

令和元年6月17日現在

機関番号：53301

研究種目：基盤研究(C)（一般）

研究期間：2015～2018

課題番号：15K04702

研究課題名（和文）ナノサイズ光学窓の形成による超解像効果発現の最適条件の理論的探索

研究課題名（英文）Theoretical search for the optimum condition of super-resolution effects with the formation of nanoscale optical windows

研究代表者

佐野 陽之（Sano, Haruyuki）

石川工業高等専門学校・一般教育科・教授

研究者番号：80250843

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,800,000円

研究成果の概要（和文）：機能層材料として有望なSb₂Te₃を対象にした第一原理計算を行った。融解による光吸収（光子エネルギー3.06eV）の減少が示されたが、この起源は2eV以下の光学遷移の減少によるものであることが分かった。融解によって光吸収が増大するInSbとの比較を行い、結晶状態におけるフェルミ準位付近の電子状態の違いが、両者の性質の違いの原因であることを見出した。光ディスク中の超解像現象を再現するために、過渡現象を考慮した新しい物理シミュレーションシステムの開発を行った。融解による光吸収変化が異なるSb₂Te₃とInSbに関して、超解像メカニズムの違いを明らかにした。

研究成果の学術的意義や社会的意義

アーカイブ用記録メディアとして必要不可欠な光ディスクは、さらなる大容量化のための研究開発が進められている。高密度記録のための本命技術として超解像技術（機能層材料がレーザー光で解けることによる光学的性質の変化を利用）があるが、超解像現象の発現メカニズムや機能層材料の性質は良く分かっていなかった。本研究では、有望な機能層材料であるInSbとSb₂Te₃を対象に、融解による光学的性質の変化のメカニズムを明らかにした。また、光ディスク中での光の伝わり方や熱の伝わり方をシミュレーションすることによって、超解像現象を「見える化」することに成功し、超解像メカニズムを明らかにした。

研究成果の概要（英文）：Ab initio calculations of Sb₂Te₃, which is used as the best candidate material for the active layer in a super-resolution optical disc, showed that the optical absorption at the photon energy of 3.06 eV decreases due to the melting. This decrease of the optical absorption was suggested to result in the decrease of the optical transitions below 2 eV. By comparison with InSb where optical absorption increase with melting, the differences between the two materials were found to result from the difference of electronic states around the Fermi level in the crystalline state. In order to reproduce the super-resolution phenomenon in an optical disc, we developed the multi-physics simulation system that takes into account the transient phenomenon. The difference in the super-resolution mechanisms between Sb₂Te₃ and InSb was clarified.

研究分野：光物性、物理シミュレーション

キーワード：光メモリ 超解像 シミュレーション 第一原理計算 誘電率 相変化 アンチモナイド

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19、CK - 19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

(1) 光ディスク技術の現状と超解像技術について

長寿命、高信頼性である光ディスクは、アーカイブ用記録メディアとして必要不可欠であり、さらなる大容量化のための研究開発が進められている。大容量化のための技術として「記録層の多層化」があるが、本質的には1層当たりの記録量を増やす高密度化技術の開発が重要であり、その本命として超解像技術がある。波長の光を開口数 NA のレンズで集光した場合、通常は光の回折限界の制約により $\lambda/(4NA)$ (解像限界) より小さい記録ピットの情報を選択的に読み取ることはできない。しかし、例えばレーザー光照射時に光吸収係数が減少するような機能層を追加すれば、中央部に数 10nm サイズの「窓」(微小光学開口)が開き、解像限界以下の記録ピットの情報を選択的に読み取ることが可能となる。

(2) 超解像技術の問題点

機能層材料として、これまでに様々な材料が研究されてきた。大まかには光照射によって融解状態になった材料の光吸収の減少が超解像のメカニズムと考えられていたが、InSb のように光吸収が増大する材料でも良好な超解像を示すことが実験的に示されたこともあり、メカニズムの詳細は不明であった。そのため、材料選定や層構造(層厚)は実験による試行錯誤で決められてきた。このような中、申請者は有限要素法を用いた「光伝播・熱伝導の連成物理シミュレーション・システム」を開発し、InSb 及び、 Sb_2Te_3 を機能層とする光ディスク中の超解像現象の再現に初めて成功した。また、代表的な機能層材料である InSb の電子状態と光学誘電率の第一原理計算を行い、融解によって半導体的な電子状態が金属的になることによって光吸収が増大することを明らかにした。これらの研究によって、超解像メカニズムの解明に関する重要な成果を得ることができたが、次のような問題点が残った。

シミュレーションによって光照射で形成された微小光学「窓」の形成(超解像現象発現)は確認できたが、この窓から予測される再生シグナル波形が記録ピットを有する ROM 基板からの再生実験の結果と定量的に合わないことがある。これは、現時点の定常状態のシミュレーションでは考慮されていない、過渡現象としての相変化の効果のためと考えられる。

シミュレーションでは単一機能層の最も単純なモデル構造を用いてきたが、より顕著な超解像を示すようなディスク構造の検討・探索が不十分である。

材料物質の融解による光吸収変化に関する一般的なメカニズムが不明であり、最適な材料探索の指針がない

2. 研究の目的

本研究では、超解像の微小「窓」形成メカニズムを理論解析によって明らかにし、超解像に最適な材料・ディスク構造の理論的探索を行うことを目的とする。そのため、以下の研究項目を実施する。

(1) 様々な物質の結晶及び融解状態における光学誘電率を第一原理計算で求め、相変化に伴う光吸収の変化のメカニズムを明らかにし、最適材料の探索のための指針を提案する。

(2) 従来のシミュレーションでは、光ディスク内の光(電磁波)伝播と熱伝導を両者の相互作用を考慮しながら定常解を求める手法で計算した。これを大きく改良し、時間的な変化(過渡現象)を考慮できるようにする。これにより、光照射による機能層の融解と凝固の過程をよりリアルにシミュレーションし、超解像実験との精密な比較から超解像現象のメカニズムの完全解明を目指す。

(3) 複数の機能層をもつディスク構造のシミュレーションを行い、顕著な超解像効果が発現する新しいディスク構造について検討する。

3. 研究の方法

(1) 結晶及び融解状態における光学誘電率を第一原理計算

固体物理分野の第一原理計算で実績のある VASP (Vienna Ab-initio Simulation Package) コードを導入し、計算ライブラリとのリンクや様々なコンパイラオプション設定の最適化を行い、安定かつ高速な計算実行コードを作成する。この VASP による分子動力学(MD)計算によって融解(液体)状態の構造モデルを作成する。さらに、融解構造モデル及び比較のための結晶モデルについて、VASP による電子状態計算と光学誘電率計算を行う。融解状態の構造モデルは2つ以上作成し、計算結果の比較から構造の特殊性が無いこと確認する。電子状態計算の近似法として、小さな計算量で比較的正しいバンドギャップエネルギーが得られる LDA-MBJ 近似を用いる。光学誘電率の計算結果の妥当性は、文献および実測した誘電率スペクトルとの比較によって検証する。最終的に、結晶及び融解状態の計算結果(エネルギーバンド図、電子状態密度、光学誘電率スペクトルなど)を分析し、融解による誘電率変化のメカニズムを調べる。

(2) 過渡現象を考慮した光伝播-熱伝導シミュレーション

シミュレーション・システムの開発

有限要素法ソフトウェア COMSOL の Transient 機能を用い、微小時間隔 Δt (4ns 程度)毎に微小ピット構造を移動しながら光伝搬と熱伝導の同時計算を行う。ピット構造等の移動は、モデル(メッシュ)構造を変形させずに誘電率の空間分布を与える数式を時間的に変化させる方法で実現し、計算不能や計算揺らぎの増大を回避する。また、機能層の相変化に伴う融解熱の出入りも考慮し、融解領域の形成に関わるほぼ全てのパラメータを網羅した精密なシミュレーション

オン・システムを構築する。

様々なシミュレーション

実験で用いられる超解像光ディスクと同じ層構造を持つモデルを作成し、機能層として InSb 及び Sb_2Te_3 を用いた場合の超解像状態を再現する計算を行う。機能層の融解領域の形状・サイズ、機能層付近の電場強度分布、応答関数と空間周波数スペクトルなどを分析し、超解像メカニズムを明らかにする。また、InSb と Sb_2Te_3 の 2 層を機能層とする光ディスクのシミュレーションも行い、その超解像効果について調べる。

4. 研究成果

(1) 結晶及び融解状態における光学誘電率の第一原理計算

Sb_2Te_3 の計算

機能層材料として有望な Sb_2Te_3 を対象に、融解による光学応答の変化を調べるために第一原理計算を行った。図 1 に示すように、結晶 Sb_2Te_3 はバンドギャップ 0.15eV の半導体的電子状態を示すが、融解によってフェルミ準位付近の電子状態密度 (DOS) が増大しバンドギャップが消失することが計算によって示された。DOS の観点からは金属的な電子状態への変化が起きているように見えるが、液体 Sb_2Te_3 の抵抗率の温度係数は負の値を示すことが知られており、液体 InSb のような単純な金属的電子状態とは異なった電子状態が形成されていると考えられる。光学誘電率 (図 2) の虚部を見ると、結晶状態で見られた 1.5eV 付近のピーク構造が融解によって消失し、低エネルギー側で虚部の値が大きくなる典型的な金属的特徴を示した。しかし、融解 (液体) 状態の光学誘電率の実部は、低エネルギー側で正の値をとり、非金属的な特徴を示した。

InSb と Sb_2Te_3 の融解による誘電率変化のメカニズム

Blu-ray Disc で用いられている光子エネルギー 3.06 eV においては、 Sb_2Te_3 は融解によって光吸収が減少し、InSb は逆に増大する。第一原理計算の結果を元に、この違いのメカニズムを考察した。図 3 に示すように、3.06eV における光学遷移 (誘電率虚部) は融解によってほとんど変化せず、このエネルギーにおける光学遷移は光吸収の変化に寄与しない。2eV 以下の誘電率虚部を見ると、 Sb_2Te_3 では融解によって光学遷移が著しく減少し、InSb では逆に増大する。Drude-Lorentz モデル (理論) によって、この変化が、3.06eV の光学吸収 (屈折率虚部) の変化を引き起こすことになることが分かった。融解状態の誘電率虚部に関して、 Sb_2Te_3 と InSb はほぼ同じであり、結晶の電子状態の違い (Sb_2Te_3 は 1.5eV の光学遷移を持ち、InSb は 4eV の光学遷移を持つ) が、融解による両者の光学吸収 (3.06eV) の違いの原因であると考えられる。

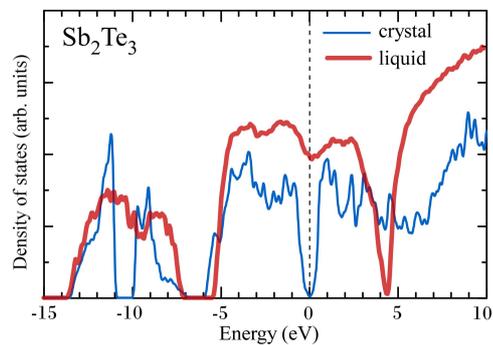


図 1 : Sb_2Te_3 の電子状態密度

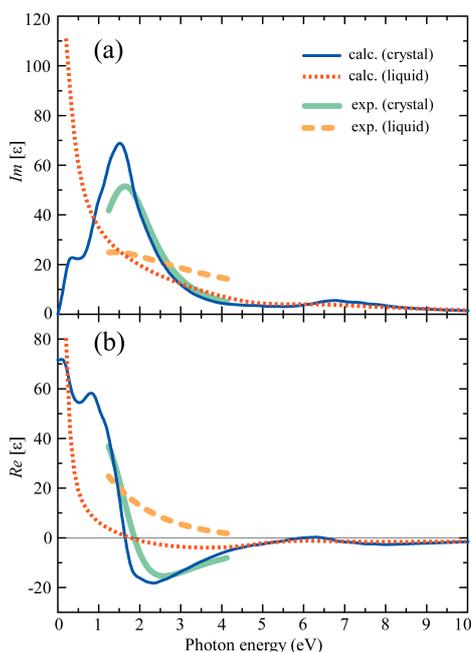


図 2 : Sb_2Te_3 の光学誘電率

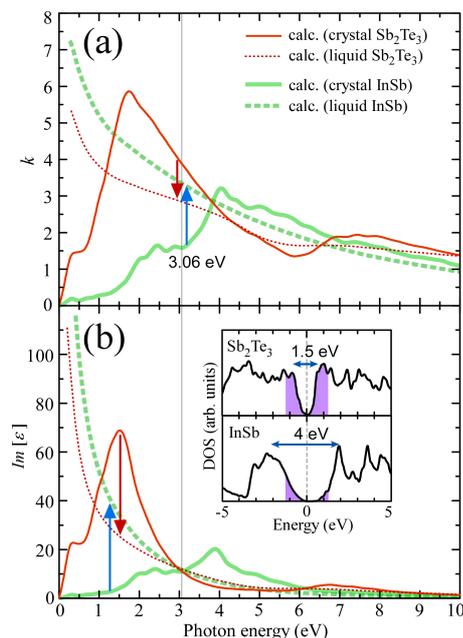


図 3 : Sb_2Te_3 と InSb の屈折率虚部と誘電率虚部

(2) 過渡現象を考慮した光ディスク内の超解像シミュレーション

InSb を機能層とするシミュレーション

過渡現象を考慮した場合の効果を知るために、InSb を機能層とするシミュレーションを行った。入射光が機能層を透過した後の電場強度分布は、定常解計算と過渡計算で違いはなかった。しかし、微小ピットをディスク回転方向に移動させながら反射シグナルをシミュレーションして得られた応答関数には、「ダブルピーク構造の二つのピーク強度比が異なる」という違いが現れた。定常解計算と過渡計算の2つの応答関数を用いて、予測シグナルを計算した結果を図4に示す。4つの連続した微小ピット列に対応した測定シグナルの波形は、計算によって概ね再現されたが、過渡計算の方が測定波形と良く合っている。この結果から、過渡現象を考慮することによって、超解像現象をより良く再現できることが確認できた。

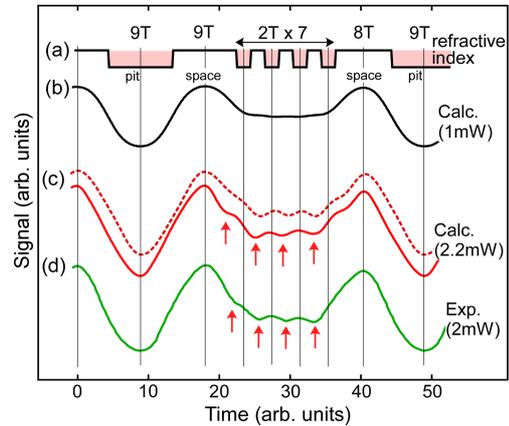


図4：予測シグナル。(c)超解像状態シグナル。破線は定常解計算、実線は過渡計算。

Sb₂Te₃ を機能層とするシミュレーション

融解によって光吸収(波長405nm)が増大するInSbに対し、逆に光吸収が減少するSb₂Te₃を機能層とした超解像シミュレーションを行い、両者の超解像メカニズムの違いについて調べた。機能層がInSbの場合は、融解領域(微小なマスク)がディスク回転方向にずれることによって細い隙間が作られ、これが実質的な微小光学窓として働くため超解像がおこる。一方、機能層がSb₂Te₃の場合は、融解領域のサイズが同じ入射光強度のInSbに比べて1.5~2倍大きい。この大きな融解領域(光学窓として機能)がディスク回転方向にずれることによって、入射光ビームの一部を削るため、超解像が起こることが分かった。微小ピットからの再生シグナルシミュレーションから求めた応答関数を図5、図6に示す。InSbの場合は非対称なダブルピーク構造を示すが、Sb₂Te₃の場合は少し非対称なシングルピーク構造となった。これらの応答関数の形状は、超解像メカニズムの違いを反映している。また、両者とも、常解像状態(P=1.0mWの場合)の応答関数より細く、高い空間周波数をもつことが確認できた。

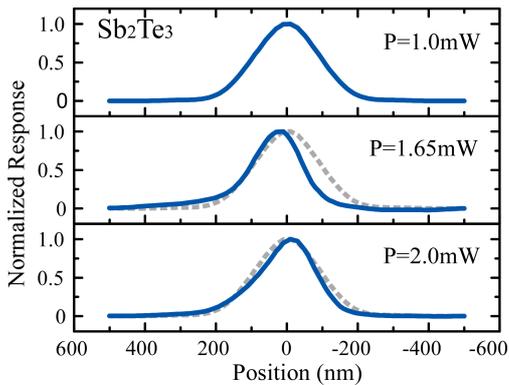


図5：機能層がSb₂Te₃の場合の応答関数

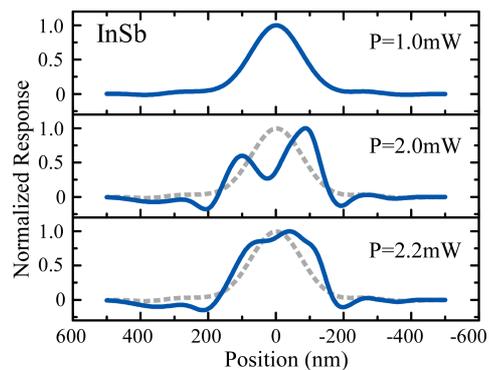


図6：機能層がInSbの場合の応答関数

InSb と Sb₂Te₃ の2層を機能層とするシミュレーション

より顕著な超解像現象を発現する新しいディスク構造を探索するため、融解によって光吸収が増大するInSbと減少するSb₂Te₃を組み合わせた2層構造の機能層を有するシミュレーションを行った。結晶状態のSb₂Te₃はInSbより光吸収が大きいため、Sb₂Te₃で発生した熱によって、融点の低いInSbが解ける効果が働く。そのため、入射光強度が比較的小さくても超解像現象が起こることが分かった。また、InSb層をSb₂Te₃層の上に配置した方が、より良い超解像を示すことが分かった。典型的な応答関数を図7に示す。InSb単独のようなダブルピーク構造を示さず、その空間周波数スペクトルはInSbやSb₂Te₃単独の場合に比べて特に高い周波数成分を持たないことが分かった。

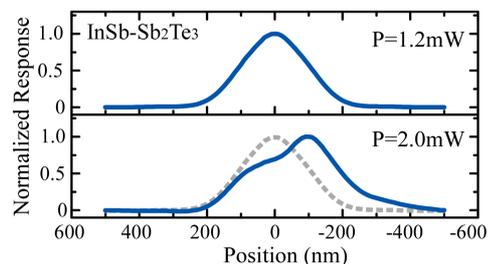


図7：複数機能層(InSb-Sb₂Te₃)の応答関数

5. 主な発表論文等

[雑誌論文](計3件)

H. Sano, M. Kuwahara, G. Mizutani, "First principles study of the electronic and optical properties of crystalline and liquid Sb₂Te₃: Phase-transition-induced changes in optical properties", Japanese Journal of Applied Physics, 査読有, 57巻, 2018, 09SD01/1-6,
DOI: 10.7567/JJAP.57.09SD01

H. Sano, T. Shima, M. Kuwahara, Y. Fujita, M. Uchiyama, and Y. Aono, "Response function of super-resolution readout of an optical disc studied by coupled electromagnetic-thermal simulation", Japanese Journal of Applied Physics, 査読有, 55巻, 2016, 09SB02/1-6,
DOI: 10.7567/JJAP.55.09SB02

H. Sano and G. Mizutani, "Ab initio calculations of the optical properties of crystalline and liquid InSb", AIP Advances, 査読有, 5巻, 2015, 117110/1-9,
DOI: 10.1063/1.4935438

[学会発表](計6件)

佐野陽之、桑原正史、"アンチモナイドを機能層とする光ディスクの超解像再生メカニズムの解析"、応用物理学会 2018年9月21日、名古屋国際会議場(愛知県名古屋市)

H. Sano, M. Kuwahara, G. Mizutani, "Ab initio calculation of optical properties change of antimonide due to the melting", 第29回相変化研究会シンポジウム(PCOS2017), 2017年11月17日、熱海ニューフジヤホテル(静岡県熱海市)(招待講演)

H. Sano, M. Kuwahara, G. Mizutani, "First principles study of optical properties change of Sb₂Te₃ due to the melting", International Symposium on Imaging, Sensing, and Optical Memory 2017 (ISOM'17), 2017年10月24日、くにびきメッセ(島根県松江市)

佐野陽之、桑原正史、水谷五郎、"融解によるSb₂Te₃の光学特性変化の第一原理計算"、応用物理学会、2017年9月7日、福岡国際センター(福岡県福岡市)

H. Sano, T. Shima, M. Kuwahara, Y. Fujita, M. Uchiyama, and Y. Aono, "Study on response function of super-resolution readout of an optical disc by multi-physics simulation", International Symposium on Optical Memory 2015 (ISOM'15), 2015年10月6日、富山国際会議場(富山県富山市)

佐野陽之、水谷五郎、"融解によるInSbの光学応答変化の第一原理計算"、応用物理学会、2015年9月13日、名古屋国際会議場(愛知県名古屋市)

[その他]

ホームページ等

国立高専研究情報ポータル <https://research.kosen-k.go.jp/researcher-list/read0142223>

6. 研究組織

(1)研究分担者

研究分担者氏名: 桑原 正史

ローマ字氏名:(KUWAHARA, Masashi)

所属研究機関名: 国立研究開発法人産業技術総合研究所

部局名: エレクトロニクス・製造領域

職名: 上級主任研究員

研究者番号(8桁): 60356954

(2)研究協力者

研究協力者氏名: 水谷 五郎

ローマ字氏名:(MIZUTANI, Goro)

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属されます。