

平成 30 年 5 月 15 日現在

機関番号：12601

研究種目：基盤研究(B) (一般)

研究期間：2015～2017

課題番号：15H03572

研究課題名(和文)3次元フォトリック準結晶における光禁制帯形成と光臨界状態

研究課題名(英文)Photonic band-gap formation and critical state in 3-d photonic quasicrystals

研究代表者

枝川 圭一 (Edagawa, Keiichi)

東京大学・生産技術研究所・教授

研究者番号：20223654

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 13,500,000円

研究成果の概要(和文)：準結晶固体においてその特殊な構造秩序に起因して臨界状態とよばれる特殊な電子状態が存在することが理論的に予言されているが未だに実証されていない。本研究ではフォトリック準結晶に対してFDTD法による電磁界数値シミュレーションを行い、光の系で臨界状態の形成を示すことに成功した。準結晶の特殊な構造秩序を利用して従来のフォトリック結晶よりも大きなバンドギャップを形成するフォトリック準結晶を開発することを目的に、電磁界数値シミュレーションを行った。バンドギャップサイズについて屈折率コントラストの小さい領域でフォトリック準結晶の優位性が示された。

研究成果の概要(英文)：Though the existence of peculiar type of electronic states named “critical states” has been theoretically predicted in quasicrystals (QCs), it has never been demonstrated clearly. The first purpose of this study is to demonstrate the existence of the critical states in a photonic system, using “photonic QCs”. Here, we have successfully shown the formation of photonic critical states by investigating system-size dependence of “participation” using an FDTD electromagnetic-field simulation.

Researches are in progress, aiming at the development of minute light-controlling devices and furthermore photonic integrated circuits utilizing the light-confining effect by photonic bandgaps (PBG) of photonic crystals. The second purpose of this study is to develop photonic crystals that exhibit a larger PBG than conventional photonic crystals utilizing the peculiar structural order of QCs. It is shown that photonic QCs are advantageous in the formation of PBG in a low refractive-index region.

研究分野：材料科学

キーワード：フォトリック結晶 フォトリックバンドギャップ 準結晶 臨界状態 光状態密度

### 1. 研究開始当初の背景

準結晶は、10 回対称、12 回対称等、通常の結晶には許されない回転対称性と準周期性とよばれる特殊な並進秩序によって特徴づけられる物質で、このような全く新しいタイプの秩序構造の発見[1]は、物質科学分野に大きなインパクトを与え、2011 年、発見者の Shechtman にノーベル化学賞が与えられた。準結晶の電子状態には、周期系特有の広がった状態やランダム系に現れる局在状態とは本質的に異なる臨界状態(critical state)とよばれる特殊な電子状態が現れることが理論的に予言され、ある種のモデルについて数値計算によりそのような状態の発現が示されている。一方、実験的にはそのような状態の存在は依然として明確には示されていない。このような臨界状態が実際の物質中に存在するかどうかは準結晶分野で残された重要問題の一つである。

近年、「フォトニック結晶」の光禁制帯(フォトニック・バンドギャップ(PBG))による光閉じ込め効果を利用した極小な光制御素子の開発、さらには光集積回路の実現に向けた研究が進められている。従来、フォトニック結晶による PBG 形成はフォトニック結晶の周期構造に由来して現われるものと信じられていたが、2008 年に我々は周期性を全くもたないランダムネットワーク構造でも大きな PBG が形成し、強い光閉じ込め効果が発現することを数値シミュレーションによって見出し[2]、その後、実験によって実証した[3,4]。一方、準結晶は結晶と比べて高い回転対称性をもつことから原理的に PBG の形成が容易であると考えられ、実際、屈折率比が小さい領域でフォトニック準結晶が従来のフォトニック結晶より大きな PBG を形成する可能性が理論的に指摘されている[5]。

### 2. 研究の目的

前項に述べた背景を踏まえ、本研究では、

(1) フォトニック準結晶を用いて、臨界状態の存在を光の系で実証すること

(2) フォトニック準結晶が、特に屈折率比が小さい領域で従来のフォトニック結晶よりも大きな PBG を形成することを実証すること

の 2 つを目的とした。

### 3. 研究の方法

(1) フォトニック準結晶における光臨界状態の形成

図 1 (a)のような円柱の 2 次元配列からなるフォトニック準結晶の数値モデルを作成した。準結晶構造としては Stampfli's tiling とよばれる 12 回対称準結晶を用いた。一般に準結晶構造は高次元結晶の実次元空間への射影により得られる。このとき実次元空間

は高次元結晶と非整合な方位関係をもつ。この非整合性を特徴付ける無理数を有理数で近似することにより近似結晶とよばれる局所構造が準結晶と似通った結晶構造が得られる。近似する有理数を系統的に変えることにより低次から高次の一連の近似結晶構造が得られる。図 2 にそのようにして作成した一連の近似結晶構造の単位胞を示す。これらのタイリングの頂点位置に円柱を配置することによりフォトニック準結晶(近似結晶)の数値モデルを作成した(図 1 (b))。

作成した一連の数値モデルに対して、FDTD法を用いて TM モードのフォトニックバンド計算を行った。このとき円柱を Si、すき間を空気と仮定して屈折率比を 3.5 とした。得られた固有状態の電場分布に対して、次式で定義される Participation を計算した。

$$P = \frac{\left( \int |\mathbf{E}(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} \right)^2}{\int |\mathbf{E}(\mathbf{r})|^4 d\mathbf{r}}$$

### (2) フォトニック準結晶における PBG 形成

(1)で作成したフォトニック準結晶に加えて、六方晶、正方晶のフォトニック結晶を同様な方法で作成し、TM モードのフォトニックバンド計算を行った。このとき屈折率比を 1.0 ~ 3.7 の範囲で変化させた。各屈折率比において円柱半径を変化させて最大の PBG 幅を求め、その値の屈折率比依存性を調べた。

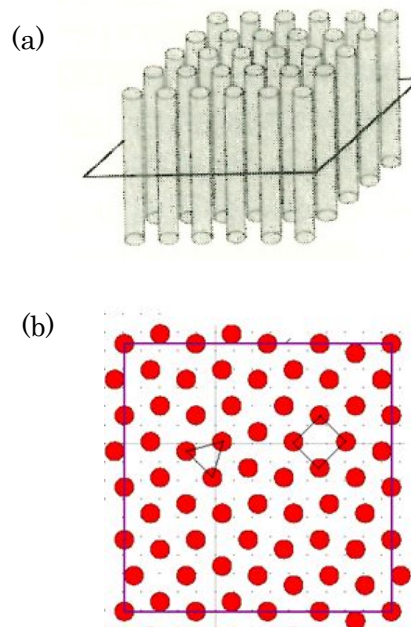


図 1 作成した数値モデルの模式図。(a)外観と(b)フォトニック準結晶構造の例。

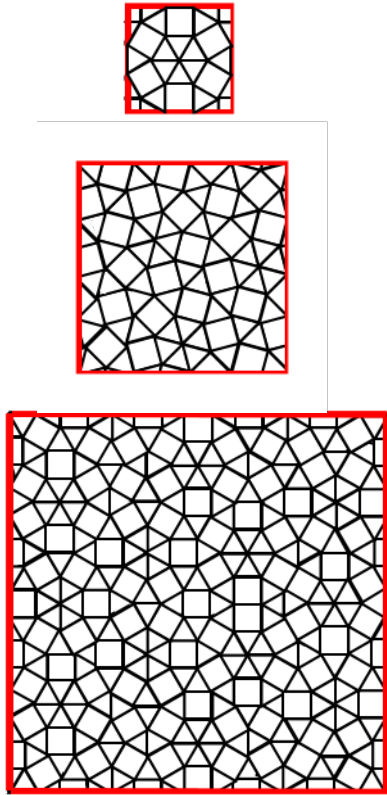


図 2 Stampfli's tiling の次数の異なる 3 つの近似結晶構造

#### 4. 研究成果

##### (1) フォトニック準結晶における光臨界状態の形成

得られたフォトニックバンド構造の例を図 3 に示す。規格化角振動数が 0.29-0.41 の範囲に PBG が形成していることがわかる。得られた各固有状態に対して計算した Participation を固有角振動数に対してプロットしたものを図 4 (a) に示す。  $< 0.15$  の低周波数域で  $P$  がほぼ一定値となっている。この  $P$  の値は計算に用いた pixel の数と大体一致し、固有状態が extended state であることを示している。

続いて図 4 (b) に示した PBG 直上(領域 1) 直下(領域 2) PBG から大きく離れた低振動数域(領域 3) の固有状態の電場分布に対して計算した Participation のシステムサイズ依存性を図 5 に示す。いずれの場合も

$$P \propto N^\alpha$$

の依存性がみえる。  $\alpha$  の値は領域 1, 2, 3 それぞれで、0.77, 0.77, 0.98 である。理論的には固有状態が extended state の場合  $\alpha = 1$ 、localized state の場合  $\alpha = 0$  で、critical state の場合  $0 < \alpha < 1$  である。従って、領域 1 と 2 において光の critical state が実現していることがわかった。図 6 に最大サイズの場合の領域 1, 2 の固有状態の電場分布を示す。全体に拡がっていかない、局在していかない、fractal な分布がみられている。

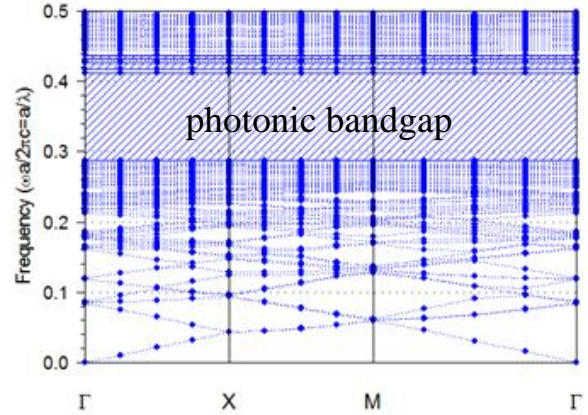


図 3 フォトニックバンド構造の計算例

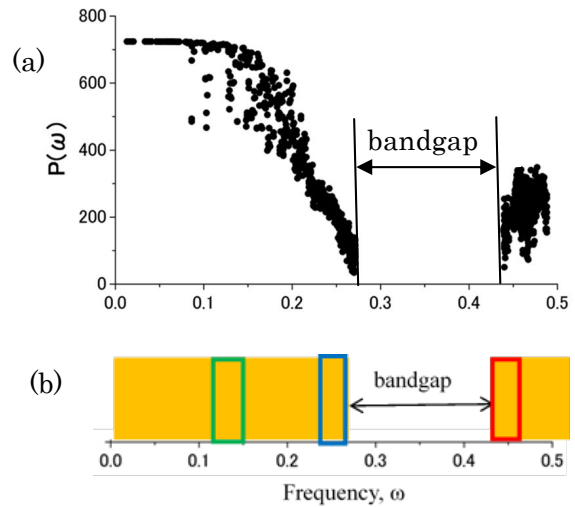


図 4 (a) 各固有状態に対して計算した Participation の固有角振動数依存性 (b) Participation のサイズ依存性を計算した周波数領域。

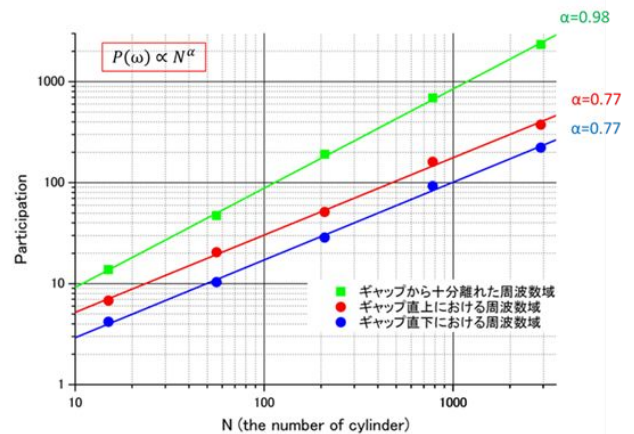


図 5 Participation のサイズ依存性

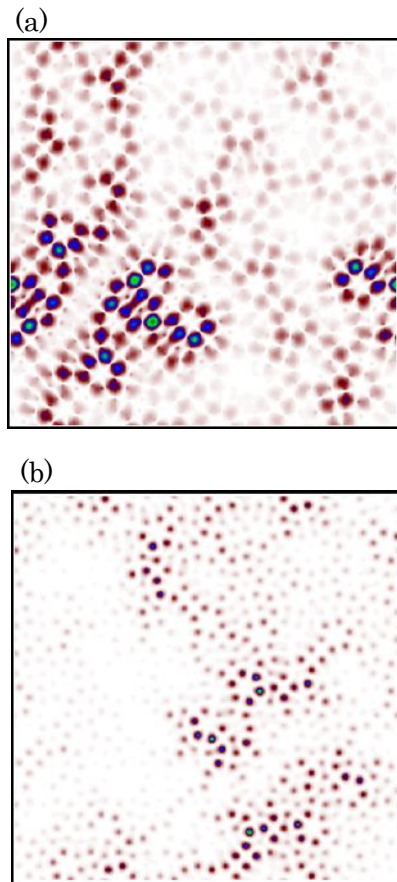


図 6 領域 1 (a)と領域 2 (b)の固有状態における電場分布。

(2)フォトニック準結晶における PBG 形成

図 7 (a)(b)に 12 回対称フォトニック準結晶と六方晶、正方晶フォトニック結晶の PBG 幅の屈折率比依存性の計算結果を示す。全屈折率の領域で正方晶フォトニック結晶が最も PBG 幅が小さい。あらゆる 2 次元フォトニック結晶の中で最大の PBG を形成する六方晶と準結晶を比べるとおおむね前者がわずかに大きな PBG 幅を示している。しかしながら  $n < 1.43$  ではわずかに準結晶の方が大きくなっている。従って屈折率比が小さい領域での PBG 幅に関するフォトニック準結晶の優位性が示された。

現在、(1)と(2)についてそれぞれ投稿論文を作成中である。

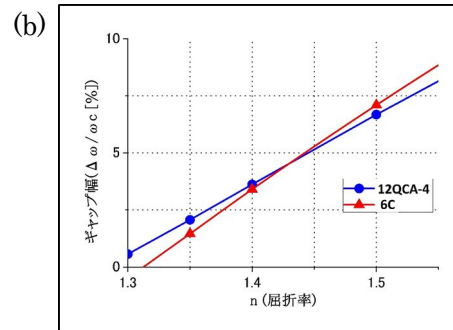
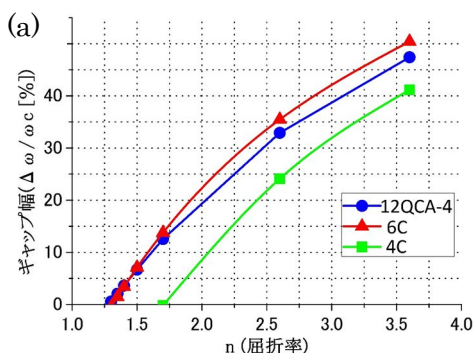


図 7 (a) 12 回対称フォトニック準結晶と六方晶、正方晶フォトニック結晶の PBG 幅の屈折率比依存性の計算結果。(b) (a)の低屈折率領域の拡大図。

参考文献

[1] D. Shechtman, et al.: Phys. Rev. Lett., **53**, 1951 (1984).  
 [2] K. Edagawa, et al.: Phys. Rev. Lett., **100**, 013901 (2008).  
 [3] S. Imagawa et al.: Phys. Rev. B, **82**, 115116 (2010).  
 [4] Y. Komiyama et al., Appl. Phys. Lett. **108**, 191110 (2016).  
 [4] M.C. Rechtsman et al.: Phys. Rev. Lett. **101**, 073902 (2008).

5 . 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

〔雑誌論文〕(計 4 件)

S. Imagawa and K. Edagawa, Robustness and fragility of photonic bandgap in photonic amorphous diamond structures, Appl. Phys. A - Mater. Sci. and Processing, vol. 123, 2017, 41, 査読有.

DOI: 10.1007/s00339-016-0703-6.

Y. Komiyama, H. Abe, Y. Kamimura, K. Edagawa, Fabrication of photonic amorphous diamonds for terahertz-wave applications, Appl. Phys. Lett., vol. 108, 2016, 191110, 査読有. DOI: 10.1063/1.4949530.

K. Nagao, T. Inuzuka, K. Nishimoto, K. Edagawa, Experimental Observation of Quasicrystal Growth, Phys. Rev. Lett., vol 115, 2015, 75501, 査読有. DOI: 10.1103/PhysRevLett.115.075501.

Y. G. So, K. Kimoto, K. Edagawa, Formation of an Icosahedral Quasicrystal and Its Approximant in Au-Al-Sc System, Mater. Trans., Vol. 56, 2015, 495-499, 査読有.

DOI: 10.2320/matertrans.M2014421.

〔学会発表〕(計 14 件)

伊田佳祐, 藤川裕恭, 上村祥史, 徳本有紀, 枝川圭一, 正 10 角形準結晶の成長過程の MD シミュレーション, 日本物理学会第 73 回年次大会, 2018.

枝川圭一, 準結晶の成長と比熱における高次元性, 日本物理学会第 73 回年次大会, 2018(シンポジウム講演).

鈴木崇紀, 藤川裕恭, 上村祥史, 徳本有紀, 枝川圭一, 正 20 面体および正 10 角形準結晶の成長過程の MD シミュレーション, 日本物理学会 2017 年秋季大会, 2017.

鈴木崇紀, 藤川裕恭, 上村祥史, 徳本有紀, 枝川圭一, 正 20 面体金属準結晶の成長過程の分子動力学シミュレーション, 日本物理学会第 72 回年次大会, 2017.

Y. Kawamata, H. Fujikawa, K. Edagawa, Critical photonic States in 2D photonic quasicrystals, ICQ13 - International conference on Quasicrystals, 2016.

藤川裕恭, 鈴木崇紀, 上村祥史, 徳本有紀, 枝川圭一, 準結晶の成長過程の分子動力学シミュレーション, 日本物理学会 2016 年秋季大会, 2016.

K. Edagawa, Robustness and fragility of photonic bandgap in photonic amorphous diamond structures, META'16, the 7th International Conference on Metamaterials, Photonic Crystals and Plasmonics, 2016 (招待講演).

川俣勇太, 藤川裕恭, 鈴木拓真, 枝川圭一, フォトニック準結晶における光臨界状態, 日本物理学会第 71 回年次大会, 2016.

肖英紀, 枝川圭一, 齋藤嘉一, 収差補正 STEM による Ag-In-Yb 系 Tsai 型近似結晶の局所構造直接観察, 日本物理学会第 71 回年次大会, 2016.

Y. Kawamata, K. Edagawa, Photonic band gap formation in 2D photonic quasicrystals, Aperiodic 2015, 2015.

Y. G. So, T. Hiroto, R. Tamura, K. Edagawa, Atomic-scale chemical mapping of Tsai-type approximants using STEM-EDS, Aperiodic 2015, 2015.

肖英紀, 片桐陽, 廣戸孝信, 齋藤嘉一, 田村隆治, 枝川圭一, Ga-Pd-RE(RE:希土類元素)系正 20 面体準結晶および近似結晶の作製, 日本物理学会 2015 年秋季大会, 2015.

川俣勇太, 枝川圭一, 二次元フォトニック準結晶における光禁制帯形成機構, 日本物理学会 2015 年秋季大会, 2015.

小見山雄一郎, 上村祥史, 枝川圭一, 光造形法によるテラヘルツ帯フォトニック・アモルファス・ダイヤモンドの作製, 2015 年度精密工学会秋期大会学術講演会, 2015.

〔その他〕

東京大学生産技術研究所 枝川研究室

<http://www.edalabo.iis.u-tokyo.ac.jp>

## 6. 研究組織

### (1) 研究代表者

枝川 圭一 (Keiichi Edagawa)  
東京大学・生産技術研究所・教授  
研究者番号: 20223654

### (2) 連携研究者

上村 祥史 (Yasushi Kamimura )  
東京大学・生産技術研究所・助教  
研究者番号: 40291314

### (3) 研究協力者

川俣 勇太 (Yuta Kawamata)  
藤川 裕恭 (Hiroyasu Fujikawa)  
鈴木 崇紀 (Takanori Suzuki)  
伊田 佳祐 (Keisuke Ida)  
東京大学大学院工学系研究科・大学院生  
小見山 雄一郎 (Yuichiro Komiyama)  
東京理科大学大学院基礎工学研究科・  
大学院生