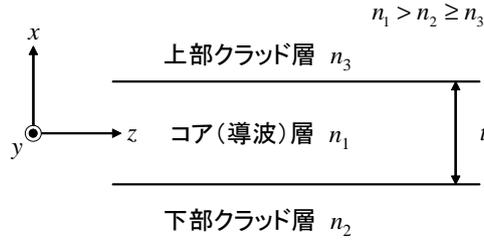


図 21 3層薄膜（スラブ）導波路

この薄膜導波路構造中では、

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}(x) \exp[i(\beta z - \omega t)] \quad (1.132a)$$

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}(x) \exp[i(\beta z - \omega t)] \quad (1.132b)$$

と、 $z$  方向に平面波的に伝搬する伝搬モードが存在し得る。ここで、 $\beta$  はこの伝搬モードの伝搬定数である。 $n_1 k_0 > \beta > n_2 k_0$  ( $k_0 = 2\pi/\lambda$  は真空中での光波の波数ベクトルの大きさ、 $\lambda$  は真空中での波長) の場合は、上下界面で全反射が起き、導波層中に光波のエネルギーが閉じ込められた導波モードが出現する。薄膜導波路中の導波モードには、 $E_y, H_x, H_z$  成分のみが 0 でない TE モードと、 $H_y, E_x, E_z$  成分のみが 0 でない TM モードの 2 つ独立なモードが存在する。これらの導波モードでは、導波層内での多重反射にともなう定在波形成の条件が課されるために、離散的なモードのみが伝搬し得ることになる。この条件を記述する固有値方程式は、各モード次数  $m$  に対して

$$\frac{t}{\lambda} = \begin{cases} \frac{1}{2\pi \sqrt{n_1^2 - n_{\text{eff}}^2}} \left( \tan^{-1} \sqrt{\frac{n_{\text{eff}}^2 - n_2^2}{n_1^2 - n_{\text{eff}}^2}} + \tan^{-1} \sqrt{\frac{n_{\text{eff}}^2 - n_3^2}{n_1^2 - n_{\text{eff}}^2}} + m\pi \right) & \text{(TE モード)} \\ \frac{1}{2\pi \sqrt{n_1^2 - n_{\text{eff}}^2}} \left[ \tan^{-1} \left( \frac{n_1^2}{n_2^2} \sqrt{\frac{n_{\text{eff}}^2 - n_2^2}{n_1^2 - n_{\text{eff}}^2}} \right) + \tan^{-1} \left( \frac{n_1^2}{n_3^2} \sqrt{\frac{n_{\text{eff}}^2 - n_3^2}{n_1^2 - n_{\text{eff}}^2}} \right) + m\pi \right] & \text{(TM モード)} \end{cases} \quad (1.133)$$

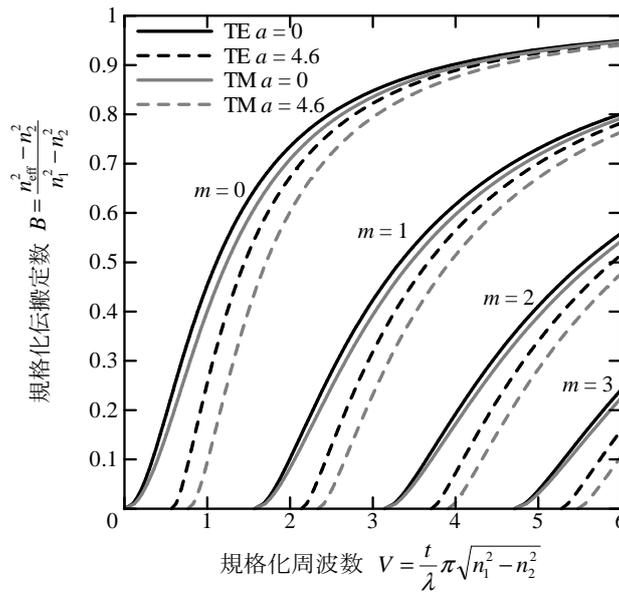


図 22 薄膜導波路のモード分散曲線（対称導波路では  $n_1 = 3.5, n_2 = n_3 = 3.2$  ( $a = 0$ )、非対称導波路では  $n_1 = 3.5, n_2 = 3.2, n_3 = 1.0$  ( $a = 4.6$ ) として計算した）

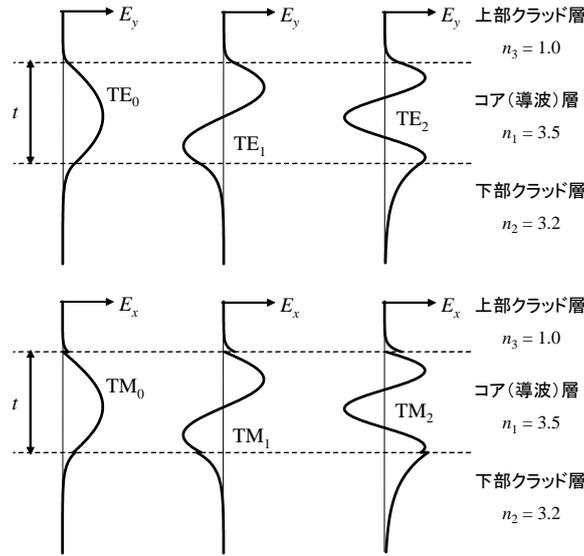


図 23 非対称薄膜導波路 ( $a = 4.6$ ) の導波モードの電界分布 ( $t = \lambda$  ( $V = 4.45$ ) の場合について計算した)

で与えられる。ここで、 $n_{\text{eff}} = \beta/k_0$  は導波モードの等価屈折率である。規格化周波数

$$V = \frac{\pi t}{\lambda} \sqrt{n_1^2 - n_2^2} \quad (1.134)$$

と規格化伝搬定数

$$B = \frac{n_{\text{eff}}^2 - n_2^2}{n_1^2 - n_2^2} \quad (1.135)$$

を用いると、この固有値方程式は

$$2V \sqrt{1-B} = \begin{cases} \tan^{-1} \sqrt{\frac{B}{1-B}} + \tan^{-1} \sqrt{\frac{B+a}{1-B}} + m\pi & (\text{TE モード}) \\ \tan^{-1} \left( \frac{n_1^2}{n_2^2} \sqrt{\frac{B}{1-B}} \right) + \tan^{-1} \left( \frac{n_1^2}{n_3^2} \sqrt{\frac{B+a}{1-B}} \right) + m\pi & (\text{TM モード}) \end{cases} \quad (1.136)$$

と書ける。ここで、 $a = (n_2^2 - n_3^2)/(n_1^2 - n_2^2)$  は導波路の非対称度である。これから得られるモード分散曲線を図 22 に示す。モード次数  $m$  は図 23 のモードプロファイルからわかるように、電場分布関数の節の数に対応している。各導波モードには、それ以上薄いコア層厚ではモードが存在し得ないカットオフ値があり、

$$\frac{t_{\text{cutoff}}}{\lambda} = \begin{cases} \frac{1}{2\pi \sqrt{n_1^2 - n_2^2}} \left( \tan^{-1} \sqrt{\frac{n_2^2 - n_3^2}{n_1^2 - n_2^2}} + m\pi \right) & (\text{TE モード}) \\ \frac{1}{2\pi \sqrt{n_1^2 - n_2^2}} \left[ \tan^{-1} \left( \frac{n_1^2}{n_3^2} \sqrt{\frac{n_2^2 - n_3^2}{n_1^2 - n_2^2}} \right) + m\pi \right] & (\text{TM モード}) \end{cases} \quad (1.137)$$

で与えられる。

■チャンネル導波路素子とその伝搬特性解析 半導体レーザーなどの実用的なデバイスでは薄膜導波路構造だけが利用されることはあまりない。厚み方向だけでなく幅の方向にも屈折率差を設けて光を 2 次元方向から閉じ込めるチャンネル導波路構造が用いられる。チャンネル導波路では、もはや、純粋な TE モード TM モードは存在せず、伝搬モードはハイブリッドモードとなる。チャンネル導波路の伝搬モードは、解析的に厳密解を求めることができない。

チャンネル導波路の導波モードを解析的に近似計算する方法として、マーカティリ (Marcatili) の方法や等価屈折率法などの手法があるが、いずれもカットオフ付近での解析に向かない、拡散導波路のような構造への対応が困難である（後者はさらに、幅、厚み方向の閉じ込めの差が大きい場合にしか適用できない）など、制限が多い。チャンネル導波路に関する汎用性の高い導波モード解析法として、級数展開に基づく点整合法、モード整合法、波動整合法 (WMM) などが提案されている。また、さらに汎用性が高く高精度の解析手法として、有限要素法 (FEM) や有限差分法 (FDM) などの数値計算手法が多用される。これらの手法は、任意の屈折率分布をもつ導波路の解析が可能である、異方性も取り込めるなど、きわめて有用である。これらの解析法は、いずれも、光の伝搬方向に一樣な断面構造を有する導波路を対象としたものである。アレイ導波路回折格子や方向性結合器など、多くの光機能素子では曲がりやテーパが設けられており、そうした素子中を伝搬する光の挙動を調べるにはまったく別な手法が必要となる。ビーム伝搬法 (BPM) はそのような目的で開発されたきわめて強力な解析手法である。また、最近では、計算機能力の大幅な向上により、有限差分時間領域 (FDTD) 法も光導波路素子の動作解析に用いることが現実的になった。

## 2 偏光と異方性光学材料

### 2.1 偏光

#### 2.1.1 直線偏光・円偏光・楕円偏光

電場ベクトル  $E$  の振動方向が規則的になっている光を**偏光**あるいは**偏った光 (polarized light)** という。電場ベクトルが一定の平面内を振動するような偏光を**直線偏光**の光という。<sup>\*12</sup>一般的には、 $z$  方向に伝搬する平面波の場合、

$$E_x = A_x \cos(kz - \omega t + \phi_x) \quad (2.1a)$$

$$E_y = A_y \cos(kz - \omega t + \phi_y) \quad (2.1b)$$

という光の存在が許される。この式から、電場ベクトルの先端の軌跡を表す式

$$\left(\frac{E_x}{A_x}\right)^2 + \left(\frac{E_y}{A_y}\right)^2 - 2\left(\frac{E_x}{A_x}\right)\left(\frac{E_y}{A_y}\right)\cos\delta = \sin^2\delta$$

が得られる。ここで、 $\delta = \phi_y - \phi_x$  は  $y$  成分と  $x$  成分の間の位相差である。この式から、電場ベクトルの先端 ( $E_x, E_y$ ) が一般には楕円を描くことがわかる。そこで、これを一般に**楕円偏光状態**と呼ぶ。位相差  $\delta$  に対して偏光状態がどのように変化するかを図 24 に示す。 $\delta = 0, \pi$  の時には**直線偏光**、 $\delta = \pm\pi/2$  かつ  $A_x = A_y$  の時には**円偏光**、それ以外の場合には**楕円偏光**となる。光の進行方向  $z = +\infty$  から見た時に電場ベクトルが時計まわりに回転している場合を**右まわり**といい、逆に反時計まわりに回転する場合を**左まわり**という。すなわち、 $2m\pi < \delta < (2m+1)\pi$  の場合には右まわり楕円偏光、 $(2m-1)\pi < \delta < 2m\pi$  の場合には左まわり楕円偏光となる。

自然光は一般に偏光しておらず、ランダムな（時間平均するとすべての方向に偏光した）偏光面を有する。

<sup>\*12</sup> 進行方向から見た時に電場が直線上を振動するようにみえることからこうよばれる。

### 2.1.2 ジョーンズベクトルを用いた表記

式 (2.1a) の偏光は次のように複素数表示すると便利である。

$$\mathbf{E} = \mathbf{A} \exp[i(kz - \omega t)] \quad (2.2)$$

ここで、 $\mathbf{A}$  の各成分は複素振幅で、その  $x$  成分は  $A_x \exp(i\phi_x)$ 、 $y$  成分は  $A_y \exp(i\phi_y)$  である。この光の偏光状態は、この複素振幅の各成分から構成されるベクトル

$$\mathbf{J} = \begin{pmatrix} A_x e^{i\phi_x} \\ A_y e^{i\phi_y} \end{pmatrix} \quad (2.3)$$

によって表現することができる。これをジョーンズベクトルという。図 24 には各偏光状態のジョーンズベクトルもしめした。

光の偏光状態を変化左折（線形の）光学デバイスの特性はジョーンズベクトルに作用する行列で表現することができる。この、デバイスの偏光に及ぼす作用を表す  $2 \times 2$  の行列をジョーンズ行列とよぶ。ある光学デバイスのジョーンズ行列を  $T$  とし、これに入射する平面波の偏光状態を表すジョーンズベクトルが  $\mathbf{J}_1$  であるとする、この光学デバイスを通じたあとの偏光状態  $\mathbf{J}_2$  は

$$\mathbf{J}_2 = T \mathbf{J}_1 \quad (2.4)$$

で与えられる。ジョーンズ行列  $T_1$  の光学デバイスと  $T_2$  の光学デバイスをこの順に光が通過すると、出力光のジョーンズベクトルは

$$\mathbf{J}_3 = T_2 \mathbf{J}_2 = T_2 (T_1 \mathbf{J}_1) = T_2 T_1 \mathbf{J}_1 \quad (2.5)$$

となる。すなわち、この二つの光学デバイスの組み合わせからなるシステム全体の特性は、それぞれのジョーンズ行列の積

$$T' = T_2 T_1 \quad (2.6)$$

で表されることになる。

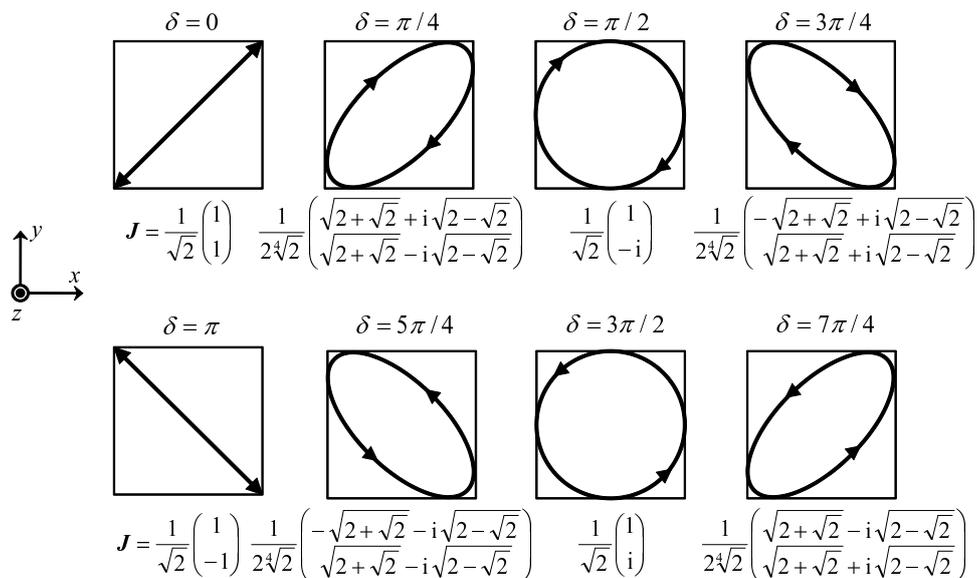


図 24 位相差  $\delta$  と光の進行方向  $z = +\infty$  から見た電場ベクトル先端の軌跡。各偏光状態のジョーンズベクトルもしめした。

### 2.1.3 偏光を扱う光学素子

以下に、いくつかの光学デバイスの特性とそのジョーンズ行列とを列挙する。

- **偏光子 (polarizer):** 特定の方向に振動する電場成分の光だけを透過させる素子を偏光子, あるいは偏光板という。透過光は特定の方向に偏った直線偏光となる。たとえば,  $x$  方向の電場成分だけが透過する偏光子の場合

$$T = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.7)$$

となる。

- **波長板 (wave plate, wave retarder):** 直交する二つの軸に平行な電場成分を持つ光の間に特定の位相差を与える素子を位相差板, あるいは波長板という。ジョーンズ行列

$$T = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \exp(i\Phi) \end{pmatrix} \quad (2.8)$$

で表現される位相差板は,  $x$  方向,  $y$  方向の電場成分の直線偏光を直線偏光のまま通過させ, 双方の間に  $\Phi$  の位相差を生じさせる。波長板の直線偏光をそのまま透過させる二つの軸のうち, 光路長の短い方を速軸 (fast axis), 長い方を遅軸 (slow axis) とよぶ。特別な場合として,  $\Phi = \pi/2$  とすれば

$$T = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix} \quad (2.9)$$

で, 直線偏光  $\mathbf{J}_1 = {}^t(1 \ 1)$  を左回り円偏光  $\mathbf{J}_2 = T\mathbf{J}_1 = {}^t(1 \ i)$  に変換できる。これは 2 偏光成分間の光路長が  $1/4$  波長だけ異なるので, **4分の1波長板 (quarter-wave plate)** とよばれる。また,  $\Phi = \pi$  の場合には, 光路長差が  $1/2$  波長の**半波長板 (half-wave plate)** となり, そのジョーンズ行列は

$$T = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (2.10)$$

で与えられる。これに直線偏光  $\mathbf{J}_1 = {}^t(1 \ 1)$  を入射すると, 偏光方向が  $90^\circ$  回転した直線偏光  $\mathbf{J}_2 = T\mathbf{J}_1 = {}^t(1 \ -1)$  が得られる。

- **偏光回転子 (polarization rotator):** 直線偏光の偏光方向を角度  $\theta$  だけ回転させる素子を偏光回転子という。そのジョーンズ行列は

$$T = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \quad (2.11)$$

で与えられる。これに直線偏光  $\mathbf{J}_1 = {}^t(\cos \theta \ \sin \theta)$  を入射すると, 出力光は

$$\mathbf{J}_2 = T\mathbf{J}_1 = \begin{pmatrix} \cos \theta \cos \theta - \sin \theta \sin \theta \\ \sin \theta \cos \theta + \cos \theta \sin \theta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\theta + \theta) \\ \sin(\theta + \theta) \end{pmatrix}$$

と, 確かに偏光方向が  $\theta$  だけ変化した直線偏光となる。

### 2.1.4 ジョーンズベクトル・ジョーンズ行列と座標変換

任意の方向を向けておかれた光学素子の特性は, 適当な回転によって座標変換して対称性の高い軸を  $x, y$  に一致させると考えやすい。一般に, 座標系  $(x, y)$  を角度  $\theta$  だけ回転させる操作は, 行列

$$R(\theta) = \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ -\sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \quad (2.12)$$

で表される。新しい座標系  $(x', y')$  でのジョーンズベクトル  $\mathbf{J}'$  は、もとの座標系  $(x, y)$  でのジョーンズベクトル  $\mathbf{J}$  から

$$\mathbf{J}' = R(\theta)\mathbf{J} \quad (2.13)$$

で得られる。同様に、光学素子のジョーンズ行列は

$$T' = R(\theta)T R^{-1}(\theta) = R(\theta)T R(-\theta) \quad (2.14)$$

と変換される。

## 2.2 材料の光学的異方性と異方性媒質内での光の伝搬

### 2.2.1 誘電率テンソルと異方性屈折率

気体や液体、ガラスなどの等方的な媒質では、電場  $\mathbf{E}$  と分極  $\mathbf{P}$  は平行で、かつ応答の大きさは方位によらない。よって、その応答は

$$\mathbf{P} = \epsilon_0\chi\mathbf{E} \quad (2.15)$$

と、スカラー量である電気感受率  $\chi$  を用いて記述でき、その結果、電束密度と電場の関係も

$$\mathbf{D} = \epsilon_0\mathbf{E} + \mathbf{P} = \epsilon_0(1 + \chi)\mathbf{E} = \epsilon\mathbf{E} \quad (2.16)$$

と、スカラー量である誘電率  $\epsilon = \epsilon_0\epsilon_r$  で記述できた。しかしながら、応答が一般に等方的でない、結晶のような異方性媒質では、これは

$$\begin{pmatrix} D_x \\ D_y \\ D_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \epsilon_{11} & \epsilon_{12} & \epsilon_{13} \\ \epsilon_{21} & \epsilon_{22} & \epsilon_{23} \\ \epsilon_{31} & \epsilon_{32} & \epsilon_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \\ E_z \end{pmatrix} \quad (2.17)$$

と、誘電率は2階のテンソル量となる。誘電率テンソル  $\epsilon_{ij}$  は通常は対称テンソル ( $\epsilon_{ij} = \epsilon_{ji}$ ) なので、適当な座標軸の変換によって

$$\epsilon = \begin{pmatrix} \epsilon_X & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon_Y & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon_Z \end{pmatrix} = \epsilon_0 \begin{pmatrix} n_X^2 & 0 & 0 \\ 0 & n_Y^2 & 0 \\ 0 & 0 & n_Z^2 \end{pmatrix} \quad (2.18)$$

と対角化することができる。このように誘電率テンソルが対角化される直交座標軸  $(X, Y, Z)$  をその媒質の誘電主軸 (**principal axis**) という。また、これに対応する屈折率  $n_X, n_Y, n_Z$  を主屈折率 (**principal refractive index**) とよぶ。

3つの主屈折率  $n_X, n_Y, n_Z$  がいずれも互いに異なる媒質を**二軸 (biaxial)** (あるいは**二軸性**) 媒質という。結晶ならば二軸結晶 (あるいは二軸性結晶) である。三斜晶系, 単斜晶系, 斜方晶系の晶系に属する結晶はいずれも二軸結晶である。3つの主屈折率のうち二つが等しく, 残りの一つが異なる, すなわち,

$$n_X = n_Y = n_o \quad (2.19a)$$

$$n_Z = n_e \quad (2.19b)$$

の場合, その媒質は**一軸 (uniaxial)** (**単軸**, あるいは**一軸性**) 媒質とよばれる。正方晶系, 六方晶系, 三方晶系に属する結晶は一軸結晶である。3つの主屈折率がすべて等しい媒質は**等方性 (isotropic)** 媒質とよばれる。立方晶系に属する結晶は等方性結晶である。

## 2.2.2 異方性媒質内の光伝搬—結晶光学

異方性媒質中の光伝搬について、絶縁体中のマクスウェル方程式 (1.23a)~(1.23d) まで遡って考えよう。非磁性体に限れば  $\mu_r = 1$  としてよい。電磁波の複素数表示 (1.14a), (1.14b) をこれに代入すると

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{D} = 0 \quad (2.20a)$$

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{H} = 0 \quad (2.20b)$$

$$\mathbf{k} \times \mathbf{E} = \omega \mu_0 \mathbf{H} \quad (2.20c)$$

$$\mathbf{k} \times \mathbf{H} = -\omega \mathbf{D} = -\omega \epsilon \mathbf{E} \quad (2.20d)$$

が得られる。 $\mathbf{k}$ ,  $\mathbf{D}$ ,  $\mathbf{H}$  は互いに直交する。また、ポインティングベクトル  $\mathbf{S} = \mathbf{E} \times \mathbf{H}$  と  $\mathbf{E}$ ,  $\mathbf{H}$  は互いに直交する。しかし、一般には異方性媒質中では  $\mathbf{D} \parallel \mathbf{E}$  ではないので、 $\mathbf{k}$  と  $\mathbf{S}$  は平行でなくなる。

式 (2.20c) と (2.20d) から  $\mathbf{H}$  を消去すると

$$\mathbf{k} \times \mathbf{k} \times \mathbf{E} + \omega^2 \mu_0 \epsilon \mathbf{E} = 0 \quad (2.21)$$

が得られる。座標系  $(x, y, z)$  を誘電主軸にとると誘電率テンソル  $\epsilon$  は対角化されるので、式 (2.21) は以下のように書き下せる。

$$\begin{pmatrix} n_x^2 k_0^2 - k_y^2 - k_z^2 & k_x k_y & k_x k_z \\ k_y k_x & n_y^2 k_0^2 - k_z^2 - k_x^2 & k_y k_z \\ k_z k_x & k_z k_y & n_z^2 k_0^2 - k_x^2 - k_y^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \\ E_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2.22)$$

ここで、 $k_0 = \omega \sqrt{\mu_0 \epsilon_0} = \omega/c$  は真空中の波数である。この式の解は、しばしば波数ベクトルの方向余弦を用いて次の表現される。

$$\frac{s_x^2}{n^2 - n_x^2} + \frac{s_y^2}{n^2 - n_y^2} + \frac{s_z^2}{n^2 - n_z^2} = \frac{1}{n^2} \quad (2.23)$$

$$\mathbf{E} = \begin{pmatrix} \frac{s_x}{n^2 - n_x^2} \\ \frac{s_y}{n^2 - n_y^2} \\ \frac{s_z}{n^2 - n_z^2} \end{pmatrix} \quad (2.24)$$

ここで、 $\mathbf{k} = k_0 n \mathbf{s}$  である。これから、任意の方向に伝搬する光について直線偏光の状態を保ったまま伝搬できる光波が2つある（これらを固有モードとよぶ）こと、それらの屈折率が式 (2.23) で与えられること、二つの固有モードの電場方向が互いに直交することなどが示される。

しかしながら、上記の式を具体的に解くのは一般にやっかいな作業である。この解を図形的に与えるための便利なツールとして、**屈折率楕円体 (index ellipsoid)** が通常用いられる。屈折率楕円体は誘電主軸を座標軸として取ったとき、

$$\frac{x^2}{n_x^2} + \frac{y^2}{n_y^2} + \frac{z^2}{n_z^2} = 1 \quad (2.25)$$

で定義される。これを用いれば、以下のような簡単な作業によって固有モードの電場振動方向とそれに対応する屈折率を知ることができる。まず、与えられた伝搬方向  $\mathbf{k} \parallel \mathbf{s}$  に垂直で原点を通る面で、屈折率楕円体を切断する。その断面は一般に楕円となる。この楕円の二つの主軸（長軸と短軸）の長さが二つの固有モードの屈折率を与える。それぞれの固有モードの電束密度  $\mathbf{D}$  の振動方向は、これらふたつの主軸と平行である。また、電場ベクトル  $\mathbf{E}$  は、伝搬方向  $\mathbf{s}$  の二つの固有モードの屈折率をプロットした面（**法線面 (normal surface)**）（一般に二枚の互いに入れ子になった曲面となる）の接線方向を向く。したがって、ビームの伝搬方向  $\mathbf{S}$  は法線面の垂線方向ということになる。

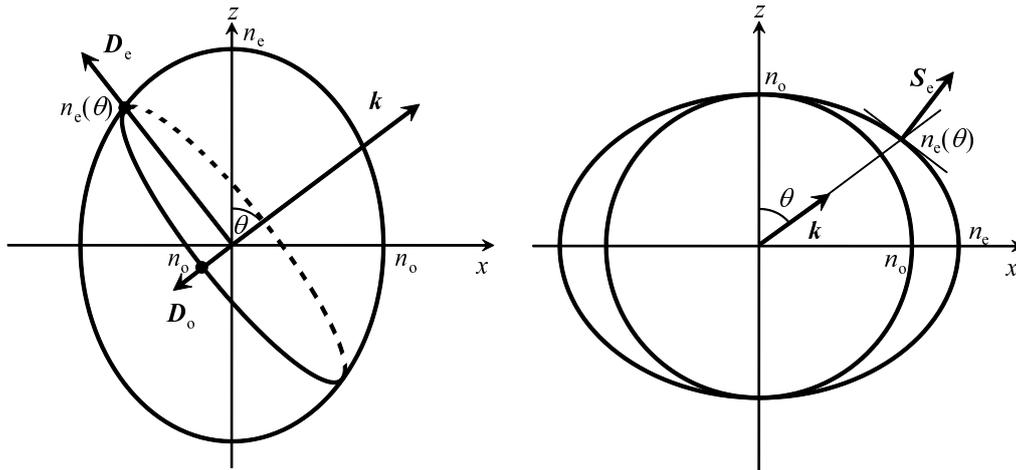


図 25 正の一軸結晶の屈折率楕円体（左）と法線面（右）

### 2.2.3 一軸結晶の場合

比較的単純で理解しやすい一軸結晶の場合について考えてみよう。一軸結晶の屈折率楕円体は

$$\frac{x^2 + y^2}{n_o^2} + \frac{z^2}{n_e^2} = 1 \quad (2.26)$$

と、 $z$  軸を回転軸とした回転楕円体となる。これに対応する放線面も  $z$  軸を回転軸とした回転楕円体となるが、その  $x$ - $z$  面での断面を図 25 にしめす。<sup>\*13</sup>  $\mathbf{k} \parallel \hat{z}$  の時にはこれに垂直な面による屈折率楕円体の切り口は円となり、異方性が表れない（偏光状態によらず屈折率は一定である）。このような方向を**光軸 (optic axis)** という。<sup>\*14</sup> 光軸 ( $z$  軸) から角度  $\theta$  傾いた  $\mathbf{k}$  に対しては二つの固有モードがあり、それらの固有屈折率は

$$n = n_o \quad (2.27a)$$

$$n = n_e(\theta) = \left( \frac{\cos^2 \theta}{n_o^2} + \frac{\sin^2 \theta}{n_e^2} \right)^{-1/2} \quad (2.27b)$$

で与えられる。 $\mathbf{k}$  が  $x$ - $z$  面内にある場合、前者の  $\mathbf{D}$  は  $y$  方向、後者の  $\mathbf{D}$  は  $x$ - $z$  面内にくる。前者を**常光線 (ordinary ray)**、後者を**異常光線 (extraordinary ray)** とよぶ。 $\theta = 0$  の時には特別なことは何も起こらず、異方性は表れない。 $\theta = \pi/2$  の時には常光線、異常光線ともに  $\mathbf{k} \parallel \mathbf{S}$  で、常光線と異常光線は同軸に伝搬するが、互いの間の位相差に起因する偏光の変化が一般に生じる。 $\theta \neq 0, \pi/2$  の一般の場合には、異常光線で  $\mathbf{k} \nparallel \mathbf{S}$  となり、常光線ビームと異常光線ビームが異なる角度に伝搬する**複屈折 (double refraction, birefringence)** が観測される。

## 2.3 電気光学効果とその応用

電気光学効果はレーザの発明以前から知られていた最も歴史の古い非線形光学効果である。2 次の非線形光学効果のひとつである**1 次電気光学効果 (linear electrooptic effect) (ポッケルス効果 (Pockels effect))** は、19 世紀から知られていた現象で、これを用いることで電気信号による光の振幅

<sup>\*13</sup>  $n_o < n_e$  の一軸結晶を正の一軸結晶、逆に  $n_o > n_e$  の一軸結晶を負の一軸結晶とよぶ。

<sup>\*14</sup> 光軸が一本であるために一軸という名称がある。二軸媒質には光軸が二本あり、その向きは誘電主軸とは一致しない。

変調・位相変調などが可能となる。**電気光学変調 (electrooptic modulation, EO 変調)**は、レーザー光の外部変調やパルスピッカー、 $Q$  スwitchングなどに応用されている。高速大容量光通信の分野では、半導体を用いた吸収型変調器が広く用いられるようになってきているが、電気光学効果を利用した光変調器はチャープのない理想的な変調が実現できることから、今後も様々な分野で利用され続けるものと思われる。

### 2.3.1 電気光学効果

電気光学定数は以下のように電場印加による屈折率楕円体のひずみに対して定義されている。一般に、屈折率楕円体は

$$B_{11}x^2 + B_{22}y^2 + B_{33}z^2 + 2B_{23}yz + 2B_{31}zx + 2B_{12}xy = 1 \quad (2.28)$$

で表される。ここで、 $B$  は比誘電率テンソル  $\epsilon^r$  の逆テンソル ( $B\epsilon^r = I$ ) である。 $x, y, z$  軸を誘電主軸にとると、電場がないときには

$$\begin{aligned} B_{11} &= \frac{1}{n_x^2}, & B_{22} &= \frac{1}{n_y^2}, & B_{33} &= \frac{1}{n_z^2}, \\ B_{23} &= B_{31} = B_{12} = 0 \end{aligned} \quad (2.29)$$

であるが、ここに電場  $\mathbf{E}$  が印加されると、屈折率楕円体がひずむことになる。これが電気光学効果である。電気光学定数は以下のように、このときの  $B_{ij}$  の変化から定義される。

$$B_{ij}(\mathbf{E}) - B_{ij}(0) = \Delta B_{ij} = \sum_{k=1}^3 r_{ijk} E_k + \sum_{k=1}^3 \sum_{l=1}^3 s_{ijkl} E_k E_l \quad (2.30)$$

3階のテンソルである  $r_{ijk}$  を**1次 (線形) 電気光学係数 (linear electrooptic coefficient)**、あるいは**ポッケルス定数 (Pockels coefficient)**、4階のテンソルである  $s_{ijkl}$  を**2次電気光学定数 (quadratic electrooptic coefficient)**、あるいは**カー一定数 (Kerr coefficient)** とよぶ。

### 2.3.2 1次電気光学定数

反転対称性を欠く物質では1次電気光学効果が発現し、通常その大きさは2次電気光学効果よりもはるかに大きい。以下では1次電気光学効果についてみていこう。電気光学テンソル  $r_{ijk}$  は  $i, j$  の交換に対して不変なので、以下の規則にしたがって  $(ij) \rightarrow m$  の縮約をおこなうと  $6 \times 3$  の行列形式  $r_{mk}$  に書き直すことができる。

|      |      |      |      |          |          |          |
|------|------|------|------|----------|----------|----------|
| $ij$ | $xx$ | $yy$ | $zz$ | $yz, zy$ | $zx, xz$ | $xy, yx$ |
| $m$  | 1    | 2    | 3    | 4        | 5        | 6        |

縮約形式の電気光学係数テンソル  $r_{mk}$  を用いると、式 (2.30) は

$$\begin{pmatrix} \Delta B_1 \\ \Delta B_2 \\ \Delta B_3 \\ \Delta B_4 \\ \Delta B_5 \\ \Delta B_6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r_{11} & r_{12} & r_{13} \\ r_{21} & r_{22} & r_{23} \\ r_{31} & r_{32} & r_{33} \\ r_{41} & r_{42} & r_{43} \\ r_{51} & r_{52} & r_{53} \\ r_{61} & r_{62} & r_{63} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \\ E_z \end{pmatrix} \quad (2.31)$$

と書き直せる。

電気光学定数の18個の成分のうち0になるものや0でない成分間の関係などは媒質の空間的な対称性によって一意に定まる。

### 2.3.3 電気光学効果による屈折率変化

電気光学効果によって引き起こされる屈折率変化について、いくつかの代表的な電気光学結晶の例を以下にまとめる。

■点群  $\bar{4}2m$  の結晶 KDP ( $\text{KH}_2\text{PO}_4$ ) や DKDP (重水素化 KDP) に代表される点群  $\bar{4}2m$  の結晶は、後述する縦型変調の構成でポッケルスセルに用いられる重要な電気光学結晶である。その電気光学テンソルは

$$r = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ r_{41} & 0 & 0 \\ 0 & r_{41} & 0 \\ 0 & 0 & r_{63} \end{pmatrix} \quad (2.32)$$

という形になる。ここに電場  $\mathbf{E}$  を印加するとその屈折率楕円体は

$$\frac{x^2}{n_o^2} + \frac{y^2}{n_o^2} + \frac{z^2}{n_e^2} + 2r_{41}E_xyz + 2r_{41}E_yzx + 2r_{63}E_zxy = 1 \quad (2.33)$$

となる（単軸結晶なので  $n_x = n_y = n_o, n_z = n_e$  とした）。このように、電場印加時には屈折率楕円体はひずみ、その主軸の向きはもはや  $x, y, z$  に平行でなくなる。

印加電場  $\mathbf{E}$  が  $z$  軸に平行な場合には

$$\frac{x^2 + y^2}{n_o^2} + \frac{z^2}{n_e^2} + 2r_{63}E_zxy = 1 \quad (2.34)$$

となる。この場合の主軸は、 $x$  軸、 $y$  軸をそれぞれ  $z$  軸の周りに  $45^\circ$  回転した  $x'$  軸、 $y'$  軸、そして  $z$  軸となり、主屈折率は

$$\begin{aligned} n_{x'} &= \left( \frac{1}{n_o^2} + r_{63}E_z \right)^{-1/2} = n_o - \frac{n_o^3}{2} r_{63}E_z \\ n_{y'} &= \left( \frac{1}{n_o^2} - r_{63}E_z \right)^{-1/2} = n_o + \frac{n_o^3}{2} r_{63}E_z \\ n_z &= n_e \end{aligned} \quad (2.35)$$

となる。

■点群  $3m$  の結晶  $\text{LiNbO}_3, \text{LiTaO}_3$  は横型変調器、導波路型変調素子に広く用いられる高性能電気光学結晶で、点群  $3m$  に属する単軸結晶である。その電気光学テンソルは

$$r = \begin{pmatrix} 0 & r_{61} & r_{13} \\ 0 & -r_{61} & r_{13} \\ 0 & 0 & r_{33} \\ 0 & r_{51} & 0 \\ r_{51} & 0 & 0 \\ r_{61} & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.36)$$

という形である。この結晶に  $z$  軸 ( $c$  軸) に平行な電場を印加した場合、誘電主軸の方向は変わらず、主屈折率が

$$\begin{aligned} n_x &= n_o - \frac{n_o^3}{2} r_{13} E_z \\ n_y &= n_o - \frac{n_o^3}{2} r_{13} E_z \\ n_z &= n_e - \frac{n_e^3}{2} r_{33} E_z \end{aligned} \quad (2.37)$$

と変化する。

■点群  $\bar{4}3m$  の結晶 GaAs, CdTe などの化合物半導体は、中間赤外域で良好な透過特性を有する点群  $\bar{4}3m$  の等方性結晶であり、その電気光学テンソルは

$$r = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ r_{41} & 0 & 0 \\ 0 & r_{41} & 0 \\ 0 & 0 & r_{41} \end{pmatrix} \quad (2.38)$$

である。これに (001) 面に垂直な  $\mathbf{E} = E\hat{z}$  を印加すると、主軸は  $\mathbf{x}'//[110]$ ,  $\mathbf{y}'//[1\bar{1}0]$ ,  $\mathbf{z}$  となり、主屈折率は

$$\begin{aligned} n_{x'} &= n + \frac{n^3}{2} r_{41} E \\ n_{y'} &= n - \frac{n^3}{2} r_{41} E \\ n_z &= n \end{aligned} \quad (2.39)$$

となる。これに対して、(110) 面に垂直な  $\mathbf{E}//[110]$  を印加した場合は、主軸は  $\mathbf{x}'//[11\sqrt{2}]$ ,  $\mathbf{y}'//[11\sqrt{2}]$ ,  $\mathbf{z}'//[1\bar{1}0]$ , 主屈折率は

$$\begin{aligned} n_{x'} &= n + \frac{n^3}{2} r_{41} E \\ n_{y'} &= n - \frac{n^3}{2} r_{41} E \\ n_{z'} &= n \end{aligned} \quad (2.40)$$

である。

#### 2.3.4 電気光学効果によって生じる現象

■位相変調 上で見たように、1次の電気光学効果では、印加電場に比例して屈折率が変化する。これにより結晶の光路長が変化するので、透過光の位相変調 (**phase modulation**) が容易に実現できる。長さ  $L$  の結晶中を伝搬する波長  $\lambda$  の光は

$$\Delta\phi = \frac{2\pi}{\lambda} \Delta n L \quad (2.41)$$

の位相シフトを受ける。1次電気光学効果による典型的な屈折率変化  $\Delta n$  の大きさは  $10^{-4} \sim 10^{-5}$  程度なので、可視光に対して cm オーダーの結晶長で十分な位相変化が得られる。

■周波数変調 時間変化する電場を印加すればそれに追従して位相が変動するので、

$$\Delta\nu = \frac{d(\Delta\phi)}{dt} = \frac{2\pi}{\lambda} \frac{d(\Delta n)}{dt} L \quad (2.42)$$

の周波数変化が得られる。交流電場を印加すれば射出光のスペクトルにサイドバンドが現れ、これを光周波数シフターに利用することができる。

■強度変調 適切な構成をとることで、位相変化を利用して振幅変化、強度変化を実現することができる。後述の縦型変調器のように結晶内の直交する2偏光の位相差に起因する偏光状態の変化を利用する方法、マッハツェンダー干渉計のような2光路干渉を利用する方法、隣接する導波路間の結合が伝搬定数に依存することを利用する方向性結合型、などがある。

■ビーム偏向 プリズム状電気光学結晶中の光路長差を印加電場により制御できることを用いて、ビーム偏向 (beam deflection) を実現できる。可動部がなく、高速動作可能である点が特徴である。

■導波路モード変換・フィルター 電気光学効果によって生じる複屈折やカットオフの変動を利用して、導波路の TE-TM モード変換、フィルターなどが実現できる。

### 2.3.5 電気光学変調器

■縦型変調器 KDP などを用いた図 26 のような構成の変調器を縦型変調器 (longitudinal modulator) とよぶ。z 軸方向の長さ L の KDP に z 軸に平行な電場  $E_z = V/L$  (V は印加電圧) を印加し、z 軸に平行に光を入射する。光電場は  $x'y'$  平面内にあるので、

$$n_{x'} - n_{y'} = n_o^3 r_{63} E_z \quad (2.43)$$

の複屈折を感じて伝搬し、 $E_{x'}$  と  $E_{y'}$  間の位相差は結晶を通過することによって

$$\Gamma = \frac{2\pi}{\lambda} (n_{x'} - n_{y'}) L = \frac{2\pi}{\lambda} n_o^3 r_{63} V \quad (2.44)$$

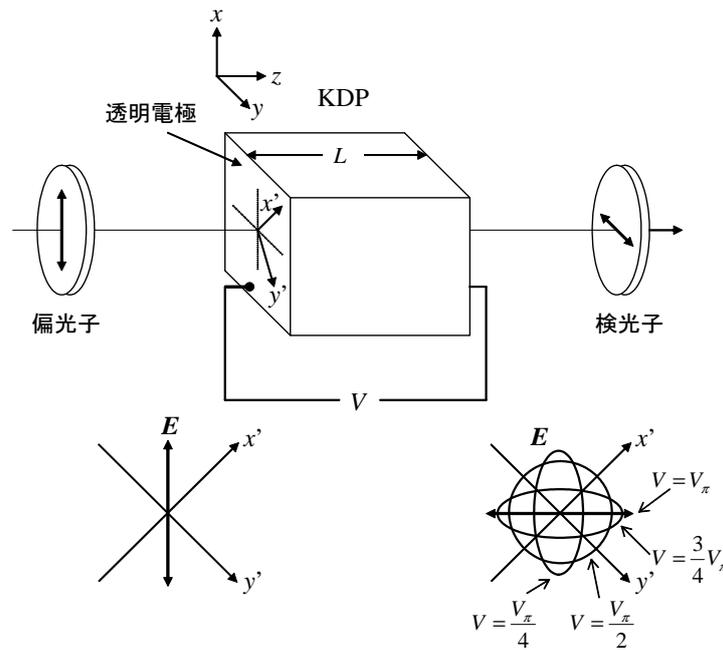


図 26 縦型変調器の構成と偏光状態の変化

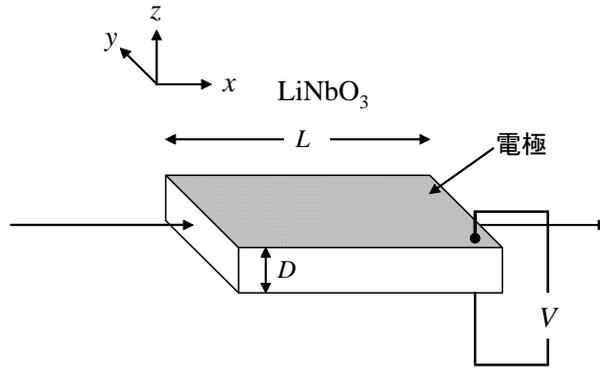


図 27 横型変調器の構成

だけ増加することになる。この位相差をリターデーション (retardation) という。x 方向に電場の振動する直線偏光の光を入射すると、リターデーションによって偏光状態が変化し、楕円偏光となって出射する。リターデーションが  $\pi$  になる電圧 (半波長電圧 (half-wave voltage))

$$V_{\pi} = \frac{\lambda}{2n_o^3 r_{63}} \quad (2.45)$$

を用いて式 (2.44) は

$$\Gamma = \pi \frac{V}{V_{\pi}} \quad (2.46)$$

と書ける。  $V_{\pi}$  を印加すると、x 方向に直線偏光した入射光が y 方向の直線偏光となって出射することになる。2 枚の直交した偏光板の間に KDP を配置し、電圧を印加することによって、透過率は

$$\frac{I_o}{I_i} = \sin^2 \frac{\Gamma}{2} = \sin^2 \left[ \left( \frac{\pi}{2} \right) \frac{V}{V_{\pi}} \right] \quad (2.47)$$

と変化するので、  $V = 0$  と  $V = V_{\pi}$  の間で光強度スイッチングができる。

縦型変調器の構成では、半波長電圧が形状に依存しないので、後述の横型変調器のような動作電圧の低減や高感度化は望めない。しかし、レーザの Q スイッチのように大きな開口が要求される場合には横型のメリットがいかせないで、むしろ、形状や温度に特性が依存しない縦型変調器の特性は好ましいものとなる。KDP などを用いた縦型振幅変調器はポッケルスセルとして市販されており、レーザの Q スイッチやパルス切り出しなどに広く用いられている。

■横型変調器 図 27 のように、長さ  $L$  (x 方向)、厚さ  $D$  (z 方向) の  $\text{LiNbO}_3$  の厚み方向に電圧  $V$  を印加して x 方向に光を伝搬させた場合について考えよう。この場合のリターデーションは

$$\Gamma = \frac{2\pi}{\lambda}(n_y - n_z)L = \frac{2\pi}{\lambda}(n_e - n_o)L + \frac{\pi}{\lambda}(n_e^3 r_{33} - n_o^3 r_{31})V \frac{L}{D} \quad (2.48)$$

となる。このように、光の伝搬方向に対して垂直に電圧を印加する横型変調器 (transversal modulator) では、縦型変調と比べてリターデーションが  $L/D$  だけ大きくなり、それに反比例して半波長電圧  $V_{\pi}$  を小さくできる。この方法では位相差に一定のバイアス ( $2\pi(n_e - n_o)L/\lambda$ ) があること、これが温度に敏感に依存することから、精密な温度補償が必要になる。

z 軸方向に電場が振動する直線偏光を用いればバイアスの問題は生じない。この場合は入射光は直線偏光のまま伝搬し、振幅 (強度) 変調は起きず、

$$\Delta\phi = \frac{2\pi}{\lambda}\Delta n_z L = -\frac{\pi}{\lambda}n_e^3 r_{33}V \frac{L}{D} \quad (2.49)$$

による位相変調 (phase modulation) のみが生じる。

導波路型のデバイスでは  $L/D$  を極端に大きくできるので、この横型位相変調を方向性結合器やマッハツェンダー型干渉器と組み合わせることで、低電圧駆動の電気光学スイッチが実現されている。

## 2.4 偏光回転の物理と応用

その特性が式 (2.11) で与えられるような偏光回転を引き起こす材料やデバイスについて考えよう。

### 2.4.1 旋光性

キラルな分子で構成される媒質 (気体, 液体, 固体どれでも良い) やある種のらせん構造を有する固体では、その中を伝搬する直線偏光の偏光面が距離に比例して回転する。これを**旋光性 (optical rotatory power)** とよび、(外部磁場の印加なしに) 旋光性を示す性質を**光学活性 (optical activity)**, あるいは**自然旋光性**という。偏光面の回転方向が右ねじ回りのときを**右旋性 (dextrorotatory)** とよび、+ または  $d$  で表示する。逆に左ねじ回りのときを**左旋性 (levorotatory)** とよび、- または  $l$  で表示する。<sup>\*15</sup> 結晶石英のように異方性のある媒質の場合、旋光性は光軸方向の伝搬時にのみ観測される。

旋光性を呈する媒質中を伝搬する光の場合、固有モードは円偏光となる。右ねじ回り円偏光の固有屈折率が  $n_R$ , 左ねじ回り円偏光の固有屈折率が  $n_L$  の旋光性媒質に角度  $\theta$  方向に偏光した直線偏光

$$J_0 = \begin{pmatrix} \cos \theta \\ \sin \theta \end{pmatrix} = \frac{1}{2} e^{-i\theta} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} + \frac{1}{2} e^{i\theta} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix} \quad (2.50)$$

を入射した場合について考えよう。媒質中を距離  $d$  だけ伝搬した後、第 1 項は  $2\pi n_R d / \lambda$  ( $\lambda$  は波長), 第 2 項は  $2\pi n_L d / \lambda$  だけ位相が変化する。この光のジョーンズベクトルは

$$\frac{1}{2} e^{-i\theta} \exp\left(-i \frac{2\pi n_R d}{\lambda}\right) \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} + \frac{1}{2} e^{i\theta} \exp\left(-i \frac{2\pi n_L d}{\lambda}\right) \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix} = \exp\left[-i \frac{\pi(n_R + n_L)d}{\lambda}\right] \begin{pmatrix} \cos\left[\theta - \frac{\pi(n_L - n_R)d}{\lambda}\right] \\ \sin\left[\theta - \frac{\pi(n_L - n_R)d}{\lambda}\right] \end{pmatrix} \quad (2.51)$$

となり、確かに偏光面が回転していることがわかる。偏光能 (単位長さあたりの偏光面回転角) は

$$\rho = \frac{\pi}{\lambda} (n_L - n_R) \quad (2.52)$$

で与えられる。

(自然) 旋光性は伝搬の向きによらず同じ方向に偏光面を回転させる。たとえば、右ねじ回りに偏光面が回転した光を同じ経路で逆方向に伝搬させても右ねじ回りに偏光面が回転する。その結果、一往復した光の偏光状態は最初の状態に戻ることになる (時間反転対称性がある)。

### 2.4.2 磁気光学効果

媒質の光学特性が印加される磁場によって変化する効果を**磁気光学効果 (magneto-optic effects)** という。磁場と同じ方向に伝搬する直線偏光の偏光面が回転する現象を**ファラデー効果 (Faraday effect)** とよぶ。これによる旋光能は磁場に比例し、

$$\rho = VB \quad (2.53)$$

比例係数  $V$  を**ベルデ定数 (Verdet constant)** とよぶ。ファラデー効果は、磁場中で原子・分子のエネルギー準位の縮退が解けるゼーマン効果によって引き起こされると理解できる。

<sup>\*15</sup>  $d$  グリセルアルデヒドから誘導される化合物を  $D$ ,  $l$  グリセルアルデヒドから誘導される化合物を  $L$  と表示する。

ファラデー効果による偏光回転の方向は磁場の方向で決まり、磁場の向きを変えると  $\rho$  の符号が変わる。すなわち、光を磁場にそって一往復させると片道の場合の 2 倍偏光面が回転することになる。これを利用して、二枚の偏光子間にファラデー回転子を挟んだ高性能な光アイソレータが実現できる。

また、磁気光学効果の一つとして**磁気（光学）カー効果 (magnetic (magneto)optical Kerr effect)** という現象がある。磁場を印加した媒質あるいは永久磁化を持つ強磁性体の表面で反射された直線偏光は、一般に楕円偏光になり、その長軸の向きは入射光の電場の向きからわずかに回転する。この回転角をカー回転角といい、強磁性体の場合、磁化に依存する。光磁気ディスクの読み出しにはこの磁気カー効果が利用されている。

### 2.4.3 ねじれネマチック液晶

剛直な棒状分子の配向に一定の秩序を有するが、分子の重心位置の分布が完全にランダムな液晶を**ネマチック液晶 (nematic liquid crystal)** という。二枚のガラス板の間隙（液晶セル）に注入されたネマチック液晶の配向は、ポリイミドなどで作製されガラス基板表面に設けられた配向膜のラビング処理によってコントロールできる。2枚の配向膜を同一方向にラビングしたセル中のネマチック液晶は分子長軸が基板に平行に一方に配向したホモジニアス分子配列を取る。この状態で一方の基板を面内で  $90^\circ$  回転させると、セル内のネマチック液晶は一方の基板表面から他方の基板表面へ向かってその配向が徐々に傾いていくねじれ構造を取ることになる。これを**ねじれネマチック (twisted nematic, TN)** 液晶とよぶ。ここに分子長軸の配向方向と平行な電場成分を持つ直線偏光を入射すると、TN 液晶内を伝搬する光の偏光面は分子長軸の配向法統と平行にねじれ（すなわち偏光回転が起こり）、セルの出射端では偏光面が  $90^\circ$  回転することになる（証明は後述）。これをラビング方向と平行な光電場を透過する直交ニコル間におけば、透過率の高い ON 状態とすることができる。2枚のガラス基板間に透明電極を用いて電圧を印加すると極性液晶分子が基板に垂直に配向する（ホメオトロピック分子配列）。このときには透過率が 0 の OFF 状態になる。これが初期の液晶ディスプレイの表示で広く用いられた TN 液晶表示方式の原理である。

ねじれネマチック液晶は、薄い一軸性媒質がその光軸の向きを少しずつ変えながら積層したものとみなすことができる。分子長軸の配向方向が光軸となり、通常  $n_e > n_o$  である。液晶セル基板の垂線方向に  $z$  軸を取り、これに平行に入射する直線偏光を考えよう。位相差板として働く一軸性媒質層の厚さが  $d$  で、液晶セルはこれが  $N$  層重なった厚さ  $L = Nd$  の媒質であるとみなし、 $0 \leq z \leq L$  での光軸の向きは  $x$  軸から角度

$$\theta = \gamma z \quad (2.54)$$

だけねじれているとする。 $m$  枚目 ( $z = md$ ) の位相差板は光軸が  $x$  軸から  $\theta_m = \gamma md = m\Delta\theta$  ( $\Delta\theta = \gamma d$ ) だけ傾いているので、そのジョーンズ行列は

$$T_m = R(-\theta_m)T_R R(\theta_m) \quad (2.55)$$

と書ける。ここで、 $T_R$  は遅軸が  $x$  軸に平行な位相差板のジョーンズ行列で

$$T_R = \begin{pmatrix} \exp\left(i\frac{2\pi n_e d}{\lambda}\right) & 0 \\ 0 & \exp\left(i\frac{2\pi n_o d}{\lambda}\right) \end{pmatrix} = \exp\left[i\frac{\pi(n_e + n_o)d}{\lambda}\right] \begin{pmatrix} \exp\left(i\frac{\pi(n_e - n_o)d}{\lambda}\right) & 0 \\ 0 & \exp\left(-i\frac{\pi(n_e - n_o)d}{\lambda}\right) \end{pmatrix} \quad (2.56)$$

である。ここで、第 3 項の因子  $\exp\left[i\frac{\pi(n_e + n_o)d}{\lambda}\right]$  は単に全体の位相変化を表しているだけなので、落と

して考えてよい。TN 液晶セル全体のジョーンズ行列は以下のように計算できる。

$$T = \prod_{m=1}^N T_m = \prod_{m=1}^N R(-\theta_m) T_r R(\theta_m) = R(-\theta_N) [T_r R(\Delta\theta)]^{N-1} R(\theta_1) \quad (2.57)$$

ここで、 $R(\theta_m)R(-\theta_{m-1}) = R(\theta_m - \theta_{m-1}) = R(\Delta\theta)$ であることを用いた。 $d$ は十分に小さく  $\Delta\theta = \gamma d$  も小さいので、 $R(\Delta\theta) \approx 1$ と近似できるので、

$$\begin{aligned} T &\simeq R(-\theta_N)(T_r)^N = R(-\gamma L) \begin{pmatrix} \exp\left(i\frac{\pi(n_e-n_o)d}{\lambda}\right) & 0 \\ 0 & \exp\left(-i\frac{\pi(n_e-n_o)d}{\lambda}\right) \end{pmatrix}^N \\ &= \begin{pmatrix} \cos(\gamma L) & -\sin(\gamma L) \\ \sin(\gamma L) & \cos(\gamma L) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \exp\left(i\frac{N\pi(n_e-n_o)d}{\lambda}\right) & 0 \\ 0 & \exp\left(-i\frac{N\pi(n_e-n_o)d}{\lambda}\right) \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (2.58)$$

となる。これに  $x$  方向の電場成分を持つ直線偏光を入射した場合、

$$\begin{pmatrix} \cos(\gamma L) & -\sin(\gamma L) \\ \sin(\gamma L) & \cos(\gamma L) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \exp\left(i\frac{N\pi(n_e-n_o)d}{\lambda}\right) & 0 \\ 0 & \exp\left(-i\frac{N\pi(n_e-n_o)d}{\lambda}\right) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = e^{i\frac{N\pi(n_e-n_o)d}{\lambda}} \begin{pmatrix} \cos(\gamma L) \\ \sin(\gamma L) \end{pmatrix} \quad (2.59)$$

となり、確かに偏光面が液晶分子と同じ角度  $\gamma L$  だけ回転している。一方、電場印加時にはホメオトロピック分子配列した液晶は光軸が  $z$  方向を向いたような媒質となり、 $z$  方向に伝搬する光波に対しては異方性が表れなくなる。したがって、このセル ( $\gamma L = \pi/2$ ) を直交ニコル間に配置すれば、電場の ON-OFF で透過光強度の OFF-ON が実現できることになる。

## 3 化合物半導体

### 3.1 化合物半導体とは

Si や Ge のように 1 種類の元素からなる半導体を元素半導体とよぶのに対し、GaAs や ZnSe のように 2 種類以上の元素から構成される化合物が半導体となった場合、これを**化合物半導体 (compound semiconductor)**という。実用上重要な化合物半導体のほとんどが、Si と同じ正四面体的な 4 配位構造を持つ。この 4 配位構造は  $sp^3$  混成軌道によって形成されるので、必然的に、こうした化合物半導体は、IV 族と IV 族、あるいは III 族と V 族、II 族と VI 族などの元素の組み合わせで実現されることになる。SiC が IV-IV 族化合物半導体の、GaAs や InP, GaN が III-V 族化合物半導体の、ZnO や CdS が II-VI 族化合物半導体の典型例である。

化合物半導体は、高い電子移動度、直接遷移による高い発光効率、紫外から赤外域に及ぶ広い範囲のバンドギャップなどの際だった特徴があり、高電子移動度トランジスタ (HEMT) などの高速電子デバイスや、発光ダイオード、半導体レーザ、受光デバイスなどの光デバイスの材料として広く実用に供せられている。以下に、化合物半導体の (Si と対比した) 特徴をまとめる。

- 高い電子移動度を有するものが多い。
- 直接遷移型のエネルギーバンド構造を有するものが多い。
- 複数の化合物半導体を固溶させた混晶半導体が自由に作製できる。
- 混晶も含めて適切な材料を選択することにより、広い範囲でバンドギャップを連続的に調整できる。
- 混晶も含めて適切な材料を選択することにより、格子定数も連続的に変化させられる。
- ヘテロエピタキシー技術を用いて高品質なヘテロ接合が形成できる。

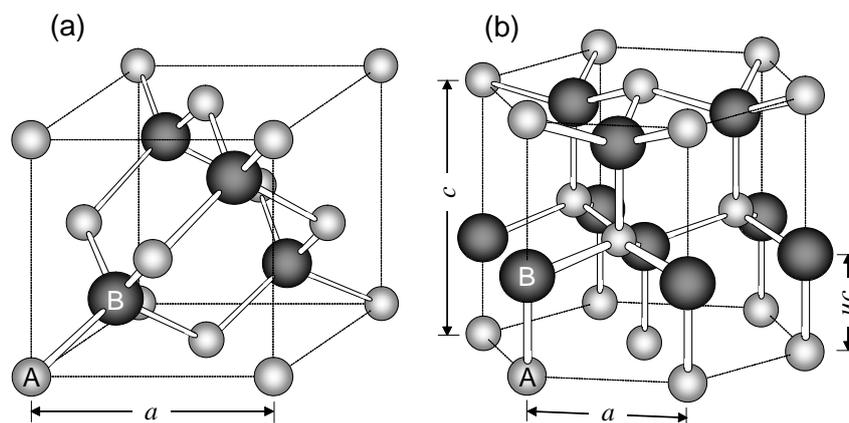


図 28 閃亜鉛鉱型結晶 (a) とウルツ鉱型結晶 (b) の結晶構造

表 1 ダイヤモンド型, 閃亜鉛鉱型, ウルツ鉱型結晶の結晶学的な特徴

| 結晶構造     | 晶形  | 極性軸 <sup>a</sup>      | 反転対称性 | 自発分極                     | 誘電性  | 光学的異方性 |
|----------|-----|-----------------------|-------|--------------------------|------|--------|
| ダイヤモンド構造 | 立方晶 | —                     | あり    | なし                       | 常誘電性 | 等方的    |
| 閃亜鉛鉱構造   | 立方晶 | $\langle 111 \rangle$ | なし    | なし                       | 圧電性  | 等方的    |
| ウルツ鉱構造   | 六方晶 | [0001]                | なし    | あり ( $\parallel$ [0001]) | 焦電性  | 一軸性    |

<sup>a</sup> それ自身に垂直な鏡映面を持たない  $n$  回対称軸

### 3.2 化合物半導体の結晶構造

III-V 族, II-VI 族化合物半導体の多くは, 立方晶で点群  $\bar{4}3m$  ( $T_d$ ) に属する閃亜鉛鉱 (zincblende) 型, あるいは六方晶で点群  $6mm$  ( $C_{6v}$ ) に属するウルツ鉱 (wurtzite) 型の結晶構造を有する。<sup>\*16</sup> どちらも, ダイヤモンド構造<sup>\*17</sup>と同様,  $sp^3$  混成軌道の結合からなる正四面体的 4 配位構造を基本骨格としている。閃亜鉛鉱構造は, 図 28(a) に示すように, A 原子の作る面心立方 (立方最密) 格子 (これを副格子とよぶ) に B 原子の作る面心立方格子を体対角線の方向 [111] に  $a/4$  だけずらして重ね合わせた構造である。III-V 族化合物半導体の場合, 一方の副格子 (たとえば A サイト) が III 族原子に占有され, もう一方の副格子 (B サイト) が V 族原子に占有される。これに対して, ウルツ鉱構造は, A 原子の作る六方最密格子に B 原子の作る六方最密格子を  $c$  軸の方向 [0001] に約  $3c/8$  だけずらして重ね合わせた構造である (図 28(b))。

ダイヤモンド構造, 閃亜鉛鉱構造, ウルツ鉱構造の結晶学的な特徴を表 1 にまとめた。化合物半導体結晶中の結合はすべて異種原子間の極性結合であり, この点と同種原子間の結合しか持たないダイヤモンド型結晶と決定的に異なる点である。そのため, ダイヤモンド構造は対称中心があるのに対して, 閃亜鉛鉱構造とウルツ鉱構造は反転対称性を欠いている。閃亜鉛鉱構造では 4 配位構造は完全な正四面体構造を保ち, その対称性から 4 本の結合の極性が互いに打ち消しあい, 巨視的には自発分極を持たない。これに対して, ウルツ鉱構造は若干事情が複雑である。 $c/a = \sqrt{8/3} = 1.633$  でかつ

<sup>\*16</sup> SiC などは, これ以外に六方晶系の 4H や 6H, 菱面体晶の 12R などの結晶構造を持つものも存在する。いずれの結晶構造も正四面体的 4 配位構造を基本としており, これらは閃亜鉛鉱的構造とウルツ鉱的構造の組み合わせであるとみなせる。

<sup>\*17</sup> ダイヤモンド構造の点群は  $m\bar{3}m$  ( $O_h$ ) である。

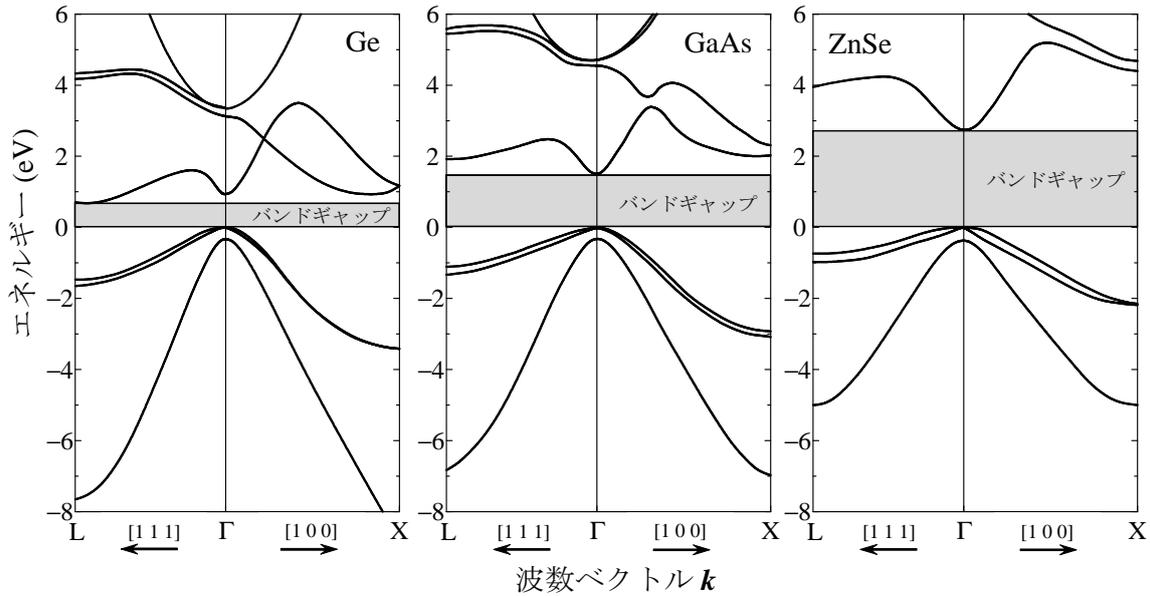


図 29 Ge, GaAs, ZnSe のエネルギーバンド構造（経験的擬ポテンシャル法と  $k \cdot p$  法による計算結果をもとに作図）。

$u = 3/8 = 0.375$  ( $u$  は  $c$  軸に平行な AB 間結合距離と  $c$  の比) の場合（これを理想的なウルツ鉱構造という）に限って自発分極を持たないが，一般的なウルツ鉱構造の結晶はこの理想構造から歪んでおり， $[0001]$  方向の自発分極を有する。

### 3.3 化合物半導体の電子構造

Si や Ge が間接遷移型のエネルギーバンド構造を取るのに対して，化合物半導体の多くが直接遷移型のバンド構造を有するという点が，化合物半導体の最大の強みである。図 29 に Ge と GaAs, ZnSe のエネルギーバンド構造を示す。これらはいずれも周期表第 4 周期の元素から構成された半導体結晶である。

Ge では，価電子帯の上端が  $\Gamma$  点 ( $\mathbf{k} = 0$ ，すなわちブリルアンゾーンの原点) にあるのに対し，伝導帯の下端は  $L$  点の近く ( $\mathbf{k} \parallel [111]$  の方向) にあり，この間の光学遷移はフォノンの吸収・放出を伴う間接遷移となる。このように，異なる結晶運動量  $\mathbf{k}$  に価電子帯上端と伝導帯下端がある場合を間接型バンドギャップとよび，間接型バンドギャップを有する半導体を間接遷移型半導体，あるいは，間接型半導体という。間接遷移は，以下に述べる直接遷移と比較して遷移確率が低く<sup>\*18</sup>，そのため，Ge のような間接遷移型半導体の基礎吸収端における吸収係数，発光レートは小さくなる。すなわち，間接半導体は一般に，光りにくい半導体ということができる。ここで見た Ge や Si は典型的な間接半導体である。

これに対して，GaAs や ZnSe, GaN は，価電子帯上端と伝導帯下端とがともに同じ  $\mathbf{k} = 0$  の  $\Gamma$  点にある直接型バンドギャップを有する。このように直接型バンドギャップを有する半導体を直接遷移

\*18 間接遷移に対する吸収係数は

$$\alpha = \frac{A(\hbar\omega + \hbar\omega_p - E_g)^2}{e^{\hbar\omega_p/kT} - 1} + \frac{A(\hbar\omega - \hbar\omega_p - E_g)^2}{1 - e^{-\hbar\omega_p/kT}}$$

で与えられる。ここで， $\hbar\omega$  は光子エネルギー  $\hbar\omega_p$  はフォノンのエネルギー， $E_g$  はバンドギャップエネルギーである。

型半導体，あるいは，直接半導体という。直接半導体での基礎吸収端での光吸収・発光は，光子の吸収・放出のみによって起こる直接遷移（あるいは垂直遷移ともいう）となる。直接遷移は，間接遷移よりもはるかに高い遷移確率を示す。すなわち，直接半導体は光る半導体であるということが出来る。直接半導体の基礎吸収端付近での吸収係数は

$$\alpha = \frac{\omega}{6\epsilon_0 c} |\mu_{cv}|^2 J_{cv} \quad (3.1)$$

で与えられる。ここで， $\mu_{cv}$  は価電子帯・伝導帯間の遷移双極子モーメント，

$$J_{cv} = \frac{2}{(2\pi)^3} \int d^3k \delta(E_{cv} - \hbar\omega) \quad (3.2)$$

はエネルギー保存則を満たすすべての電子・正孔の組み合わせについての和を取ることから出てくる因子で，結合状態密度とよばれる。 $E_{cv} = E_c - E_v$  は，伝導帯電子のエネルギー  $E_c$  と価電子帯正孔のエネルギー  $E_v$  の差である。価電子帯の上端と伝導帯の下端とがともに  $\mathbf{k} = 0$  にあり，バンドがともに放物線的でかつ球対称（等方的）な場合は

$$J_{cv} = \frac{1}{2\pi^2} \left( \frac{2\mu}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{\hbar\omega - E_g} \quad (3.3)$$

となる。ここで， $\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_e} + \frac{1}{m_h}$ ， $m_e$  と  $m_h$  はそれぞれ電子と正孔の有効質量， $E_g$  はバンドギャップエネルギーである。

化合物半導体は多くが直接半導体であるが，すべてが直接半導体であるわけではない。III-V 族化合物半導体では，AlN, GaN, InN, InP, GaAs, InAs, GaSb, InSb が直接半導体となるのに対して，AlP, GaP, AlAs, AlSb は間接半導体である。II-VI 族化合物半導体は，ZnO, ZnS, ZnSe, ZnTe, CdS, CdSe, CdTe, HgTe などがすべて直接半導体である。また，IV-IV 族化合物半導体の SiC はすべての結晶形が間接半導体とされている。

なお，[図 29](#) からわかるとおり，Ge→GaAs→ZnSe となるにつれ，イオン結合性が大きくなるのに伴ってバンドギャップエネルギーが大きくなっていく。これは，この順に隣接原子間の波動関数の重なりが小さくなってバンド幅が小さくなることに起因しており，半導体全般に見られる傾向である。

化合物半導体では，構成原子が  $sp^3$  混成軌道による正四面体的結合を形成するが，伝導帯の底付近は s 軌道的，価電子帯の頂上付近は p 軌道的な性格を持つ。閃亜鉛鉱型半導体の場合，p 軌道的性格を有する価電子帯は全角運動量を用いて分類される以下の 3 つのバンドから構成される。

**重い正孔 (heavy hole) ( $\Gamma_8$ )**

$$\left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (X + iY)\alpha \quad (3.4a)$$

$$\left| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle = \frac{i}{\sqrt{2}} (X - iY)\beta \quad (3.4b)$$

**軽い正孔 (light hole) ( $\Gamma_8$ )**

$$\left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \frac{i}{\sqrt{6}} [(X + iY)\beta - 2Z\alpha] \quad (3.5a)$$

$$\left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} [(X - iY)\alpha + 2Z\beta] \quad (3.5b)$$

### スピン軌道分裂バンド (spin-orbit split-off band) ( $\Gamma_7$ )

$$\left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} [(X + iY)\beta + Z\alpha] \quad (3.6a)$$

$$\left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = \frac{i}{\sqrt{3}} [-(X - iY)\alpha + Z\beta] \quad (3.6b)$$

ここで、 $|j, m_j\rangle$  の  $j$  と  $m_j$  はそれぞれ全角運動量とその  $z$  成分の固有値を与える量子数 ( $j^2$  の固有値は  $j(j+1)$ ,  $j_z$  の固有値は  $m_j$ ) である。重い正孔と軽い正孔は  $\Gamma$  点 ( $\mathbf{k} = 0$ ) で縮退し、スピン軌道分裂バンドはスピン軌道相互作用によって分裂している。そのエネルギー差は GaAs の場合で  $\Delta_{so} = 0.34$  eV, InP で  $\Delta_{so} = 0.11$  eV である ( $\Delta_{so} > 0$  はスプリットオフバンドが下にあることを示す)。一方、伝導帯はスピン以外の縮退はなく、

### 電子 (electron) ( $\Gamma_6$ )

$$\left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle_{cb} = S\alpha \quad (3.7a)$$

$$\left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle_{cb} = S\beta \quad (3.7b)$$

となっている。電子 ( $\Gamma_6$  バンド) とスプリットオフ正孔 ( $\Gamma_7$  バンド) は分散が球対称で、その有効質量は方向によらず一定となる。GaAs では  $m_c^* = 0.067m_0$ ,  $m_{so}^* = 0.15m_0$  ( $m_0$  は電子の静止質量) である。それに対して、重い正孔と軽い正孔 ( $\Gamma_8$  バンド) は立方対称で、方位によって有効質量が異なる。 $\mathbf{k} \parallel (100)$  では

$$m_{hh} = (\gamma_1 - 2\gamma_2)^{-1}m_0 \quad (3.8a)$$

$$m_{lh} = (\gamma_1 + 2\gamma_2)^{-1}m_0 \quad (3.8b)$$

$\mathbf{k} \parallel (111)$  では

$$m_{hh} = (\gamma_1 - 2\gamma_3)^{-1}m_0 \quad (3.9a)$$

$$m_{lh} = (\gamma_1 + 2\gamma_3)^{-1}m_0 \quad (3.9b)$$

で与えられる。ここで、 $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$  は Luttinger パラメータとよばれる量で、GaAs の場合、 $\gamma_1 = 6.85$ ,  $\gamma_2 = 2.10$ ,  $\gamma_3 = 2.90$  (したがって、 $\mathbf{k} \parallel (100)$  で  $m_{hh} = 0.38m_0$ ,  $m_{lh} = 0.090m_0$ ,  $\mathbf{k} \parallel (111)$  で  $m_{hh} = 0.95m_0$ ,  $m_{lh} = 0.079m_0$ ) とされている。

ウルツ鉱構造では、価電子帯の正孔のバンドの性質が異なってくる。

### 重い正孔 (heavy hole) ( $\Gamma_9$ )

$$\left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(X + iY)\alpha \quad (3.10a)$$

$$\left| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle = \frac{i}{\sqrt{2}}(X - iY)\beta \quad (3.10b)$$

### 軽い正孔 (light hole) ( $\Gamma_7$ )

$$\left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(X + iY)\beta \quad (3.11a)$$

$$\left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = \frac{i}{\sqrt{2}}(X - iY)\alpha \quad (3.11b)$$

## 結晶場分裂バンド (crystal-field split-off band) ( $\Gamma_7$ )

$$\left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = Z\alpha \quad (3.12a)$$

$$\left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = Z\beta \quad (3.12b)$$

重い正孔と軽い正孔はスピン軌道相互作用によって分裂し、その分裂幅は GaN の場合  $\Delta_{so} = 16 \text{ meV}$ 、軽い正孔と結晶場分裂正孔は結晶場によって分裂しており、分裂幅は GaN で  $\Delta_{cr} = 21 \text{ meV}$  である。窒化物半導体の電子・正孔の有効質量は閃亜鉛鉱構造半導体のそれらと比較して大きい。GaN の場合、 $\mathbf{k} \parallel [0001]$  に対して  $m_e = 0.20m_0$ 、 $m_{hh} = 1.76m_0$ 、 $m_{lh} = 1.76m_0$ 、 $m_{ch} = 0.16m_0$ 、 $\mathbf{k} \perp [0001]$  に対して  $m_e = 0.23m_0$ 、 $m_{hh} = 1.61m_0$ 、 $m_{lh} = 0.14m_0$ 、 $m_{ch} = 1.04m_0$  とされている。

## 3.4 化合物半導体混晶

化合物半導体は、異なる半導体を任意の組成比で固溶させた**半導体混晶 (semiconductor alloy)** を容易に作製できる。これは、化合物半導体の最も重要な特徴の一つである。III-V 族化合物半導体の場合を例にとると、以下のような半導体混晶が利用可能である。

- **3 元混晶:**  $A_x^{\text{III}}B_{1-x}^{\text{III}}D^{\text{V}}$ ,  $A^{\text{III}}D_x^{\text{V}}E_{1-x}^{\text{V}}$
- **4 元混晶:**  $A_x^{\text{III}}B_{1-x}^{\text{III}}D_y^{\text{V}}E_{1-y}^{\text{V}}$ ,  $A_x^{\text{III}}B_y^{\text{III}}C_{1-x-y}^{\text{III}}D^{\text{V}}$ ,  $A^{\text{III}}D_x^{\text{V}}E_y^{\text{V}}F_{1-x-y}^{\text{V}}$

### 3.4.1 半導体混晶を用いたバンドギャップエンジニアリング

混晶の組成を変えることで、バンドギャップエネルギー、格子定数、有効質量、誘電率、屈折率などの物性値を連続的に（かつ、ほとんどの場合単調に）変化させることができる。化合物半導体はヘテロエピタキシー技術によって高品質なヘテロ接合を作製できることとあいまって、化合物半導体を用いて極めて高い自由度で多彩な機能を持ったデバイスが実現できるようになる。その意味で、化合物半導体は高い自由度で設計可能な、エンジニアリング可能な材料といえることができる。特に、バンドギャップエネルギーは発光デバイスの発光波長を決定すると同時に、ヘテロ構造におけるバンドオフセットに直接関わる重要な物性値である。化合物の組み合わせの選択と混晶半導体の組成制御によって、広い範囲で連続的にバンドギャップエネルギーをコントロールできるというのは極めて重要な特徴である。この点に着目して材料・デバイスの設計をおこなう手法のことを**バンドギャップエンジニアリング (bandgap engineering)** という。<sup>\*19</sup>

図 30 に代表的な 3 元混晶半導体である  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  の格子定数とバンドギャップエネルギーの Al 組成  $x$  組成依存性をしめす。格子定数とバンドギャップエネルギーはともに組成に対して連続的に変化している。GaAs は直接型のバンドギャップ、AlAs は間接型のバンドギャップを有するが、 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  は  $x < 0.45$  の GaAs に近い組成領域では直接型、 $x > 0.45$  の AlAs に近い組成領域では間接型になる。

格子定数の Al 組成  $x$  に対する依存性は以下のようにほぼ線形と見なせる。

$$a(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}) = xa(\text{AlAs}) + (1-x)a(\text{GaAs}) \quad (3.13)$$

<sup>\*19</sup> バンドギャップエネルギーだけでなく他の物性値もバンド構造の変化から制御しようという、より広義の手法をバンドエンジニアリングとよぶ。

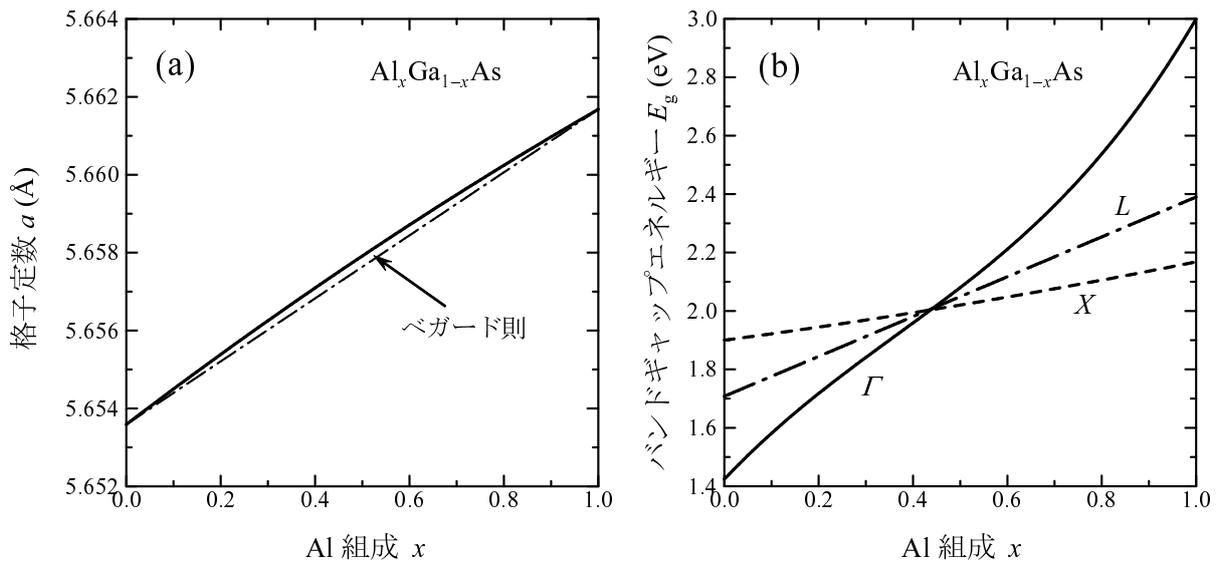


図 30 3 元混晶半導体  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  の格子定数 (a) とバンドギャップエネルギー (b) の Al 組成  $x$  依存性。 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  は  $x < 0.45$  の GaAs に近い組成領域では直接型、 $x > 0.45$  の AlAs に近い組成領域では間接型になる。

このように混晶の物性値が組成比に対して線形に変化する性質をベガード則 (Vegard's rule) とよぶ。ほとんどの混晶半導体での格子定数でベガード則がほぼ成り立つものとされている。一方、バンドギャップエネルギーは、どの混晶半導体でも組成に対する線形関係からかなり外れる。このような線形関係からのずれをボーイング (bowing) という。多くの 3 元混晶のバンドギャップエネルギーは、以下のように組成に対する 2 次式で近似できる。

$$E_g(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}) = x E_g(\text{AlAs}) + (1 - x) E_g(\text{GaAs}) + Bx(1 - x) \quad (3.14)$$

ここで、ベガード則からのずれを表す項の係数  $B$  はボーイングパラメータとよばれる。

いずれにせよ、バンドギャップを含めた様々な物性値をかなり自由に混晶組成によってコントロールできる点は極めて重要である。ただし、ほとんどの化合物半導体デバイスがヘテロエピタキシーによって作製されるという事実から、格子定数に関する強い制限が加わることに注意しなければならない。大型で良質な単結晶基板が入手できる化合物半導体は、GaAs、InP などに限られる。良質なヘテロエピタキシーは下地結晶とほぼ同じ格子定数を有する材料でしか実現できないので、バンドギャップエンジニアリングは、閃亜鉛鉱構造結晶の場合、GaAs や InP と格子整合する組成の範囲内でおこなわなければいけない。代表的な III-V 族化合物半導体の格子定数とバンドギャップエネルギーの関係をしめしたのが図 31 である。GaAs や InP といった基板結晶と格子整合し、かつ所望のバンドギャップを有する直接遷移型の化合物半導体をこの図から選択する必要がある。格子定数とバンドギャップはともに組成の関数なので、パラメータが 1 つしかない 3 元混晶では、一般に、格子整合系で望みのバンドギャップを得ることはできない。<sup>\*20</sup> これに対して、4 元混晶では格子整合系においてもバンドギャップをある程度自由に制御することが可能である。

<sup>\*20</sup> AlAs と GaAs の格子不整合は 0.12% と小さく、そのため、3 元混晶半導体  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  は全組成領域にわたって GaAs に“ほぼ”格子整合する。これは例外的な材料系である。最初の半導体レーザーは AlGaAs を用いて実現されたが、このような性質を有する材料が最初の半導体レーザーの材料として選ばれたのはまったく幸運であったといえる。

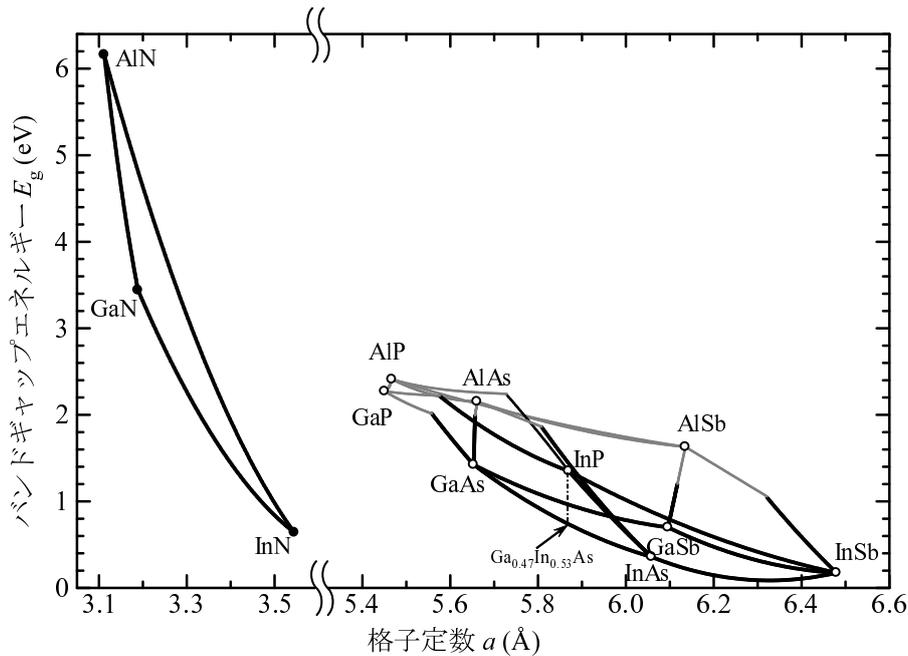


図 31 III-V 族化合物半導体の格子定数とバンドギャップエネルギーの関係。黒丸はウルツ鉱型結晶，白丸は閃亜鉛鉱型結晶のものである。元化合物を結ぶ線が 3 元混晶を表し，それに囲まれた領域が 4 元混晶を表す。黒の実線は直接遷移型，灰色の実線は間接遷移型ギャップであることをしめす。

### 3.4.2 特殊な例—GaNAs, GaNP

3 元混晶半導体  $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x}$ ,  $\text{GaN}_x\text{P}_{1-x}$  は奇妙な性質を持つ三元混晶半導体である。これらはいずれも、 $x$  が 0 に近い組成領域では閃亜鉛鉱型の結晶を成長することができるが、そのバンドギャップの組成依存性には極めて大きな bowing があるとされている。そのため、GaAs に格子整合する GaInNAs は 1.4 eV から 0 eV までのバンドギャップをとることが可能となり、これを用いて光通信波長帯で動作する半導体レーザが実現できる可能性がある。 $\text{Ga}_{0.7}\text{In}_{0.3}\text{N}_{0.01}\text{As}_{0.99}/\text{GaAs}$  レーザでは伝導帯のオフセットを約 350 meV と、GaInAsP 系の 3 倍以上に大きくすることができ、温度特性を大幅に改善できる。

### 3.4.3 混晶における秩序化

混晶半導体においては、III 族副格子、あるいは V 族副格子を占有する複数の元素は完全にランダムな配列になっていると長い間考えられてきた。しかしながら、一部の混晶半導体では、副格子内での元素の配列にある種の秩序性が生じる場合があることがわかってきた。たとえば、GaAs に格子整合する  $\text{Ga}_{0.5}\text{In}_{0.5}\text{P}$  では、III 族副格子上での Ga と In の秩序だった配列（これを自然超格子とよぶ）が実現される場合があり、それによってバンドギャップエネルギーが低下することがわかっている。 $\text{Ga}_{0.5}\text{In}_{0.5}\text{P}$  の秩序構造は、 $[\bar{1}11]\text{B}$  方向に Ga 過剰面と In 過剰面とが交互に積層した CuPt 型超格子構造である。これに対して、たとえば、AlGaAs は、Al と Ga の結合半径がほぼ等しいため、こうした秩序構造のない完全無秩序構造になっていると考えられる。

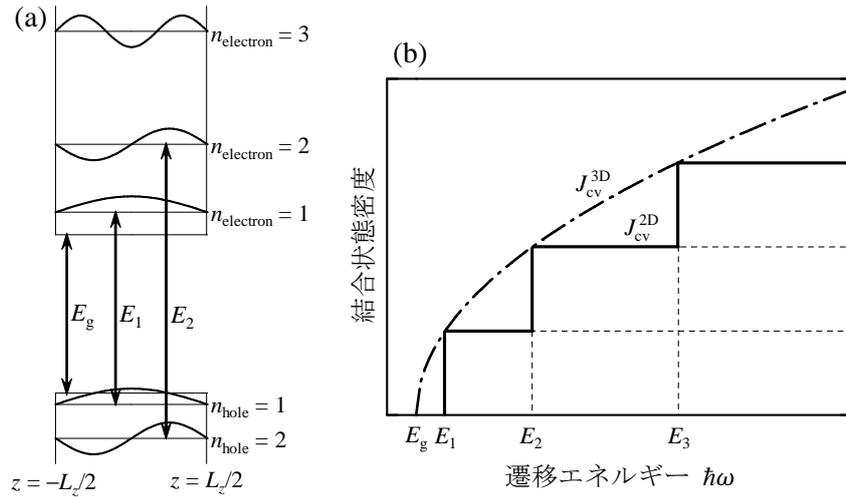


図 32 無限大障壁量子井戸の (a) 量子化された電子・正孔の準位と波動関数, (b) 結合状態密度関数 (実線は量子井戸の状態密度  $J_{cv}^{2D}$ , 一点鎖線はバルク結晶の状態密度  $J_{cv}^{3D}$ )

### 3.5 低次元化による特性制御

数 nm から  $\mu\text{m}$  程度のサイズの微細な構造に電子, 正孔を閉じ込めると, 閉じ込め方向に運動が量子化されることにより種々の特殊な性質が現れてくる。電子などを 1 次元方向に閉じ込め 2 次元の運動の自由度を残した系を**量子井戸 (quantum well)**, 2 次元方向から閉じ込めて 1 次元の運動自由度を残したものを**量子細線 (quantum wire)**, 3 次元方向から閉じ込めてしまったものを**量子ドット (quantum dot)** という。こうした量子構造を巧みに利用することで化合物半導体デバイスの特性を段階に向上させることができる。以下では, 化合物半導体量子井戸を中心に述べる。半導体量子井戸中では電子状態の量子化が起こり, それに起因して様々な特殊な特性が発現する。これを量子化効果という。

#### 3.5.1 量子化による結合状態密度の変化

無限大障壁  $V = \infty$  によって  $z$  方向の  $L_z$  の範囲に閉じ込められた 2 次元系 (量子井戸) を考えよう。固有関数の  $z$  依存性は

$$\phi(z) = \sqrt{\frac{2}{L_z}} \sin \frac{n\pi}{L_z} \left( z + \frac{L_z}{2} \right) \quad (3.15)$$

で与えられ, これに対応するエネルギー固有値は

$$E_n(\mathbf{k}) = E_g + \frac{\hbar^2}{2m^*} \left( \frac{n\pi}{L_z} \right)^2 + \frac{\hbar^2}{2m^*} (k_x^2 + k_y^2) \quad (n = 1, 2, \dots) \quad (3.16)$$

となる。光学遷移に関与する結合状態密度は

$$J_{cv}^{2D} = \frac{\mu}{\pi\hbar^2} \sum_n \Theta(\hbar\omega - E_g - E_n) \quad (3.17)$$

となる。 $\Theta(x)$  は  $x < 0$  で 0,  $x \geq 0$  で 1 となるステップ関数である。無限大障壁量子井戸の電子・正孔の波動関数と状態密度関数を図 32 に示す。この状態密度の変化は, 発光効率の上昇やその温度特性の改善など, 発光デバイスの好ましい特性改善をもたらすことになる。

量子細線では、こうした特性改善はさらに顕著になる。無限大障壁によって  $y, z$  方向のそれぞれ  $L_y, L_z$  の範囲に閉じ込められた 1 次元系（量子細線）での遷移エネルギーは

$$E_n(k_x) = E_g + \frac{\hbar^2}{2m^*} \left( \frac{\pi n_y}{L_y} \right)^2 + \frac{\hbar^2}{2m^*} \left( \frac{\pi n_z}{L_z} \right)^2 + \frac{\hbar^2}{2m^*} k_x^2 \quad (n_y, n_z = 1, 2, \dots) \quad (3.18)$$

で与えられる。各量子準位  $(n_y, n_z)$  を考慮すると、この系の状態密度は

$$J_{cv}^{1D} = \frac{\sqrt{2\mu}}{\pi\hbar} \sum_{n_y, n_z} (\hbar\omega - E_g - E_{n_y} - E_{n_z})^{-1/2} \quad (3.19)$$

となる。 $x, y, z$  各方向に閉じ込められた 0 次元系（量子ドット）の状態密度は

$$J_{cv}^{0D} = 2 \sum_{n_x, n_y, n_z} \delta(\hbar\omega - E_g - E_{n_x} - E_{n_y} - E_{n_z}) \quad (3.20)$$

とデルタ関数で表されるようになり、さらに顕著な特性変化が起こることになる。

### ■半導体量子井戸の電子状態

**量子井戸中の電子** 上述の量子閉じ込め効果により、量子井戸中の電子の運動は  $z$  方向（閉じ込め方向、量子化軸）に量子化され、それに垂直な方向（ $x$  方向、 $y$  方向）に残った自由度による分散が加わる。その結果、電子の準位とその分散曲線は量子数  $n_{\text{electron}}$  で表される複数の状態に分割されることになる。個々の量子数で指定される各状態をサブバンド (subband) とよぶ。

**量子井戸中の正孔** 正孔も電子と同様に量子閉じ込め効果によりサブバンドが形成されることになるが、もともと複数の準位が存在すること、分散の異方性があることからその構造は極めて複雑なものとなる。量子閉じ込め効果により、まず、バルク半導体では縮退していた  $m_j = \pm\frac{3}{2}$  バンド（重い正孔）と  $m_j = \pm\frac{1}{2}$  バンド（軽い正孔）とが、有効質量が異なるために分裂する。ここで注意が必要なのは、量子井戸の場合には「重い正孔」、「軽い正孔」というよび方はまったく無意味になってしまうことである。井戸層面内 ( $xy$  面) での運動を特徴付ける有効質量は、 $m_j = \pm\frac{3}{2}$  バンド（重い正孔）と  $m_j = \pm\frac{1}{2}$  バンド（軽い正孔）に対してそれぞれ

$$m_{hh}^{xy} = (\gamma_1 + \gamma_2)^{-1} m_0 \quad (3.21a)$$

$$m_{lh}^{xy} = (\gamma_1 - \gamma_2)^{-1} m_0 \quad (3.21b)$$

で与えられる。 $\gamma_2$  は正なので  $m_{hh}^{xy} < m_{lh}^{xy}$  となることに注意（量子化軸方向では  $m_{hh}^z > m_{lh}^z$  である）。この異方性による質量逆転のために、正孔のサブバンドは重い正孔・軽い正孔間の縮退が解けるだけでなく、バンド混合による著しい非放物線性などが導入されることになる。

**量子準位間の遷移** 電子正孔間の遷移の運動量行列要素は TE, TM 各モードに対して以下の式で与えられる。

#### 重い正孔-電子間遷移

$$|M_{hh}|^2 = \begin{cases} \frac{3}{4} |M|^2 (1 + \cos^2 \theta) = \frac{3}{4} |M|^2 \left( 1 + \frac{k_z^2}{k^2} \right) = \frac{3}{4} |M|^2 \left( 1 + \frac{E_{z,n}}{E_n} \right) & \text{(TE モード)} \\ \frac{3}{2} |M|^2 \sin^2 \theta = \frac{3}{2} |M|^2 \left( 1 - \frac{k_z^2}{k^2} \right) = \frac{3}{2} |M|^2 \left( 1 - \frac{E_{z,n}}{E_n} \right) & \text{(TM モード)} \end{cases} \quad (3.22)$$

## 軽い正孔-電子間遷移

$$|M_{lh}|^2 = \begin{cases} \frac{1}{4} |M|^2 (1 + \cos^2 \theta) + |M|^2 \sin^2 \theta = \frac{1}{4} |M|^2 \left(1 + \frac{E_{z,n}}{E_n}\right) + |M|^2 \left(1 - \frac{E_{z,n}}{E_n}\right) & (\text{TE モード}) \\ \frac{1}{2} |M|^2 \sin^2 \theta + 2 |M|^2 \cos^2 \theta = \frac{1}{2} |M|^2 \left(1 - \frac{E_{z,n}}{E_n}\right) + 2 |M|^2 \frac{E_{z,n}}{E_n} & (\text{TM モード}) \end{cases} \quad (3.23)$$

ここで、 $M = m_0 \sqrt{\frac{1}{6m_c^*} \frac{E_g(E_g + \Delta_0)}{E_g + \frac{2}{3}\Delta_0}}$  はバルク半導体における遷移の運動量行列要素、 $\theta$  は量子化軸 ( $z$  軸) と電子の波数ベクトル  $\mathbf{k}$  のなす角である。サブバンド端 ( $E_{z,n} = E_n$  ゆえに  $\theta = 0$ ) では、

$$|M_{hh}|^2 = \begin{cases} \frac{3}{2} |M|^2 & (\text{TE モード}) \\ 0 & (\text{TM モード}) \end{cases} \quad (3.24a)$$

$$|M_{lh}|^2 = \begin{cases} \frac{1}{2} |M|^2 & (\text{TE モード}) \\ 2 |M|^2 & (\text{TM モード}) \end{cases} \quad (3.24b)$$

となる。

量子井戸レーザでは、量子化による特性変化を反映して、低閾値化、微分量子効率上昇、光出力上昇、特性温度上昇、変調可能周波数上昇、線幅増大係数 ( $\alpha$  パラメータ) 減少といった好ましい特性が得られる。また、上述の偏光依存性によって利得に強い異方性が生じるところも、バルク (ダブルヘテロ) レーザと際立って異なる特徴である。

**■窒化物半導体の場合** 窒化物半導体の場合、もともと重い正孔と軽い正孔の縮退が結晶場によって解けていることに加えて、重い正孔と軽い正孔の  $c$  軸方向の有効質量に差がないことから、量子化によるバンド端付近での電子状態の変化は閃亜鉛鉱型半導体と比べて大きくない。ただしそれでも、量子井戸化による状態密度の変化は利用できる。

窒化物半導体では、自発分極の存在による内部電場の発生がより重要である。自発分極を有する試料の表面、界面には分極電荷が現れ、それによって内部電場 (反電場) が生じる。バルク試料の場合には表面の分極電荷は空気中のイオンなどによって中和されてこの効果は現れない。しかし、ヘテロ界面を有する窒化物半導体デバイスの場合には、界面を挟んだ両側の材料の自発分極の差と等しい大きさの分極電荷がヘテロ界面に現れ、これによって強い内部電場が生じることになる。分極がヘテロ界面に垂直な場合、この内部電場の大きさは

$$E = -\frac{\Delta P}{\epsilon_r \epsilon_0} \quad (3.25)$$

となる。ここで、 $\Delta P$  はヘテロ界面両側の分極の差、 $\epsilon_r$  は材料の比誘電率である。窒化物半導体はいずれも理想的ウルツ鉱構造からはずんだ結晶構造となっており、大きな自発分極を有する。AIN の自発分極は  $P_{sp} = -0.081 \text{ C/m}^2$ 、GaN は  $P_{sp} = -0.029 \text{ C/m}^2$ 、InN は  $P_{sp} = -0.032 \text{ C/m}^2$  である。これに起因して発生する内部電場は MV/cm のオーダーの非常に大きなものである。レーザ活性層内の電子と正孔の波動関数がこれによって反対方向へシフトし、波動関数どうしの重なりが著しく小さくなって発光効率が低下する原因となっている。現在は、これを避けるために、従来用いられてきた (0001) ( $c$  面) 基板ではなく、(1 $\bar{1}$ 00) ( $m$  面) 基板や (11 $\bar{2}$ 0) ( $a$  面) などの非極性基板や、(11 $\bar{2}$ 2) などの半極性面を用いた窒化物発光デバイスの研究・開発が活発におこなわれている。

### 3.5.2 歪の効果

基板と格子定数の異なる（格子不整合のある）結晶を成長しようとするとき、ある膜厚以上で成長層に転位が入り、良質な結晶成長ができなくなる。この転位の入り始める膜厚を**臨界膜厚 (critical thickness)**という。臨界膜厚以下では、転位が入らず、基板と同じ格子定数になるように歪んだ状態でコヒーレントなヘテロエピタキシャル成長が進行する。成長層の本来の格子定数が基板と比べて大きければ圧縮歪が、小さければ引張り歪導入される。格子定数の違いによって生じた二軸性応力のために、ヘテロ界面に平行な方向の格子定数が変化すると同時に、界面垂直方向の格子定数も変化する。この歪の導入によってバンド構造が変化し、これを利用して特性向上を実現できる。その一つの例が、活性層に歪のある量子井戸を導入したレーザー、すなわち**歪量子井戸 (strained quantum well)**レーザーである。

基板の格子定数を  $a$ 、成長層本来の格子定数を  $a + \Delta a$  とすると、格子不整合による歪は

$$\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \varepsilon_{\parallel} = -\frac{\Delta a}{a} \quad (3.26a)$$

$$\varepsilon_{zz} = \varepsilon_{\perp} \neq 0 \quad (3.26b)$$

$$\varepsilon_{xy} = \varepsilon_{yz} = \varepsilon_{zx} = 0 \quad (3.26c)$$

で与えられる。 $\varepsilon_{\parallel} < 0$  が圧縮歪に、 $\varepsilon_{\parallel} > 0$  が引張り歪に対応する。一方、これに作用する二軸性応力は

$$\sigma_{xx} = \sigma_{yy} = \sigma \quad (3.27a)$$

$$\sigma_{zz} = 0 \quad (3.27b)$$

$$\sigma_{xy} = \sigma_{yz} = \sigma_{zx} = 0 \quad (3.27c)$$

なので、点群  $\bar{4}3m$  の閃亜鉛型結晶では

$$\begin{pmatrix} \sigma \\ \sigma \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{11} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{12} & c_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varepsilon_{\parallel} \\ \varepsilon_{\parallel} \\ \varepsilon_{\perp} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3.28)$$

が成り立つ。ここで、 $c_{ij}$  は  $6 \times 6$  の行列形式に縮約した弾性定数テンソルである。これから、

$$\varepsilon_{\perp} = -\frac{2c_{12}}{c_{11}}\varepsilon_{\parallel} \approx -\varepsilon_{\parallel} \quad (3.29)$$

の関係があることがわかる。なお、多くの正四面体方構造の半導体では  $c_{11} \approx 2c_{12}$  の関係が成り立っている。また、この歪は、次のような体積変形歪  $\varepsilon_{\text{vol}}$  と軸性変形歪  $\varepsilon_{\text{ax}}$  の合成とみなすこともできる。

$$\varepsilon_{\text{vol}} = \frac{\Delta V}{V} \approx \varepsilon_{\parallel} \quad (3.30a)$$

$$\varepsilon_{\text{ax}} \approx -2\varepsilon_{\parallel} \quad (3.30b)$$

この歪によってエピタキシャル膜内に膜厚に比例した応力エネルギーが蓄積し、これが転位発生に必要なエネルギーを超えるところが臨界膜厚である。格子不整合  $\Delta a/a$  が 1% 程度のときの典型的な臨界膜厚は数十 nm 程度である。

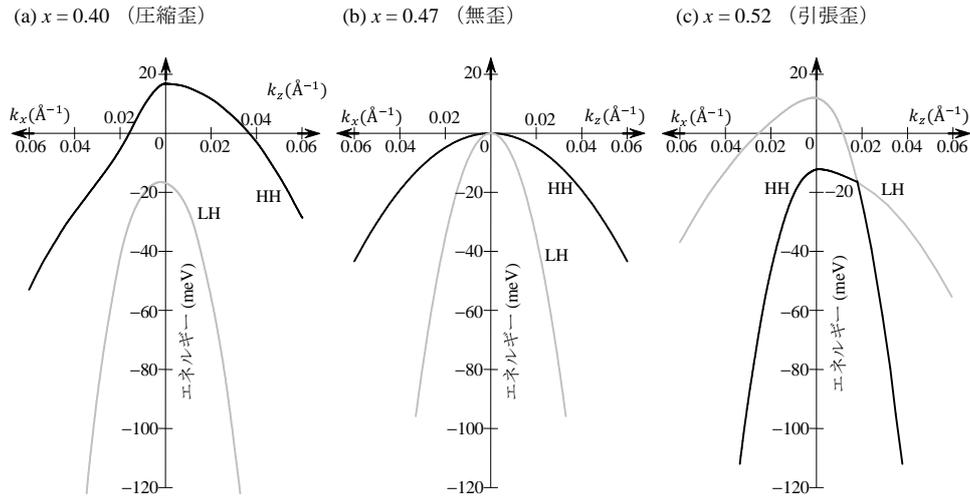


図 33 InP 基板上  $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}$  の価電子帯構造。  $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}$  は Ga 組成  $x = 0.47$  で InP に格子整合する。歪の導入によってバンド構造が大きく変化している。伝導帯は Ga 組成  $x$  の増加とともに、バンドの形を変えずに単調に高エネルギー側へシフトする。

上述の体積変形歪によって価電子帯と伝導帯がシフトする結果バンドギャップが変化し、軸性変形歪によって価電子帯の構造が変化する。図 33 に InP 基板上の  $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}$  のバンド構造を、歪のない（格子整合している）場合、圧縮歪が入った場合、引張り歪が入った場合についてしめす。体積歪にともなうバンドギャップ変化と軸性変形歪による価電子帯の構造変化が見て取れる。前者によって発振波長の制御が、後者を利用して低閾値化、高速変調特性の向上、偏光の制御などが実現できる。GaInAsP 系長波長レーザ、AlGaInP 系赤色レーザではこれらの歪量子井戸の特性が積極的に利用されている。

一方、窒化物半導体では、上述の歪の導入による特性改善手法はあまり効果を発揮しない。量子化効果と同様、歪によっても、窒化物半導体の電子構造は大きく変化しないからである。むしろ、窒化物半導体における歪の効果として重要なのは、圧電（ピエゾ）効果による分極の影響である。窒化物半導体のような点群  $6mm$  の結晶の場合、歪  $\varepsilon$  によって発生する圧電分極は

$$\begin{pmatrix} P_x^{\text{piezo}} \\ P_y^{\text{piezo}} \\ P_z^{\text{piezo}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & e_{15} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e_{15} & 0 & 0 \\ e_{31} & e_{31} & e_{33} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} \\ \varepsilon_{yy} \\ \varepsilon_{zz} \\ \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{zx} \\ \varepsilon_{xy} \end{pmatrix} \quad (3.31)$$

で与えられる。ここで、 $e_{ij}$  は圧電定数である。c 面基板上に成長した窒化物半導体の場合、 $\varepsilon_{yz} = \varepsilon_{zx} = \varepsilon_{xy} = 0$  なので、圧電分極は z 成分だけを持ち、

$$P^{\text{piezo}} = \left( e_{33} - \frac{c_{33}}{c_{31}} e_{31} \right) \varepsilon_{zz} \hat{z} \quad (3.32)$$

となる。GaN の場合、 $e_{33} = 0.73 \text{ C/m}^2$ 、 $e_{31} = -0.49 \text{ C/m}^2$  と報告されている。面内圧縮歪が加わると、この圧電分極は自発分極と反対向きになる。圧電分極の大きさも MV/cm のオーダーになり、この効果を十分に考慮する必要がある。

# 目次

|       |                        |    |
|-------|------------------------|----|
| 0     | はじめに                   | 1  |
| 0.1   | 講義の目標                  | 1  |
| 0.2   | 教科書・参考書                | 1  |
| 0.3   | 講義の概要と進め方              | 2  |
| 1     | 屈折率と光学材料               | 2  |
| 1.1   | マクスウェル方程式              | 2  |
| 1.2   | 真空中の電磁波・光の伝搬           | 3  |
| 1.2.1 | 真空中の電磁波                | 3  |
| 1.2.2 | 真空中の光の強度・エネルギー・パワー     | 5  |
| 1.3   | 物質中の光の伝搬と吸収            | 6  |
| 1.3.1 | 透明媒質中の光の伝搬             | 6  |
| 1.3.2 | 吸収媒質中の光の伝搬—複素誘電率と複素屈折率 | 8  |
| 1.3.3 | 透過率と吸収係数               | 10 |
| 1.3.4 | 界面での反射と透過              | 10 |
| 1.4   | 屈折率の波長分散               | 13 |
| 1.4.1 | 双極子分散（ローレンツモデル）        | 13 |
| 1.4.2 | 自由キャリアによる分散（ドルーデモデル）   | 16 |
| 1.4.3 | 分散媒質中のパルス光の伝搬          | 16 |
|       | 群速度                    | 17 |
|       | 群速度分散                  | 18 |
| 1.5   | 屈折率の測定法                | 21 |
| 1.5.1 | クラマース・クローニッヒ解析         | 21 |
| 1.5.2 | 臨界角法                   | 21 |
| 1.5.3 | 最小偏角法                  | 22 |
| 1.5.4 | 液侵法                    | 23 |
| 1.5.5 | 干渉法                    | 23 |
| 1.5.6 | 楕円偏光解析法（エリプソメトリ）       | 25 |
| 1.5.7 | プリズムカップリング法            | 27 |
| 1.6   | 代表的な光学材料               | 28 |
| 1.6.1 | 無機ガラス系材料               | 29 |
|       | 酸化物材料                  | 29 |
|       | フッ化物材料                 | 31 |
|       | カルコゲナイドガラス             | 31 |
| 1.6.2 | プラスチック材料               | 31 |
| 1.6.3 | 金属                     | 32 |
| 1.6.4 | 半導体                    | 33 |
| 1.7   | 屈折率差を利用した光学デバイス        | 34 |
| 1.7.1 | 光学コーティング               | 34 |
|       | 反射防止膜                  | 34 |
|       | 波長選択フィルタ               | 37 |
| 1.7.2 | 光導波路                   | 37 |
|       | 薄膜導波路における光伝搬           | 37 |
|       | チャンネル導波路素子とその伝搬特性解析    | 39 |
| 2     | 偏光と異方性光学材料             | 40 |
| 2.1   | 偏光                     | 40 |

|       |                          |    |
|-------|--------------------------|----|
| 2.1.1 | 直線偏光・円偏光・楕円偏光            | 40 |
| 2.1.2 | ジョーンズベクトルを用いた表記          | 41 |
| 2.1.3 | 偏光を扱う光学素子                | 42 |
| 2.1.4 | ジョーンズベクトル・ジョーンズ行列と座標変換   | 42 |
| 2.2   | 材料の光学的異方性と異方性媒質内での光の伝搬   | 43 |
| 2.2.1 | 誘電率テンソルと異方性屈折率           | 43 |
| 2.2.2 | 異方性媒質内の光伝搬—結晶光学          | 44 |
| 2.2.3 | 一軸結晶の場合                  | 45 |
| 2.3   | 電気光学効果とその応用              | 45 |
| 2.3.1 | 電気光学効果                   | 46 |
| 2.3.2 | 1次電気光学定数                 | 46 |
| 2.3.3 | 電気光学効果による屈折率変化           | 47 |
|       | 点群 $\bar{4}2m$ の結晶       | 47 |
|       | 点群 $3m$ の結晶              | 47 |
|       | 点群 $\bar{4}3m$ の結晶       | 48 |
| 2.3.4 | 電気光学効果によって生じる現象          | 48 |
|       | 位相変調                     | 48 |
|       | 周波数変調                    | 49 |
|       | 強度変調                     | 49 |
|       | ビーム偏向                    | 49 |
|       | 導波路モード変換・フィルター           | 49 |
| 2.3.5 | 電気光学変調器                  | 49 |
|       | 縦型変調器                    | 49 |
|       | 横型変調器                    | 50 |
| 2.4   | 偏光回転の物理と応用               | 51 |
| 2.4.1 | 旋光性                      | 51 |
| 2.4.2 | 磁気光学効果                   | 51 |
| 2.4.3 | ねじれネマチック液晶               | 52 |
| 3     | 化合物半導体                   | 53 |
| 3.1   | 化合物半導体とは                 | 53 |
| 3.2   | 化合物半導体の結晶構造              | 54 |
| 3.3   | 化合物半導体の電子構造              | 55 |
| 3.4   | 化合物半導体混晶                 | 58 |
| 3.4.1 | 半導体混晶を用いたバンドギャップエンジニアリング | 58 |
| 3.4.2 | 特殊な例—GaNAs, GaNP         | 60 |
| 3.4.3 | 混晶における秩序化                | 60 |
| 3.5   | 低次元化による特性制御              | 61 |
| 3.5.1 | 量子化による結合状態密度の変化          | 61 |
|       | 半導体量子井戸の電子状態             | 62 |
|       | 窒化物半導体の場合                | 63 |
| 3.5.2 | 歪の効果                     | 64 |