

トポロジカルフォトンクスにおける デザインインフォマティクス

東京工業大学 工学院電気電子系
雨宮智宏 岡田祥 坂本樹 西山伸彦

物質材料研究機構 ナノアーキテクトニクス材料研究センター
胡曉

1. はじめに

トポロジカル絶縁体やワイル半金属などにおける電子系のトポロジーをフォトンの系にトレースする試みは、「トポロジカルフォトンクス」と呼ばれ、近年急速に進展している。トポロジカルフォトンクスでは、ナノ周期構造における単位胞内と単位胞間の相互作用を同時に制御することで、トポロジーの異なるフォニック結晶を実現できる点が特徴となる。これを利用することで、光渦や円偏光などの光のトポロジーに起因した情報を体系的に扱うことができるようになる。特に、 C_{6v} 対称性を有する誘電体を蜂の巣格子状に配列した構造に代表される空間的対称性をベースとしたトポロジカルフォニック結晶は、従来の半導体ナノプロセス技術との整合性に優れていることから、応用へ向けて各周波数帯域において様々な研究が行われている[1-9]。

トポロジカルフォトンクスにおいてもっとも良く知られた現象の一つは、トポロジーの異なる二つのフォニック結晶の界面に生じるトポロジカルエッジ状態であり、これは特定の内部自由度をもった光の伝搬を許容する[10-14]。これにより、急峻な曲げに耐性のある低損失な光渦伝搬、偏光に依存した一方向性伝搬など、光回路上においてこれまでにない新しい光機能を実現可能となる[15,16]。

本稿では、トポロジカルフォトンクスの性質を簡単に説明した後、そのデザインインフォマティクスについての詳細を述べる。

2. トポロジカルフォトンクス

トポロジー (topology) とは数学の一分野である位相幾何学のことである。位相幾何学は言うなればゴムのように柔らかい図形を扱う学問体系である。これを以てすると、図 1(a)のように球とトーラスは連続変形で一方から一方へ移行可能なことから同一と見なすことができる。ここで、球とトーラスの性質を決めているのは“穴の数”であり、それが異なる図形は違うものであると見なされる。これを数学的に「トポロジーが異なる」と表現する。

トポロジカルフォトンクスは上記の概念を光分野にもってきたものであるが、それだけだと漠然とし過ぎるため、ここでは簡単な例を交えてその概念に触れる。図 1(b)には、二つのフォニック結晶が示されており、これらは互いに極めて近い光学特性を有する。互いの光学特性が近いのであるから、これら二つを隣接させたとしても、その光学特性には大きな変化は現れないはずである。しかし、両者のトポロジーが異なる場合はその限りではない。先ほど述べたように、位相幾何学において“球”から“トーラス”には連続変形で移ることができないのと同様に、トポロジーが異なるフォニック結晶同士も、何らかの特殊な物理状態を介さなければ、連続的に移ることができない。その特殊な物理状態が、隣接界面に生じる「トポロジカルエッジ状態」である。上記の理論的な詳細は筆者の別の解説記事を参照されたい[17]。

トポロジカルエッジ状態によって伝搬される光は、内部自由度である軌道角運動量とスピン（すなわち、光渦と偏光）に対して、以下に示すような特徴的な性質が現れる。

□ 光軌道角運動量（光渦）に対する性質

トポロジーが異なる二つのフォトニック結晶の隣接界面を伝搬する光は、全域的に見るとエネルギーは特定方向に流れているが、局所的に見ると光が渦を巻いている。

□ 光スピン（円偏光）に対する性質

トポロジーが異なる二つのフォトニック結晶の隣接界面を伝搬する光は、左右円偏光に対して伝搬方向が一意に確定する。

光渦と円偏光は、互いに直交した複数のモードを有しており（光渦は螺旋の巻数だけ、円偏光は左右で2つの直交モードが存在する）、それら全てに別の情報を乗せることが可能である[18]。そのため、光渦と円偏光は（特に、直交モードが多い光渦は）光伝送容量の拡大化に向けて重要な要素とされており、光回路内においてこれらを伝搬・維持できるトポロジカルフォトニクス技術の応用先は広いと考えられる。

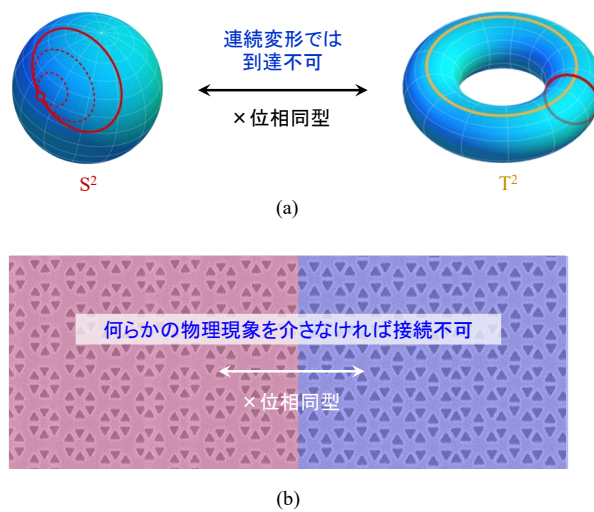


図1 (a) 位相幾何学における同型の概念 (b) フォトニック構造における同型の概念

3. トポロジカルフォトニクスにおける深層学習デザイン

第1節で言及したように、トポロジカルフォトニクスでは、ナノ周期構造における単位胞内と単位胞間の相互作用を同時に制御することで、トポロジーの異なるフォトニック結晶を実現することに重きが置かれている。そのため、通常のフォトニック結晶に比べて構造パラメータの数が多く、複雑なデザインが必要とされる。

図2は、当グループで開発しているデバイスの一例（光回路上のトポロジカル系へ向けて入出力・分岐を行う一連の素子群）であるが、これらは基本的にトポロジーが異なる二つのフォトニック結晶を組み合わせることで実現されている[19-22]。このとき、結晶を構成する単位胞ごとに個別にパラメータを最適化できれば、デバイス性能の向上化が図れる可能性がある。しかし、実際にはパラメータ数が累乗で増大するため、計算コストの面から現実的とはいえない。

深層学習（Deep learning）は、人間の神経細胞の仕組みを再現したニューラルネットワーク（特に、多層構造のニューラルネットワーク）を用いた機械学習の手法のひとつであり、画像認識・音声認識・言語翻訳などをはじめとした様々な分野で導入が進んでいる。そのような中、各種フォトニック構造の設計においても深層学習の導入が始まっている[23, 24]。当グループでは、トポロジカルフォトニクスにおいて“深層学習を用いたデザインインフォマティクス”を提案しており、これによって、デバイスを構成するトポロジカルフォトニック結晶の単位胞ごとに最適化ができるようになり、より柔軟なデバイス設計を行うことが可能となる。

以降の節では、その一例として、シリコン細線導波路とトポロジカル伝送路（トポロジカルエッジ状態によって作られた光伝送路）間の結合効率向上を目的としたデザインインフォマティクスについて述べる。

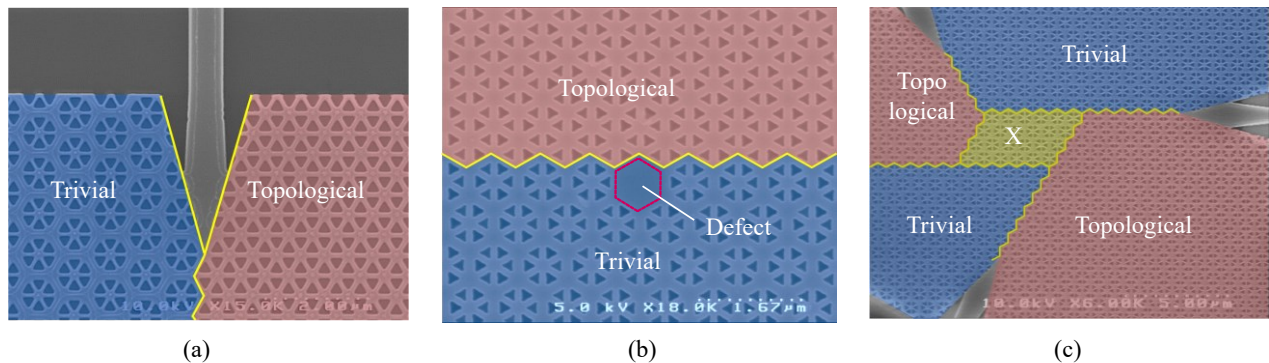


図2 当グループで開発しているデバイスの一例 (a) トポロジカルコンバータ (b) トポロジカル垂直カプラ (c) トポロジカルスプリッタ

4. 深層学習を用いたデザインインフォマティクス

4. 1 ベースとなる素子構造

本研究において用いるトポロジカルフォトニック結晶は、 C_{6v} 対称性を有する誘電体を蜂の巣格子状に配列した構造を採用する。その単位胞を図3(a)に示す。単位胞内の構造は、正三角孔の一边の長さ L と、単位胞の中心から正三角孔の重心までの距離 R 、単位胞の周期 a の3つの設計パラメータで決定される。ここで、周期 a は光通信帯域である $1.55 \mu\text{m}$ で動作するように 730 nm で固定し、基準となる二つのフォトニック結晶（互いにトポロジーが異なる結晶）の設計パラメータ (L, R) はそれぞれ (281, 231), (284, 264) nm とした。

今回は、図3(b)に示すように、上記二つのフォトニック結晶で構成したトポロジカル伝送路と Si 細線導波路を直接結合し、近傍の 6×6 の単位胞に対して個別にパラメータを設計することで結合効率を改善することを考える。このとき、 6×6 の単位胞において L と R の2つのパラメータをそれぞれ考慮した場合、72個のパラメータが存在することになる。常識的に考えて、全てのパラメータを変化させながら結合効率を最大化するのはほぼ不可能な話であり、そういった観点から“深層学習を用いたデザインインフォマティクス”が有効となる。

今回のデザインインフォマティクスでは、画像認識の際に広く用いられる Convolutional Neural Network (CNN) を用いた。画像認識における CNN には、各画素の色を指定するために複数のチャンネル (R, G, B) を持つことや、全結合ネットワークでは考慮されない画素位置に依存した特徴量を参照することが可能となる。この特徴が、トポロジカルフォトニック結晶の各単位胞が (L, R) という設計パラメータをもつことや、デバイス全体が単位胞を組み合わせた二次元構造をとっていることと類似していることから、CNN はトポロジカルフォトニクスにおけるデザインインフォマティクスに極めて適している (図4)。

深層学習による構造設計全体の流れは以下のとおりである。まず学習に用いるためのデータセットの変換を実行し(4.2)、それらデータセットを学習させることでネットワークの構成と最適化を行う(4.3)。その後、最適化されたネットワークを用いて探索アルゴリズムに従って高い結合効率を持つ構造を決定する(4.4)。

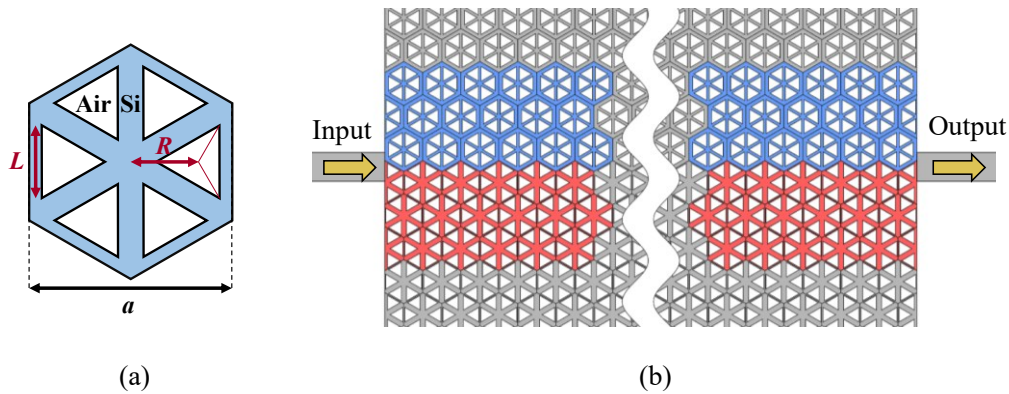


図3 (a) トポロジカルフォトニック結晶の単位胞 (b) トポロジカル伝送路と Si 細線導波路の直接結合

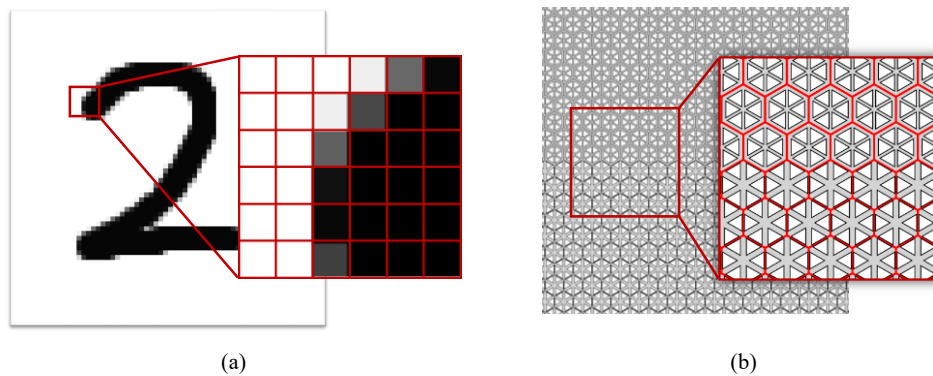


図4 CNNによる画像認識とトポロジカルフォトニクスにおけるデザインインフォマティクスの類似性

4. 2 学習に用いるデータセットの変換

図3(b)に示した素子構造において、深層学習のためのデータセットを取得する。結合部近傍の 6×6 領域に配置された各単位胞における設計パラメータ (L, R) のうち、今回は作製誤差の観点から R のみを深層学習に用いるパラメータとした。これにより、 6×6 領域における各単位胞の $R_i (i = 1 \sim 36)$ 、およびその時のデバイスの出力値 P がデータセットとなる。

まず R_i については、基準となる二つのフォトニック結晶の設計パラメータ $R = 231, 264 \text{ nm}$ を中心として、ガウス分布に従って無作為に変化させた。次に出力値 P については、その状態で 6×6 領域の構造を入力側と出力側で線対称に配置し、FDTD (Finite difference time domain)法を用いることで伝搬解析を行い、そのときの出力強度を読み取る試行を6000回行った。これによって、36単位胞の変数 R_i と出力値 P の組み合わせデータセットを6000個得た。次に、得られたデータセットを学習に適した形へとするため規格化を行った。変数 R_i については、基準となる R の値からの変位値に変換し、更に予測精度を向上させるため変位値を $-0.04 \sim 0.04$ までで正規分布していたものを $-1 \sim 1$ となるようリスケーリングした。また、出力値 P は $0 \sim 0.4$ の範囲を $0 \sim 1$ となるようリスケーリングした。

4. 3 ネットワークの構成と最適化

図5に本研究で用いたネットワークの構成図を示す。周辺構造のパラメータを与えるために上下及び右方向へパディングを行っており (パディングによって与えたパラメータは0、左方向は結晶の単位胞が存在しないため省略)、パディング後の 10×8 の行列に対して 5×5 カーネルを用いて畳み込みを行った。このとき、ストライドは xy 両方向ともに1とした。第2層はReLU活性化関数を介して192ニューロン、第3層はReLUおよびDropoutを介して48ニューロン、第4層はReLUを介して8ニューロンに全結合で接続されている。

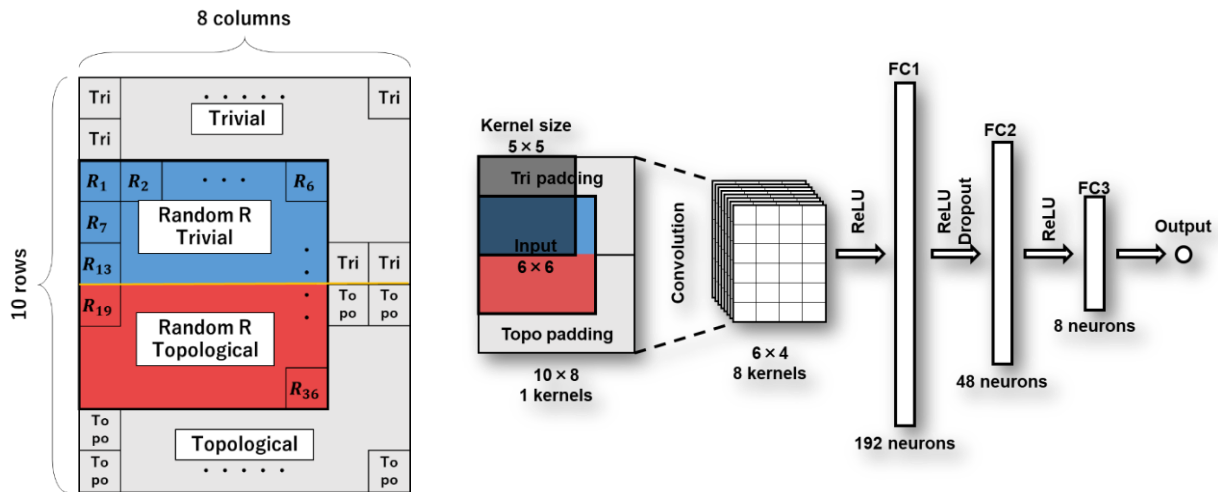


図5 トポロジカル伝送路とSi細線導波路の直接結合のためのニューラルネットワークの構成図

準備したデータセットを用いて上記ネットワークの学習を行った。4.2節で準備したデータセット6000個のうち5500個をネットワークのトレーニングデータとして使用し、残りの500個のデータはテストデータセットとした。学習における損失関数は平均二乗誤差、Batchサイズは500、学習率は0.001に設定し、最適化アルゴリズムとしてAdamを用いてテストデータセットの損失が収束するまで学習を繰り返した。学習回数対予測誤差を図6(a)に示す。これにより、ネットワークの内部パラメータが適切な方向に変更されていることが見て取れる。

500個のテストデータに対するFDTD法による出力値 P と学習済ネットワークによる予測出力値 P の精度検証結果を図6(b)に示す。相関係数は0.943となっており、これによって構造が分散されたパラメータ空間内での予測が機能していることが分かる。

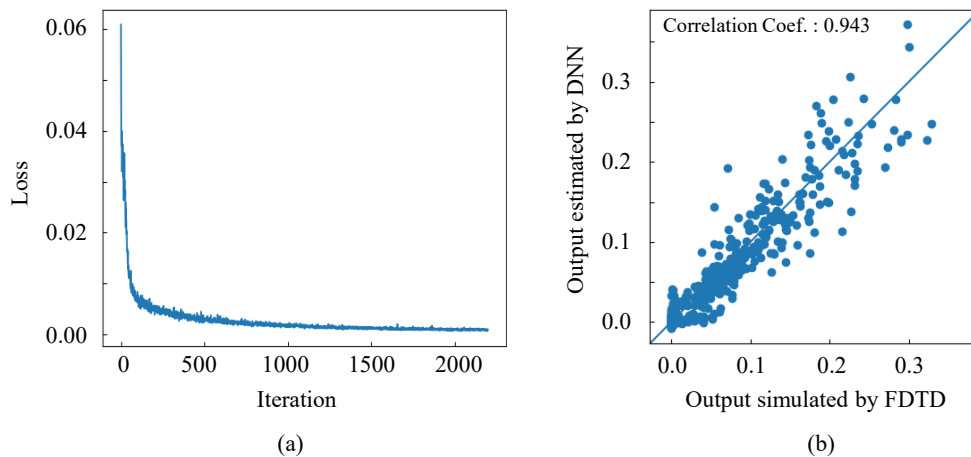


図6 (a) 学習回数対予測誤差 (b) FDTD法による出力値と学習済ネットワークによる予測出力値の精度検証結果

4.4 学習済ネットワークを用いた構造最適化

最後に、トポロジカル伝送路とSi細線導波路の結合効率が最大となるよう、学習済ネットワークを用いて6x6単位胞の構造最適化を行う。4.3節において用意した6000個のデータセットの中で、最も高い出力値 P を持つ構造を初期値として、学習済ネットワークの出力値 P を目標とする出力値 P_{target} に近づくよう入力パラメータ R_i の値を変更していく。

上記アルゴリズムによって導出された構造に対して、FDTD法による解析を行ったところ、出力値 P は0.374となった。二つのフォトニック結晶のみで構成した構造および本手法により導出した構造に

おけるモード分布図を図7に示す（併せて、出力側の結合部付近の拡大図を図中に示す）。この結果からも明らかなように、深層学習を用いたデザインインフォマティクスはトポロジカルフォトニクスにおいて有効といえる。

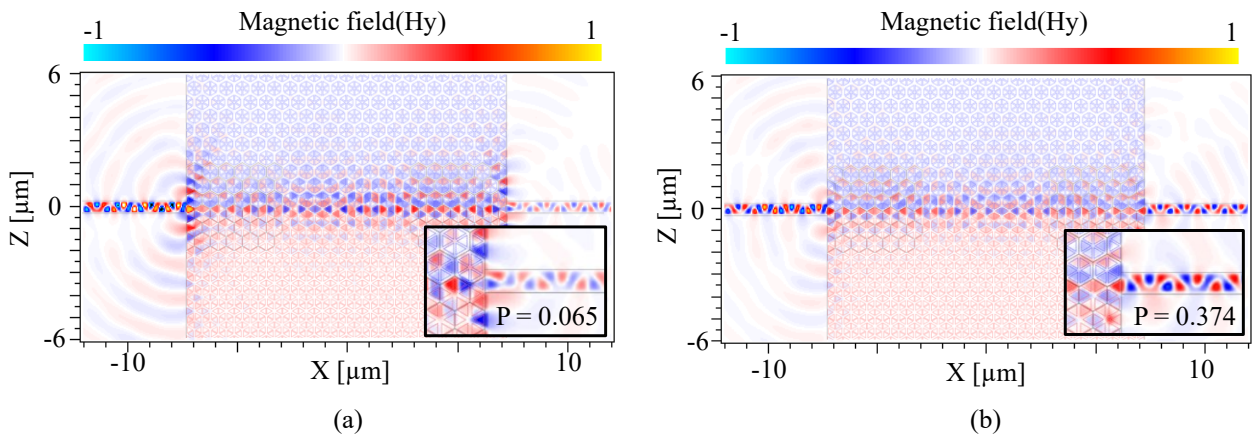


図7 (a) 二つのフォトニック結晶のみで構成した構造におけるモード分布図 (b) 深層学習を用いたデザインインフォマティクスにより導出した構造におけるモード分布図

5. おわりに

当グループでは、トポロジカルフォトニクスにおけるデザインインフォマティクスを提案している。本稿では、その一例として、シリコン細線導波路とトポロジカル伝送路（トポロジカルエッジ状態によって作られた光伝送路）間の結合効率向上を目的とした深層学習による計算手法を解説した。本研究において使用した構造設計の手法はトポロジカルフォトニック構造に対して高い汎用性を有しており、様々なデバイスに対して本手法が適用されることが予見される。

参考文献

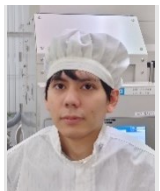
- [1] T. Ozawa, H. M. Price, A. Amo, N. Goldman, M. Hafezi, L. Lu, M. C. Rechtsman, D. Schuster, J. Simon, O. Zilberberg, and I. Carusotto, “Topological photonics,” *Rev. Mod. Phys.* 91, 015006 (2019).
- [2] Y. Poo, R. Wu, Z. Lin, Y. Yang, and C. T. Chan, “Experimental Realization of Self-Guiding Unidirectional Electromagnetic Edge States,” *Phys. Rev. Lett.* 106, 093903 (2011).
- [3] S. A. Skirlo, L. Lu, and M. Soljačić, “Multimode One-Way Waveguides of Large Chern Numbers,” *Phys. Rev. Lett.* 113, 113904 (2014).
- [4] L. Lu, C. Fang, L. Fu, S. G. Johnson, J. D. Joannopoulos, and M. Soljačić, “Symmetry-protected topological photonic crystal in three dimensions,” *Nat. Phys.* 12, 337–340 (2016).
- [5] N. H. Lindner, G. Refael, and V. Galitski, “Floquet topological insulator in semiconductor quantum wells,” *Nat. Phys.* 7, 490–495 (2011).
- [6] T. Kitagawa, E. Berg, M. Rudner, and E. Demler, “Topological characterization of periodically driven quantum systems,” *Phys. Rev. B* 82, 235114 (2010).
- [7] K. Fang, Z. Yu, and S. Fan, “Photonic Aharonov–Bohm effect based on dynamic modulation,” *Phys. Rev. Lett.* 108, 153901 (2012).
- [8] R. O. Umucalılar and I. Carusotto, “Artificial gauge field for photons in coupled cavity arrays,” *Phys. Rev. A* 84, 043804 (2011).
- [9] M. Hafezi, E. A. Demler, M. D. Lukin, and J. M. Taylor, “Robust optical delay lines with topological protection,” *Nat. Phys.* 7, 907–912 (2011).
- [10] A. B. Khanikaev and G. Shvets, “Two-dimensional topological photonics,” *Nat. Photonics* 11, 763–773 (2017).
- [11] S. Barik, A. Karasahin, C. Flower, T. Cai, H. Miyake, W. DeGottardi, M. Hafezi, and E. Waks, “A topological quantum optics interface,” *Science* 359, 666–668 (2018).
- [12] X.-T. He, E.-T. Liang, J.-J. Yuan, H.-Y. Qiu, X.-D. Chen, F.-L. Zhao, and J.-W. Dong, “A silicon-on-insulator slab for topological valley transport,” *Nat. Commun.* 10, 872 (2019).

- [13] N. Parappurath, F. Alpeggiani, L. Kuipers, and E. Verhagen, “Direct observation of topological edge states in silicon photonic crystals: Spin, dispersion, and chiral routing,” *Sci. Adv.* 6, eaaw4137 (2020).
- [14] P. D. Anderson and G. Subramania, “Unidirectional edge states in topological honeycomb-lattice membrane photonic crystals,” *Opt. Express* 25, 23293–23301 (2017).
- [15] J.-C. Lu, X.-D. Chen, W.-M. Deng, M. Chen, and J.-W. Dong, “One-way propagation of bulk states and robust edge states in photonic crystals with broken inversion and time-reversal symmetries,” *J. Opt.* 20, 075103 (2018).
- [16] W. Liu, M. Hwang, Z. Ji, Y. Wang, G. Modi, and R. Agarwal, “Z2 Photonic Topological Insulators in the Visible Wavelength Range for Robust Nanoscale Photonics,” *Nano Lett.* 20, 1329-1335 (2020).
- [17] 雨宮 智宏, 各務 響, 岡田 祥, 西山 伸彦, 胡 曉. トポロジカルフォトンクスと光回路, 電子情報通信学会論文誌 C, Vol. J105-C, No. 9, pp. 244-262 (2022).
- [18] T. Amemiya, T. Yoshida, Y. Atsumi, N. Nishiyama, Y. Miyamoto, Y. Sakakibara, S. Arai, “Orbital Angular Momentum Mux/Demux Module Using Vertically Curved Si Waveguides,” *2019 Optical Fiber Communication Conference (OFC 2019)*, M1C.7, (2019).
- [19] H. Kagami, T. Amemiya, S. Okada, N. Nishiyama, X. Hu, “Topological converter for high-efficiency coupling between Si wire waveguide and topological waveguide,” *Optics Express* 28, 33619-33631 (2020).
- [20] H. Kagami, T. Amemiya, S. Okada, N. Nishiyama, X. Hu, “Highly efficient vertical coupling to topological waveguide with defect structure,” *Optics Express*, 29, 32755-32763 (2021).
- [21] H. Kagami, T. Amemiya, S. Okada, Y. Wang, N. Nishiyama, X. Hu, “Selective excitation of optical vortex modes with specific charge numbers in band-tuned topological waveguides,” *Optics Letters* 47, 2190-2193 (2022).
- [22] S. Okada, T. Amemiya, H. Kagami, Y. Wang, N. Nishiyama, X. Hu “Discussion on fabrication accuracy of infrared topological photonic structures using hyperspectral Fourier image spectroscopy,” *Journal of Optical Society of America B* 39, 2464-2469 (2022).
- [23] T. Asano and S. Noda, “Iterative optimization of photonic crystal nanocavity designs by using deep neural networks,” *Nanophotonics* 8, 2243-2256 (2019).
- [24] Vittorio Peano, Florian Sapper, and Florian Marquardt, “Rapid Exploration of Topological Band Structures Using Deep Learning,” *Phys. Rev. X* 11, 021052 (2021).

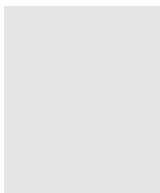


雨宮智宏 Tomohiro Amemiya
東京工業大学 工学院電気電子系 准教授
〒152-8552 東京都目黒区大岡山 2-12-1

【共著の場合は下記にご執筆者の情報をお書きください】



岡田祥 Sho Okada
東京工業大学 工学院電気電子系 大学院生
〒152-8552 東京都目黒区大岡山 2-12-1



坂本樹 Itsuki Sakamoto
東京工業大学 工学院電気電子系 大学院生
〒152-8552 東京都目黒区大岡山 2-12-1



西山伸彦 Nobuhiko Nishiyama
東京工業大学 工学院電気電子系 教授
〒152-8552 東京都目黒区大岡山 2-12-1



胡曉 Xiao Hu
物質材料研究機構 ナノアーキテクトニクス材料研究センター MANA 主任研究者
〒305-0044 茨城県つくば市並木 1-1