

薄膜干渉のスペクトル計算

薄膜干渉のスペクトル計算方法についてまとめておく。厚さ d 、屈折率 n_1 の薄膜を考慮して、入射媒質と出射媒質の屈折率が、 n_0 、 n_s であるとする。計算にあたっては入射面が xz 面になるように、下図のような座標系をもちいる。空間を $z < 0$ 、 $0 < z < d$ 、 $d < z$ の三つに分けると、それぞれの領域の屈折率を n_0 、 n_1 、 n_s になる。入射波は z 軸から角度 θ_0 で薄膜に入射すると仮定すると、スネルの法則から薄膜内と基板での屈折角 θ_1 、 θ_s は

$$n_0 \sin \theta_0 = n_1 \sin \theta_1 = n_s \sin \theta_s \quad (1)$$

で計算できる。

1 波を全て足し合わせる方法

入射した光は $z = 0$ と $z = d$ の界面で多重反射を起こすが、これらの反射を全て位相を含めて足しあわせることで、反射波の電場を計算できる。屈折率が n_i と n_j の領域での界面での反射係数と透過係数（フレネル係数）を $r_{i,j}$ と $t_{i,j}$ で表すと、最初の界面で直接反射された波 E_d は、入射する電場の振幅を E_{inc} を用いて、

$$E_d = r_{0,1} E_{inc} \quad (2)$$

のようにかける。次に、薄膜内を一度往復した波 E_1 を考える。この波は、最初に $z = 0$ の界面を透過し、 $z = d$ で反射し、最後に $z = 0$ の界面を透過するので、

$$E_1 = t_{0,1} r_{1,s} t_{1,0} \exp(i\phi) E_{inc} \quad (3)$$

とかける。ここで位相 ϕ は、薄膜を往復したことによる位相の遅れで、次式で定義される。

$$\phi = 2 \times n_1 d \cos \theta_1 \frac{2\pi}{\lambda_0} \quad (4)$$

λ_0 は真空中の波長で、最初の2倍は往復する効果を表している。同様に薄膜内で n 回往復するように多重反射した光 E_n は、

$$E_n = t_{0,1} r_{1,s} (r_{1,0} r_{1,s} \exp(i\phi))^{n-1} t_{1,0} \exp(i\phi) E_{inc} \quad (5)$$

のようにかける。したがって、全ての反射光を足し合わせると、反射波 E_r は次の無限級数になる。

$$E_r = E_d + E_1 + E_2 + E_3 + \dots$$

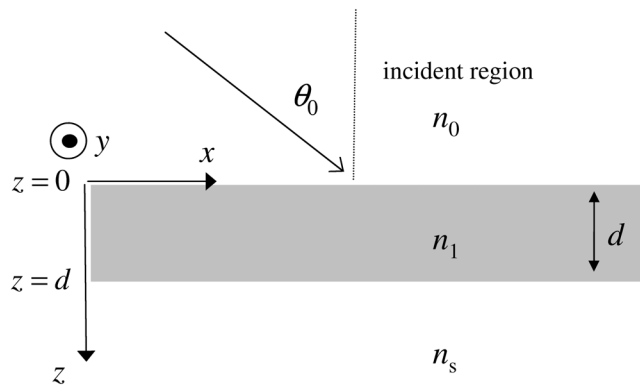


図 1: 薄膜干渉：座標系の定義

$$\begin{aligned}
&= E_d + \sum_{n=1} E_n \\
r \equiv \frac{E_r}{E_{inc}} &= r_{0,1} + \sum_{n=1} t_{0,1} r_{1,s} (r_{1,0} r_{1,s} \exp(i\phi))^{n-1} t_{1,0} \exp(i\phi) \\
&= r_{0,1} + \frac{t_{0,1} r_{1,s} t_{1,0} \exp(i\phi)}{1 - r_{1,0} r_{1,s} \exp(i\phi)} \\
&= \frac{r_{0,1} + r_{1,s} \exp(i\phi)}{1 + r_{0,1} r_{1,s} \exp(i\phi)}
\end{aligned}$$

最後の式変形には、 $r_{0,1} = -r_{1,0}$ とフレネルの係数の関係式 $t_{i,j} t_{j,i} + r_{i,j}^2 = 1$ を用いた。

透過光についても、反射光と同様に全ての波を足し合わせることで計算できる。そのまま抜けてきた光は、入射振幅にフレネルの係数 $t_{1,0} t_{1,s}$ と伝播による位相の変化 $\exp(i\phi/2)$ をかければ良い。これに多重反射の項が加わるので、

$$\begin{aligned}
t \equiv \frac{E_t}{E_{inc}} &= t_{0,1} t_{1,s} \exp(i\phi/2) (1 + \sum_{n=1} (r_{1,0} r_{1,s} \exp[i\phi])^n) \\
&= \frac{t_{0,1} t_{1,s} \exp(i\phi/2)}{1 - r_{1,0} r_{1,s} \exp(i\phi)} \\
&= \frac{t_{0,1} t_{1,s} \exp(i\phi/2)}{1 + r_{0,1} r_{1,s} \exp(i\phi)}
\end{aligned}$$

となる。

2 境界条件を与える方法

マクスウェルの方程式を解くには、境界面の連続条件を利用する方法が頻繁に用いられる。この方法はやや面倒であるが、もっとも一般的な解法であり、電磁場の空間分布を描かせるときには便利なフォーミュレーションである。

一般に屈折率が n の空間中では、マクスウェル方程式の方程式は平面波解を持ち、その波数ベクトル $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)$ は角振動数 ω と分散関係

$$k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 = n^2 \frac{\omega^2}{c^2} = n^2 k_0^2 \quad (6)$$

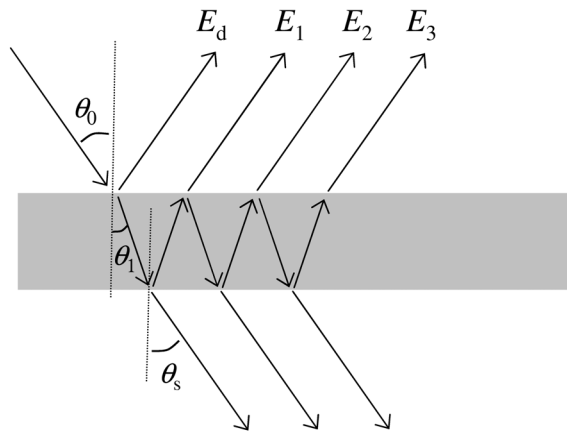


図 2: 薄膜内での多重反射

で関係付けられる。 c は光速で k_0 は真空中の波長 λ_0 を用いて、 $k_0 = 2\pi/\lambda_0$ で与えられる。 xz 平面に進む波を考えた場合には y 成分は $k_y = 0$ で、 x 成分は入射角度がきまると $k_x = k_0 \sin \theta_0$ よって与えられる。スネルの法則により x 成分は各領域で共通の値を持つ。最後に残った z 成分に関しては、屈折率が n_j の領域を考えると、分散関係の式(6)から、

$$k_{j,z} = \sqrt{n_j^2 k_0^2 - k_x^2} \quad (7)$$

のように計算できる。

薄膜干渉の場合を考えると、 $z < 0$ では入射波と反射波が存在するから、電場は二つの項の和で表すことが出来る。

$$E_{0,y} = \exp[i(k_x x + k_{0,z} z)] + r \exp[i(k_x x - k_{0,z} z)] \quad (8)$$

電場の添え字の0は入射領域を表し、 y はベクトルの y 成分を表している。(電場が入射面に垂直な成分のみを持つs偏光を仮定したので y 成分だけに注目している。)第一項は入射波で振幅を規格化してある。第二項は反射波で、振幅反射率 r がかかっていることと、 z 方向の波数の符号が反対になっていることが入射波とは異なっている。時間依存性に関しては $\exp(-i\omega t)$ を仮定しおり、表記は省略している。

$0 < z < d$ の薄膜の内部では $+z$ 方向と $-z$ 方向に進む波が存在しうるので、

$$E_{1,y} = C_+ \exp[i(k_x x + k_{1,z} z)] + C_- \exp[i(k_x x - k_{1,z} (z - d))] \quad (9)$$

のようにかける。 z 方向の位相原点は波の進行方向に依存して、 $z = 0$ と $z = d$ を使い分けている。透過領域においては透過波の電場しか存在しないので、

$$E_{s,y} = t \exp[i(k_x x + k_{s,z} (z - d))] \quad (10)$$

となる。 t は振幅透過率である。。

マクスウェルの方程式から、境界条件に必要な磁場の x 成分は、

$$i\omega\mu_0 H_x(z) = -\frac{\partial E_y}{\partial z} \quad (11)$$

で計算できる。この式を各領域の電場に適用すると、

$$\omega\mu_0 H_{0,x}(z) = -k_{0,z} \exp[i(k_x x + k_{0,z} z)] + r k_{0,z} \exp(i(k_x x - k_{0,z} z)) \quad (12)$$

$$\omega\mu_0 H_{1,x}(z) = -k_{1,z} C_+ \exp[i(k_x x + k_{1,z} z)] + k_{1,z} C_- \exp[i(k_x x - k_{1,z} (z - d))] \quad (13)$$

$$\omega\mu_0 H_{s,x}(z) = -t k_{s,z} \exp[i(k_x x + k_{s,z} (z - d))] \quad (14)$$

となる。

$z = 0$ で電場と磁場の接線成分が連続である条件を用いると、

$$1 + r = C_+ + C_- \exp(+ik_{1,z} d) \quad (15)$$

$$-k_{0,z} + r k_{0,z} = -k_{1,z} C_+ + k_{1,z} C_- \exp(+ik_{1,z} d) \quad (16)$$

$$(17)$$

$z = d$ での連続条件からは、

$$C_+ \exp(+ik_{1,z} d) + C_- = t \quad (18)$$

$$-k_{1,z} C_+ \exp(+ik_{1,z} d) + k_{1,z} C_- = -t k_{s,z} \quad (19)$$

$$(20)$$

が得られる。この四本の連立方程式から未知数である r 、 t 、 C_+ 、 C_- を決定することが出来る。

実際に少し長い計算を行うと、

$$r = \frac{(k_{0,z} - k_{1,z})(k_{1,z} + k_{2,z}) + (k_{0,z} + k_{1,z})(k_{1,z} - k_{2,z}) \exp(2ik_{1,z}d)}{(k_{0,z} + k_{1,z})(k_{1,z} + k_{2,z}) + (k_{0,z} - k_{1,z})(k_{1,z} - k_{2,z}) \exp(2ik_{1,z}d)} \quad (21)$$

が得られる。分母分子を $(k_{0,z} + k_{1,z})(k_{1,z} + k_{2,z})$ で割り算すると、

$$r = \frac{\frac{k_{0,z} - k_{1,z}}{k_{0,z} + k_{1,z}} + \frac{k_{1,z} - k_{2,z}}{k_{1,z} + k_{2,z}} \exp(2ik_{1,z}d)}{1 + \frac{k_{0,z} - k_{1,z}}{k_{0,z} + k_{1,z}} \frac{k_{1,z} - k_{2,z}}{k_{1,z} + k_{2,z}} \exp(2ik_{1,z}d)} \quad (22)$$

が得られる。 $k_{i,z} = n_i k_0 \cos \theta_i$ であることを思い出すと、この形は前節で得られたフレネル係数を用いた表式と同じであることが分かる。

3 エネルギー反射率の計算

エネルギー反射率の計算方法についてまとめておく。電磁場が運ぶエネルギーの流れはポインティングベクトル ($\mathbf{S} = \mathbf{E} \times \mathbf{H}$) で計算ができる。平面波を考えて電場と磁場を

$$\mathbf{E}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{E}_0 \exp(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega t)$$

$$\mathbf{H}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{H}_0 \exp(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega t)$$

のように表す。あとで添え字が増えるとややこやしくなるのだが、振幅部分のベクトルには0をつけておくことにする。マクスウェルの方程式より、電場と磁場のベクトルには次の関係がある。

$$\begin{aligned} \nabla \times \mathbf{E} &= -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \\ i\mathbf{k} \times \mathbf{E} &= -(-i\omega)\mu_0 \mathbf{H} \\ \mathbf{H} &= \frac{1}{\omega\mu_0} \mathbf{k} \times \mathbf{E} \end{aligned}$$

s 偏光の場合を考えると、図1の座標系では、電場は y 成分のみがゼロで無い値を持つ。また、波数ベクトルの y 成分はゼロであることを利用すると

$$\begin{pmatrix} H_x \\ H_y \\ H_z \end{pmatrix} = \frac{1}{\omega\mu_0} \begin{pmatrix} k_x \\ 0 \\ k_z \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 0 \\ E_y \\ 0 \end{pmatrix} \quad (23)$$

$$= \frac{1}{\omega\mu_0} \begin{pmatrix} -k_z E_y \\ 0 \\ k_x E_y \end{pmatrix} \quad (24)$$

となる。ポインティングベクトルは電磁場の積の計算であるから、複素表示の実部をとってから掛け算をする。振幅部分 \mathbf{E}_0 と \mathbf{H}_0 を実数にとると、

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} 0 \\ E_{0y} \\ 0 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} H_{0x} \\ 0 \\ H_{0z} \end{pmatrix} \cos^2(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega t) \quad (25)$$

$$= \frac{1}{\omega\mu_0} \begin{pmatrix} k_x E_{0y}^2 \\ 0 \\ k_z E_{0y}^2 \end{pmatrix} \cos^2(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega t) \quad (26)$$

$$= \frac{E_{0y}^2}{\omega\mu_0} \mathbf{k} \cos^2(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega t) \quad (27)$$

となり、当然のことであるがポインティングベクトルは波数ベクトル \mathbf{k} の方向を向く。空間のある点で \mathbf{S} の時間平均を考えると最後の \cos^2 の項は $1/2$ になる。そのため時間平均までを含めて \mathbf{S} を計算するときには、 $\bar{\mathbf{S}} = 1/2 \mathbf{E} \times \mathbf{H}^*$ のようにして複素共役をとって計算する機会が多い。その場合には上の式は、

$$\bar{\mathbf{S}} = \frac{1}{2\omega\mu_0} \begin{pmatrix} k_x |E_{y0}|^2 \\ 0 \\ k_z |E_{y0}|^2 \end{pmatrix} \quad (28)$$

となる。

薄膜干渉に適用するため、入射波、反射波、透過波のポインティングベクトル ($\bar{\mathbf{S}}_{inc}$ 、 $\bar{\mathbf{S}}_r$ 、 $\bar{\mathbf{S}}_t$) を計算する。 z 平面に平行な単位面積の面を通過するエネルギーの大きさは、 \mathbf{S} の z 成分で与えられるから、

$$\begin{aligned} \bar{S}_{inc,z} &= \frac{1}{2\omega\mu_0} k_{0,z} |E_{inc,0y}|^2 = \frac{1}{2\omega\mu_0} k_0 n_0 \cos \theta_0 |E_{inc,0y}|^2 \\ \bar{S}_{r,z} &= \frac{1}{2\omega\mu_0} k_{0,z} |E_{r,0y}|^2 = -\frac{1}{2\omega\mu_0} k_0 n_0 \cos \theta_0 |r|^2 |E_{inc,0y}|^2 \\ \bar{S}_{t,z} &= \frac{1}{2\omega\mu_0} k_{s,z} |E_{t,0y}|^2 = \frac{1}{2\omega\mu_0} k_0 n_s \cos \theta_s |t|^2 |E_{inc,0y}|^2 \end{aligned}$$

である。反射波にマイナスが残るのは伝播方向が逆になっていることを示す。これよりエネルギー反射率 R と透過率 T は

$$R \equiv -\frac{\bar{S}_{r,z}}{\bar{S}_{inc,z}} = |r|^2 \quad (29)$$

$$T \equiv \frac{\bar{S}_{t,z}}{\bar{S}_{inc,z}} = \frac{n_s \cos \theta_s}{n_0 \cos \theta_0} |t|^2 \quad (30)$$

がえられる。

p 偏光の場合には電場ベクトルは x と z 方向にゼロでない成分を持ち、磁場は y 方向を向く。

$$\begin{pmatrix} H_x \\ H_y \\ H_z \end{pmatrix} = \frac{1}{\omega\mu_0} \begin{pmatrix} k_x \\ 0 \\ k_z \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} E_x \\ 0 \\ E_z \end{pmatrix} \quad (31)$$

$$= \frac{1}{\omega\mu_0} \begin{pmatrix} 0 \\ k_x E_z - k_z E_x \\ 0 \end{pmatrix} \quad (32)$$

入射光の波数ベクトル \mathbf{k} と電場ベクトル \mathbf{E}_{inc} の成分は

$$\begin{aligned} \mathbf{k} &= (n_0 k_0 \sin \theta_0, 0, n_0 k_0 \cos \theta_0) \\ \mathbf{E}_{inc} &= (-E_{inc} \cos \theta_0, 0, E_{inc} \sin \theta_0) \end{aligned}$$

のように書けるから、ポインティングベクトルの z 成分は、

$$\begin{aligned} S_z &= E_x H_y - E_z H_x \\ \bar{S}_{inc,z} &= \frac{1}{2\omega\mu_0} E_x (k_x E_z^* - k_z E_x^*) \\ &= \frac{1}{2\omega\mu_0} E_{inc} \cos \theta_0 n_0 k_0 E_{inc}^* (\sin^2 \theta_0 + \cos^2 \theta_0) \\ &= \frac{1}{2\omega\mu_0} n_0 k_0 \cos \theta_0 |E_{inc}|^2 \end{aligned}$$

となる。反射波、透過波に関しても同様な関係が成立するので、電場に関する振幅反射率とエネルギー反射率・透過率の関係は s 偏光と全く同じで、式 (29)-(30) を用いて計算できる。これは電場に注目した振

幅反射率を用いているからである。p 偏光では磁場が y 軸に沿っているため、電場ではなく磁場の振幅反射率を計算する必要がある（例えば厳密結合波結合理論）。このとき、エネルギー反射率を計算するには、磁場の振幅反射率を用いた表式を用いる必要がある。

(101209)