FDTD法を用いた光波解析シミュレータ “Poynting for Optics”

my recommendations on research & development tools.

並木 武文[†]

キーワード：FDTD法，電磁波解析，光波解析，回折格子，フォトニック結晶，表面プラズモン

1. ま え が き

光は，これまでに，光通信，光計測，光微細加工，光記録など，さまざまな工学分野で利用されてきている．そして，今後その重要性はますます高まって行くと予想される．光波解析の領域では，古くからさまざまな手法が提案され，改良されてきた．波動であることを意識しない幾何光学的方法¹⁾は，レンズ設計を始め，照明解析やレンダリングに応用されている．多層薄膜や回折格子など対象を特定した方法も多く報告されている．また，光通信の発展と相まって，ビーム伝搬法²⁾が盛んに研究され，光ファイバや光導波路の設計に大きく貢献している．最近では，近接場光デバイスやフォトニック結晶といった光にナノテクノロジーを応用した新しいデバイスが注目されている．これらは，光の波長よりも微小な領域の光学現象を扱うため，光が電磁波（ベクトル波）であることを厳密に考慮した解析手法が必要とされる．

このような電磁波解析を実現するためには，マックスウェル方程式を3次元で解くいわゆるフルウェーブ解析が必要である．そのための数値計算法として，境界要素法，有限要素法，有限差分法などが挙げられるが，有限差分法の一つであるFDTD(Finite Difference Time Domain)法³⁾は，特に有力な手法の一つと考えられる．FDTD法は，電波解析の手法として，ここ十数年の間に盛んに研究され急速に普及した．3次元空間を直方体の差分格子に分割し，電磁界の成分を図1のように配置する．時間と空間の差分式に基づいて，波源からの電磁界変動が空間を伝搬していく過程を逐次的に算出し，電磁界の時系列データを得る．詳細は文献4)5)などを参照されたい．筆者らは，これまでにFDTD法を用いて光波解析をするシミュレータ“Poynting for Optics”（ポインティングフォーオプティクス）⁶⁾を開発し，さまざまな問題に適用しながら計算精

図1 FDTD法で使用する格子と電磁界配置

度を検証してきた⁷⁾．ここでは，それらの中からいくつかの事例について説明する．

2. Poynting for Optics による解析例

解析例として，金属帯モデル，集光ビーム，微小球の散乱，フォトニック結晶導波路を示し，理論値とFDTD法による計算の差異の例を示す．

2.1 光波長帯での金属モデル

光応用では，表面プラズモン増強を利用するために金属を積極的に用いることがある．この場合，金属は負の誘電率を持つ媒質として計算する必要があるが，標準的なFDTD法では対処できない．もちろん電波解析でよく行われるような完全導体としての扱いはできない．そこで，金属を分散性媒質として計算する方法が提案されている．FDTD法で分散性媒質を計算するアルゴリズムには，帰納的差分表現を用いる方法と補助微分方程式を用いる方法⁸⁾があるが，ここでは後者を採用している．この場合，図1の差分格子において，電磁界の他に分極電流を定義し，電磁界の計算と並行して逐次計算を行う．

図2は，金属（Al）と誘電体（SiO₂）から成る回折格子で，波長以下の周期構造を持つ．この回折格子に垂直に光を入射させ透過率を計算した．金属（Al）の複素誘電率は， $-23.38+j4.763$ （Drudeモデル），誘電体（SiO₂）の誘電率は2.455とし，幅は両者とも30nmとした．入射光の波長は400nmである．

* 本稿の著作権は，著者に帰属致します．

[†] 富士通株式会社 テクニカルコンピューティング・ソリューション事業本部

"Poynting for Optics": Light Wave Simulation Software Using Finite-Difference Time-Domain Method" by Takefumi Namiki (Computational Science and Engineering Solution Division, Technical Computing Solutions Unit, Fujitsu Limited, Chiba)

図2 回折格子の計算モデル

図3 透過効率と格子厚の関係

図4 回折格子からの出射光プロファイル

図3は、回折格子の厚さを变化させた場合の透過率である。この透過率は、回折格子から十分に離れた地点で出力した電界強度から算出している。また、図4は、回折格子の厚さ500nm、出力距離5nmの場合の電界強度プロファイルである。各図において、固有関数展開法⁹⁾による計算結果を併せて示しているが、FDTD法の計算結果と良好に一致している。

2.2 レンズによる集光ビーム

FDTD法でレンズによる集光を計算することは可能であ

図5 集光ビーム波源の概念

図6 光ディスクの計算モデル

るが、解析対象と焦点距離を介して配されたレンズを一体とした解析は、計算領域が必要以上に大きくなり効率が悪い。そこで、図5に示したように、解析対象の近傍に設定した励振領域に形成される電界および位相分布をあらかじめ光学的手法¹⁰⁾で求め、FDTD法による電磁波解析の際に、それを電界の時間変動として与える方法を用いている。

図6は、レンズで集光された光がSIL (Solid Immersion Lens) とエアギャップを介して媒体に照射される光ディスクの計算モデルである。入射光の波長は655nm、SILの屈折率は1.8、SIL内のNAは1.44、エアギャップは130nm、媒体の屈折率は2.1とした。媒体表面上の電界強度を算出した結果を図7に示す。入射波である球面波を平面波展開し境界地問題として計算した結果¹¹⁾を併せて示している。両者の結果が良好に一致していることから、集光ビームが正常に励振されていることが確認できる。

2.3 微小球の散乱

直径が波長程度である微小球の散乱問題は、光計測や光記録の分野で重要である。散乱問題をFDTD法で計算する場合、遠方界を算出すること、全電磁界から散乱界を抽出することが必要になる。遠方界は、電磁波の等価定理と電磁ポテンシャルの積分法¹²⁾を応用して、次のような手順で算出する。計算開始前にあらかじめ散乱体を取り囲む直

図7 媒体表面上の電界強度

図8 完全導体球の全散乱断面積

方体の閉領域を設定し、領域表面上の電磁界から等価電磁流の時系列データを出力する。続いて、この電磁界を表面上で積分して時間領域の遠方界を求め、さらにフーリエ変換により周波数領域のデータを算出する。また、散乱界の抽出は、散乱体があるモデルとないモデルについてFDTD法で計算し、それらの差分を算出することで、散乱界にのみ寄与する等価電磁流を算出し、それを遠方界に変換することで計算している。

直径100nmの完全導体球にパルス状の平面波を照射し、波長420～750nmの全散乱断面積を計算した結果を図8に示す。ここでも、理論値と計算結果がよく一致している。

2.4 フォトニック結晶導波路

図9は、フォトニック結晶導波路の曲がり部分の例である。図の黒丸部分は、屈折率3.4の誘電体円柱であり、その欠損部分を導波路としている。これに、規格化周波数0.394のTEおよびTMのモードの光を励振した様子を図10に示す。TMモードの場合は光が拡散して行くのに対し、TEモードの場合は光が導波路に沿って伝搬して行く様子が確認できる。

図11は、フォトニック結晶導波路を用いた方向性結合

図9 90°曲がりフォトニック結晶導波路

図10 伝搬の様子(左:TEモード、右:TMモード)

図11 フォトニック結晶方向性結合器

器の例^{13) 14)}である。Port 1から入射した光が、Port 2およびPort 3へ射出するが、導波路境界に配した誘電体(図11の黒丸部分)の誘電率を変えると、図12、図13に示すように、出射光の分配率が変わるというものである。

なお、これらの例では、紙面垂直方向は格子分割数2とし、その終端には周期境界条件を設定して、擬似的な2次元問題として計算している。

以上のように、FDTD法を用いてフォトニック結晶導波路の解析ができることを定性的に確認した。今後は、計算精度の検証を行い、実際の導波路設計に応用して行く予定

図12 伝搬の様子

図13 出射光の分配率

図14 PCクラスタの構成例

モデルA

CPU数	1	2	4	8	16	32
計算速度向上	1.0	1.9	4.0	7.4	13.6	21.0
CPU当たりの 所有メモリー (MB)	1005	507	256	130	67	35

モデルB

CPU数	1	2	4	8	16	32
計算速度向上			1.0	1.8	3.4	6.6
CPU当たりの 所有メモリー (MB)			1998	1004	506	256

図15 並列計算の性能

である。

3. 並列計算への対応

FDTD法で問題になるのは、その計算負荷の高さである。例えば、前項のフォトニック結晶を3次元で解析するような場合、莫大な主記憶容量と計算時間が必要となり、計算が困難になることが予想される。そこで、筆者らは、図14のようなPCクラスタを用いて並列計算が実行できるようにした。OSはRedhat Enterprise Linux 3.0、並列化ライブラリはMPICHを用いている。

2種類の計算モデルについて、並列計算性能を測定した結果を図15に示す。モデルAは格子数が $250 \times 250 \times 250$ 、モデルBは格子数が $500 \times 500 \times 500$ である。これから32CPUの場合計算速度は21倍まで向上していることがわかる。今後は、並列計算により大規模問題に取り組んで行く予定である。

4. む す び

本稿では、FDTD法を用いて光波解析をするシミュレータ“Poynting for Optics”の計算事例について紹介した。今後、光波解析の領域では、このようなシミュレータのニーズがますます増加すると考えられるが、筆者らは、それらの期待に応えるべくバージョンアップをしていく予定である。

(2008年7月15日受付)

〔文 献〕

- 1) W.J. Smith: "Modern Optical Engineering", McGraw- Hill (1990)
- 2) M.D. Feit and J.A. Fleck, Jr.: "Light Propagation in Graded-index Optical Fibers", Appl. Opt., 17, 12, pp.3990-3998 (1978)
- 3) K.S. Yee: "Numerical Solution of Initial Boundary Value Problems Involving Maxwell's Equations in Isotropic Media", IEEE Trans. AP-14, pp.302-307 (1966)
- 4) A. Taflov: "Computational Electrodynamics", MA, Artech House (1995)
- 5) 宇野亨: "FDTD法による電磁界およびアンテナ解析", コロナ社
- 6) Poynting for Optics (ポインティングフォーオプティクス) 製品紹介ページ, <http://jp.fujitsu.com/solutions/hpc/app/poynting/>
- 7) 長谷川信也, 小田島渉, 並木武文: "光ナノテクノロジー分野での解析を支援する光シミュレータ", FUJITSU 2005-7月号, 56, 4 (2005)
- 8) J.B. Judkins and R.W. Ziolkowski: "Finite-difference Time-domain Modeling of Nonperfectly Conducting Metallic Thin-film Gratings, J. Opt. Soc. Am. A, 12, pp.1974-1983 (1995)
- 9) P. Sheng, R.S. Stepleman, and P.N. Sanda: "Exact Eigenfunctions for Square-wave Gratings: Application to Diffraction and Surface-plasmon Calculations", Phys. Rev. B 26, pp.2907-2916 (1982)
- 10) M. Born, E. Wolf: "Principles of Optics", Pergamon Press (1959)
- 11) S. Hasegawa, N. Aoyama, A. Futamata, and T. Uchiyama: "Optical Tunneling Effect Calculation of a Solid Immersion Lens for Use in Optical Disk Memory", Appl. Opt. 38, pp.2297-2300 (1999)
- 12) 徳丸仁: "基礎電磁波", 森北出版
- 13) 下村正樹, 横田光広: "宮崎大学工学部紀要", 33, pp.169-172 (2004)
- 14) 三星敏宏, 下村正樹, 横田光広: 第12回信学九州支部学生会, C-21 (2004)

並木 武文 1986年、(株)富士通研究所入社。光デバイスの研究に従事。1991年、富士通(株)へ転属。科学技術計算に関する業務、電磁波問題の数値解析法の研究、電磁波解析ソフトウェアの開発に従事。現在、同社計算科学ソリューション統括部プロジェクト部長。工学博士。