

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 27 年 6 月 29 日現在

機関番号：53301

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2011～2014

課題番号：23560045

研究課題名(和文) 光照射によるナノ領域の光物性制御の理論解析と高密度光メモリへの応用

研究課題名(英文) Theoretical study on control of optical properties in the nano-scale domain due to the light irradiation, and application to high-density optical memory

研究代表者

佐野 陽之 (SANO, Haruyuki)

石川工業高等専門学校・その他部局等・教授

研究者番号：80250843

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 4,200,000円

研究成果の概要(和文)：光ディスク内の光と熱の伝わりを同時にシミュレーションするシステムを開発した。そしてシミュレーションによって、超解像効果(光を細く絞ったときの限界値より小さい記録マークを読める現象)の仕組みを明らかにし、この超解像効果に最適な条件(入射光強度、ディスク回転速度、機能層膜厚など)を見つけた。また、超解像効果の元となる材料(InSbなど)が光照射で溶ける時の変化を計算によって調べ、材料の性質が半導体的から金属的に変化することが分かった。

研究成果の概要(英文)：Multi-physics simulation system for light propagation and thermal conduction in an optical disc was developed. Our calculated results clarified the mechanism of super-resolution effect making it possible to read out recording marks smaller than the diffraction limit, and suggested the optimum conditions for the incident light intensity, linear velocity of the disc rotation, and thickness of an active layer. Key materials for the super-resolution effect such as InSb was studied for both crystalline and liquid states by ab-initio calculation. It is found that electronic and optical properties change from semiconductor to metallic behavior due to the melting.

研究分野：光物性

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

1. 研究開始当初の背景

(1) 光ディスク技術の現状

長寿命、高信頼性、低コスト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る。

(2) 超解像技術について

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) より小さい記録マークの情報を選択的に読み取ることはできない。しかし、レーザー照射時に光吸収係数が減少するような機能層(厚さ 10 ~ 50nm)を追加すれば、中央部に微小な「窓」(微小光学開口)が開き、解像限界以下の記録マークの情報を選択的に読み取ることが可能となる。この超解像技術は、有望な高密度化技術として産総研のグループ等によって実験的に実証されている。

(3) 超解像技術の未解決な問題点

機能層材料として、これまでにカルコゲナイド、InSb、酸化物 (PtOx, ZnO, GeOx) などが研究され、照射によって高温(融解)状態になった材料の光吸収率の減少が超解像のメカニズムと考えられている。しかし、その詳細は不明であり、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いるのが現状である。以下に具体的な問題点を挙げる。

照射で形成された「窓」の状態(大きさ、形状、生成消滅の時間スケールなど)が不明。

高温・融解状態の材料の光学特性(光吸収)のデータがほとんど無いため、信頼のできる「光伝搬-熱伝導の連成物理シミュレーション」が出来ず、「窓」形成のメカニズムが不明である。

そもそも融解して光吸収が減少する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「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) 高温・融解状態の光学誘電率の第一原理計算

様々な物質の高温・融解状態における光学誘電率を第一原理計算で求め、なぜ高温・熔融状態で光吸収が減少するのかを明らかにし、最適材料の探索のための指針を提案する。

(2) 光伝搬-熱伝導の連成物理シミュレーションシステムの開発

光ディスク内部の記録マークや機能層を含む多層構造を扱い、波動性を考慮した光伝搬、多層構造中の熱伝導、放射による熱の逃げ、

ディスクの回転など光ディスクのリアルな挙動(性質)を再現できる連成物理シミュレーションシステムを開発・構築する。

(3) シミュレーションによる「窓」形成メカニズムの解明

上記(1)の計算データと(2)のシミュレーションシステムを用いて、レーザー照射部分の温度・光強度分布を計算し、「窓」形成をシミュレーションで再現できるようにする。そして、様々な条件のシミュレーションから「窓」の性質(形状、生成消滅時間など)を明らかにし、超解像に最適な材料・構造を提案する。

3. 研究の方法

(1) 高温・融解状態の光学誘電率の第一原理計算

計算環境整備と予備計算

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。また、融解状態の構造モデルを作成するために、ab-initio MD (Molecular Dynamics) 計算を行うが、様々な実験・計算データが揃っている Si を対象にした予備計算を行い、計算コードの特性や MD 計算のパラメーター設定についての習熟を図る。

InSb および Sb₂Te₃ の光学誘電率計算

超解像を示す機能層材料である InSb (融解で光学吸収増大) と Sb₂Te₃ (融解で光学吸収減少) を計算対象とする。それぞれ、融点以上の温度での MD 計算を行い、融解(液体)状態の構造モデルを作成する。このモデル構造をもとに電子状態及び光学誘電率を計算する。また、比較のため結晶構造に関しても同様な計算を行う。最終的な電子状態計算には、MBJ-LDA 近似を用いる。

(2) 光伝搬-熱伝導の連成物理シミュレーション

計算環境整備とシミュレーションシステムの開発

本研究のため、大規模メモリ (512GB) を搭載した 16core の計算用ワークステーションを導入する。

レーザー光の伝搬を電磁波の波動方程式を用いて厳密に計算し、さらに光吸収を熱源として層構造中の熱伝導を計算できるシミュレーションシステムを有限要素法ソフトウェアで構築する。この中で、ディスク回転に伴う熱移動も熱伝導方程式の物質移動項の導入で考慮する。

超解像状態計算

機能層として InSb と Sb₂Te₃ を用いたモデルでシミュレーションを実施し、機能層の融解によって微小光学窓の形成を確認する。さらに、微小窓の大きさ・位置、微小窓透過後の電場強度分布を詳細に調べ、超解像発現のメカニズムを明らかにする。また、機能層膜厚、入射光強度、ディスク回転速度を変えたシミ

ュレーションを行い、超解像の最適条件を見つける。

4. 研究成果

(1) 高温・融解状態の光学誘電率の第一原理計算

結晶および融解（液体）InSb の計算

結晶 InSb の電子状態（状態密度とエネルギーバンド図）と光学誘電率の計算を行った。通常良く用いられている GGA 近似を用いた場合には InSb のバンドギャップが再現されず、ハイブリッド関数である HSE06 や meta-GGA の MBJ-LDA を用いるとバンドギャップがほぼ実験と合うことが分かった。また、これらの近似を用いて計算した光学誘電率（図 1 青線）は実験データ（図 1 ○印）とよく合うことが分かった。

MD 計算で作成した融解（液体）状態 InSb のモデルに対して、電子状態および光学誘電率の計算を行った。融解状態 InSb の光学誘電率の計算結果（図 1 赤線）は、連携研究者によって測定されたデータ（図 1 緑破線）と良く合うことが確認できた。また、融解状態 InSb の光学誘電率は結晶 InSb と大きく異なることが分かった。InSb の電子状態は熔融により半導体から金属へ変化し、これが光学誘電率の変化を引き起こすことが計算からも確認された。

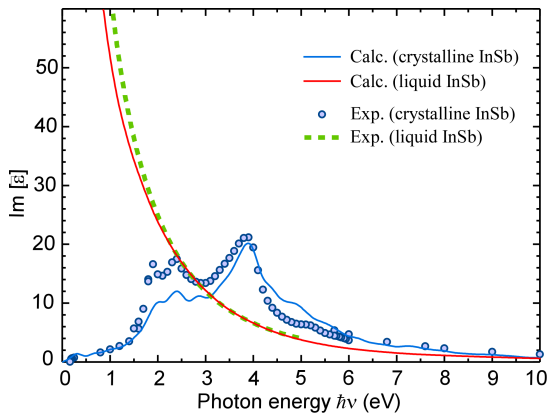


図 1 : InSb の誘電率虚部

結晶および融解（液体）Sb₂Te₃ の計算

結晶 Sb₂Te₃ の電子状態計算を行った。結晶構造が InSb より複雑であるためブリルアンゾーンも複雑となった。Sb₂Te₃ の特徴は、バンド間遷移による光学吸収が光子エネルギー $\hbar = 1-3\text{eV}$ 付近で大きく、InSb より約 1eV 低エネルギー側にシフトしていることが分かった。この違いが、融解による光吸収変化の振る舞いに違いを生じさせると考えられる。Sb₂Te₃ の融解状態に関しては、MD 計算がほぼ終了した。今後は融解状態の電子状態及び誘電率計算を行い、InSb との違いや特徴を明らかにしていく予定である。

(2) 光伝搬-熱伝導の連成物理シミュレーション

InSb を機能層とした計算

光ディスク内の電磁波伝播と熱伝導の連成シミュレーションを行った結果、InSb 層より 15nm 下の電場強度分布は図 2 のようになった。入射光強度 $P=2\text{mW}$ では光強度分布が回折限界より細くなることが確認され、本研究によって初めて超解像現象がシミュレーションによって再現された。

計算された電場分布および融解 InSb の大きさと位置を分析したところ、熔融により光吸収が増大する InSb を機能層とした場合には、光遮蔽領域の横移動による漏れ光の効果が超解像の発現機構であることが分かった。

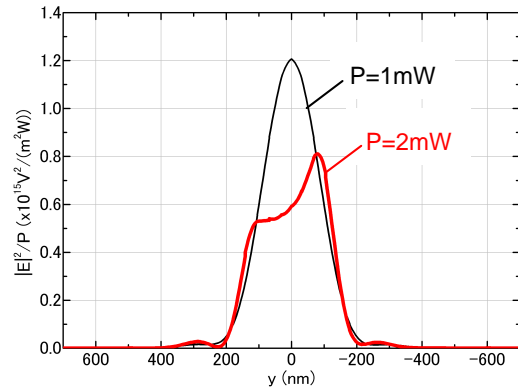


図 2 : InSb 層(20nm)の下の電場強度分布

入射光強度を変えた場合の結果を図 3 に示す。入射光ビームが細くなる条件（超解像条件）は 1.8~2.2mW であり、実験データとの比較によりこのシミュレーションは妥当であることを確認した。また、機能層膜厚を変えた計算を行った結果、超解像に最適な InSb 膜厚が 20nm 弱であるという結果を得た。これも対応する実験とほぼ合っている。

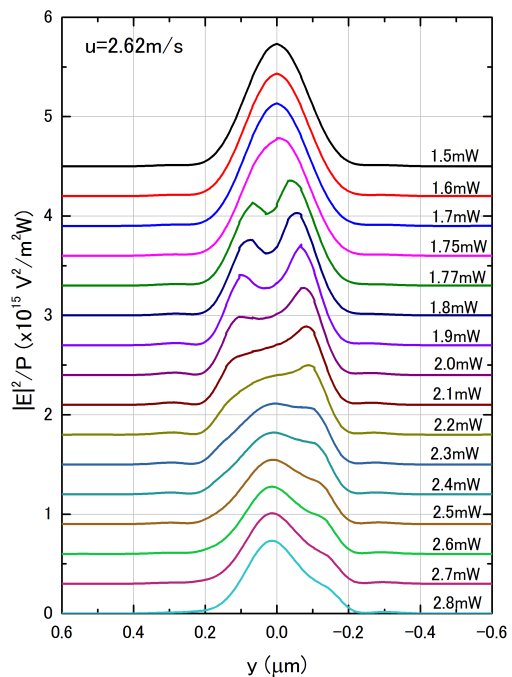


図 3 : 電場強度分布の入射光強度依存性

生成シグナルシミュレーション
 微小ピット構造を考慮した再生シグナルのシミュレーションを行い、超解像状態の応答関数を求めたところ、2重ピークを有する特異な形状を持つことが示された(図4(b))。この応答関数をフーリエ変換した空間周波数スペクトルは、超解像なしの場合より高い周波数成分を持ち、より微小な構造を識別する能力を持つことを確認した。

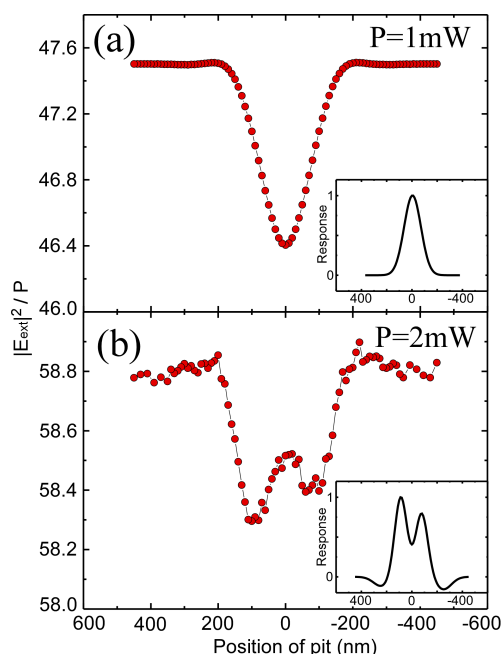


図4：再生シグナルと応答関数

また、入射光パワーやフォーカス条件を変えた超解像状態の応答関数を求めた結果、比較的低パワーの条件において、応答関数のダブルピークがより顕著に表れることが分かった。なお、超解像状態の応答関数は本研究によって初めて求められ、超解像現象の性質を理解するうえで重要な結果となっている。連携研究者がInSbを機能層とするROMディスクを作成し、再生シグナル波形の測定を行った(図5(d))。シミュレーションにより求めた応答関数から予測シグナルを計算し、測定波形データと比較した結果、比較的高い入射光パワーの条件の応答関数(ダブルピークがあまり顕著でない場合)で測定データが良く説明できることが分かった(図5)。

Sb₂Te₃を機能層とした計算
 融解により光吸収が減少するSb₂Te₃を機能層としたシミュレーションを行い、InSbの場合と同様の解析を行った結果、融解領域(光透過領域)のサイズが従来予想されていた値よりずっと大きいことが分かった。また、光透過領域の横移動による実効窓幅の減少が超解像の発現に寄与していることが分かった。つまり、超解像のための微小光学窓として機能するためには、光ディスクの回転による熱移動によって融解領域がシフトするこ

とが本質的に重要であることを明らかにした。

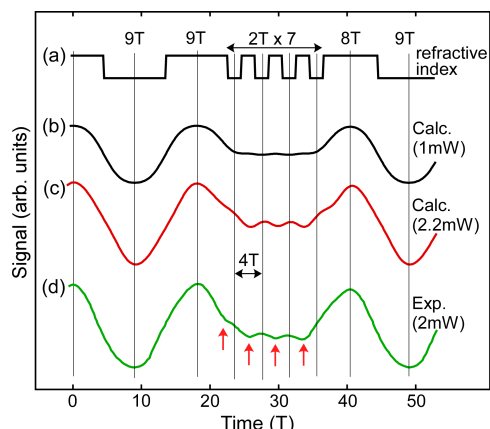


図5：再生シグナルの測定波形と予測波形

5. 主な発表論文等

[雑誌論文](計4件)

W. Kouyama, A. Ogawa, H. Li, Y. Miyauchi, G. Mizutani, and H. Sano, "Sum frequency generation confocal microscopy observation of a fish scale", e-Journal of Surface Science and Nanotechnology, 査読有, 12巻, 2014, 259-262, DOI: 10.1380/ejssnt.2014.259

Y. Miyauchi, H. Sano, R. Nakajima, G. Mizutani, and T. Hashizume, "Optical sum frequency generation spectra of water molecules on a polycarbonate film exposed to O₂ plasma", e-Journal of Surface Science and Nanotechnology, 査読有, 12巻, 2014, pp. 414-417, DOI: 10.1380/ejssnt.2014.414

H. Sano, T. Shima, M. Kuwahara, Y. Fujita, M. Uchiyama, and Y. Aono, "Study of the shape of an optical window in a super resolution state by electromagnetic thermal coupled simulation: Effects of melting of an active layer in an optical disc", Journal of Applied Physics, 査読有, 115巻, 2014, 153104/1-6, DOI: 10.1063/1.4871858

佐野陽之、島隆之、桑原正史、藤田宜也、内山宗久、青野嘉幸、"光ディスクの超解像再生の物理シミュレーション"、映像情報メディア学会技術報告 ITE Technical Report、査読無、37巻、2013、pp. 23-25、http://www.ite.or.jp/data/lab/technical_report/

[学会発表](計9件)

H. Sano and G. Mizutani, "First principles calculation study of electronic and optical properties of liquid InSb", 第26回相変化研究会シンポジウム(PCOS2014), 2014年12月4~5日、浜名湖口イザルホテル(静岡県浜松市)

佐野陽之、島隆之、桑原正史、藤田宜也、内山宗久、青野嘉幸、"超解像再生の連成物理シミュレーション解析", 応用物理学学会, 2014年3月17日、青山学院大学相模原キャンパス(神奈川県相模原市)

W. Kouyama, A. Ogawa, Hongyan Li, H. Sano, Y. Miyauchi, and G. Mizutani, "Sum frequency generation confocal microscopic observation of fish collage", 9th International Symposium on Atomic Level Characterizations for New Materials and Devices '13(ALC13), 2013年12月5日, The Big Island, Hawaii (USA)

H. Sano, T. Shima, M. Kuwahara, Y. Fujita, M. Uchiyama, and Y. Aono, "Multiphysics simulation of super-resolution effect in an optical disk", 第25回相変化研究会シンポジウム(PCOS2013)", 2013年11月28~29日、ホテル瑞鳳(宮城県仙台市)

T. Shima, M. Kuwahara, H. Sano, Y. Fujita, M. Uchiyama, and Y. Aono, "An attempt of combining super-resolution and multi-layer stacking technologies for achieving higher recording capacity", 第25回相変化研究会シンポジウム(PCOS2013)", 2013年11月28~29日、ホテル瑞鳳(宮城県仙台市)

佐野陽之、島隆之、桑原正史、藤田宜也、内山宗久、青野嘉幸、"超解像再生の連成物理シミュレーション解析", 応用物理学学会, 2013年9月17日、同志社大学京田辺キャンパス(京都府京田辺市)

佐野陽之、島隆之、桑原正史、藤田宜也、内山宗久、青野嘉幸、"光ディスクの超解像再生の物理シミュレーション", マルチメディアストレージ研究会, 2013年6月21日、東北大学電気通信研究所(宮城県仙台市)

小川敦司、興山渉、李紅燕、佐野陽之、水谷五郎、宮内良広、"フィッシュコラーゲン試料を用いた共焦点光和周波顕微鏡の性能評価", 第22回光物性研究会, 2011年12月10日、熊本大学(熊本県熊本市)

小川敦司、興山渉、李紅燕、佐野陽之、水

谷五郎、宮内良広、"共焦点光和周波顕微鏡を用いた魚コラーゲンの観察", 日本物理学会北陸支部講演会, 2011年11月26日、福井大学(福井県福井市)

6. 研究組織

(1) 研究代表者

佐野 陽之 (SANO, Haruyuki)
石川工業高等専門学校・その他部局等・教授
研究者番号: 80250843

(2) 研究分担者

なし

(3) 連携研究者

桑原 正史 (KUWAHARA, Masashi)
独立行政法人産業技術総合研究所・光技術
研究部門・主任研究員
研究者番号: 60356954

島 隆之 (SHIMA, Takayuki)
独立行政法人産業技術総合研究所・光技術
研究部門・主任研究員
研究者番号: 10371048