光電磁場解析手法としてのFDTD法

市川 裕之

愛媛大学大学院 理工学研究科電子情報工学専攻 (〒790-8577 愛媛県松山市文京町3番)

Electromagnetic Numerical Analysis of Optical Waves: FDTD Method

Hiroyuki ICHIKAWA

Faculty of Engineering, Ehime University, 3 Bunkyo, Matsuyama, Ehime 790-8577

(Received May 15, 2008)

Analyzing behaviour of light as electromagnetic wave is nowadays very important in many fields in optics and photonics. This trend has been accelerated by development of fabrication technology down to nano-scale. One of the most popular numerical tools for that task is the finite-difference time-domain (FDTD) method. This review explains the essence of the FDTD method from the basic so that absolute beginners can understand the subject and will be able to use the FDTD method for various applications including optical elements, plasmonic, metamaterials, near field optics, ultrafast phenomena, terahertz waves, laser processing and biomedical optics in the near future.

Key Words: Electromagnetic field, Numerical analysis, FDTD method

1. はじめに

光の本質は、言うまでもなく、電磁波である。したがって、その振舞いを正確に記述するためには、光を電磁波として扱わなければならないはずである。これは、光は3次元空間で位置に関して3つの成分を持つベクトル波であることを意味する。ところが、現実の問題に接すると、必ずしもそうではない場合も多い。これは、光を位置に関する振動成分が一つだけのスカラー波とみなせることを意味する。その一番の理由は、光の波長が光に関わる素子やデバイスの寸法よりも何桁も小さいことである。その説明はBorn & Wolf¹⁾やGoodman²⁾の著書に詳しいため、ここであらためて繰り返すまでもない。そこで電磁波としての光の現象を探すと、身近なところでまず、偏光が挙げられる。薄膜干渉は伝搬方向の微細構造に起因する電磁波現象である一方、垂直方向の微細構造の問題である開口近傍での回折現象は20世紀前半において多数の数学者が関わる研究テーマであった。ただし、そこで扱われていたのは解析的な問題である。やがて、1990年頃から微細加工技術が進み、光の波長以下の構造を持つ光学素子の作製が可能になってきた。ここに至り、電磁波である入射光に対する任意形状の素子の影響を正確に把握する必要が生じたと言える。すなわち、光電磁場解析が単なる学問的な研究対象だけでなく、実用上の必要作業となったのである。また、任意形状に対し

ては数値解析に依らざるを得ないため、基礎理論はあっても実際の計算が出来るためには、その頃まで計算機の性能向上を待たなければならなかったとも言えよう。

本稿では、アンテナや電波伝搬の分野も含めて、今や電磁場解析の標準的手法となっている時間領域差分法 (finite-difference time-domain method: 以下FDTD法) を中心として、光電磁場の数値解析に関する解説を行う。

2. 光電磁場の数値解析

電磁波伝搬の数値解析は電波の世界で先行していたと言えよう。そこで用いられてきた様々な手法についてまとめられた参考書³⁾も出ている。基本的に電波も光も同じなのだが、本稿では、光電磁場の解析に的を絞って話を進めたい。

まず電磁場解析の手法は大きく二つに分類される。一つ目が時間領域の手法である。これは、位置 $\mathbf{r}$ 、時刻 t における位相 $\omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}$ から正弦波の振幅 $\sin(\omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$ を直接計算するもので、その代表的な手法がFDTD法である。解析対象となる空間全体の電磁場の変化を逐一、時間を追って計算するもので、過渡現象の解析も可能であり、計算結果の可視化も容易である。もう一方は周波数領域の手法と呼ばれ、正弦波の振動から時間項を取り除いた複素振幅 $\exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$ を扱うもので、時間による位相差の情報は複素振幅の偏角に含まれることになる。この手法

† RCWA と呼ばれる厳密結合波解析はフーリエモード法の一つである。

には、フーリエモード法[†]、微分法、積分法、C method、有限要素法、境界要素法などがある。

3. FDTD法

1966年にYee⁴⁾によってその原理が提案されたが、アンテナや電波伝搬の分野で普及し始めたのは計算機的能力が追いついて来た1990年頃からである。光の分野でも1990年代後半から使われ始めて、現在では“FDTD法もすっかり市民権を得た”と言われるまでになっている。FDTD法に関する文献としては、総合的な参考書⁵⁻⁸⁾に加えて、光学分野での応用に的を絞った入門的な解説⁹⁻¹³⁾などもある。さらに、近年では市販のソフトウェアも数多くあり¹⁴⁾、誰でも手軽に利用できると言っても過言ではない。

しかし、もしFDTD法のプログラムを自作しようとするとかかなり敷居が高いと聞く。また、市販のソフトを利用するにしても、ある程度FDTD法の原理を知っていなければ問題の設定や計算結果の正しい解釈が困難な場合も多い。そこで、ソフトの自作や使用のために、ここでは xz 平面における2次元の問題を例にとりてFDTD法に関する必要最低限の情報を整理したい。実際に解析する問題に応じた修正や細部の取り扱いとは多種多様であるため、本稿はさらに詳しい専門書や文献を読むための前提知識の準備の便を図るものと理解していただければ幸いである。

3.1 電磁場の離散化

電磁波の挙動は、光源以外の場所で、マクスウェルの回転方程式

$$\nabla \times \mathbf{H} = \varepsilon \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} + \sigma \mathbf{E} \quad (1)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\mu \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} \quad (2)$$

にしたがう。ここで、 $\mathbf{E}$ は電場、 $\mathbf{H}$ は磁場、 ε は誘電率、 μ は透磁率、 σ は導電率である。FDTD法の本質はこれらの電磁場 $\mathbf{E}$ 、 $\mathbf{H}$ を時間と空間の双方で離散化する、すなわち、式(1)、(2)における微分をすべて

$$\frac{\partial f}{\partial s} \rightarrow \frac{f(s+\Delta s/2) - f(s-\Delta s/2)}{\Delta s} \quad (3)$$

のような差分に置き換えるところにある。

まず電磁場の空間的な離散化とは、 xz 平面におけるTE波の問題を例にとると、Fig. 1に示すように、3つの電磁場成分 E_y 、 H_x 、 H_z をいずれも x 方向に Δx 、 z 方向に Δz の間隔で矩形格子点上に配置された異なる位置(サンプル点)で評価することである。また、時間的な離散化とは Δt の時間間隔で電磁場を評価することであり、しかも電場と磁場の評価は $\Delta t/2$ だけずれたタイミングで行われる。なお、ここでは $E_x = E_z = H_y = 0$ であることに注意する。

さて、式(1)、(2)をFig. 1に当てはめると、それぞれ

$$\frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial x} = \varepsilon_y \frac{\partial E_y}{\partial t} + \sigma_y E_y \quad (4)$$

Fig. 1 Sample points in the FDTD method for TE wave.

□: E_y , ●: H_x , ▲: H_z .

$$\frac{\partial E_y}{\partial z} \hat{x} - \frac{\partial E_y}{\partial x} \hat{z} = \mu_x \frac{\partial H_x}{\partial t} \hat{x} + \mu_z \frac{\partial H_z}{\partial t} \hat{z} \quad (5)$$

となる。ここで、位置を $(i, k) = (x/\Delta x, z/\Delta z)$ 、時刻を $n = t/\Delta t$ と自然数で表し、式(4)では位置 (i, k) 、時刻 $n + \frac{1}{2}$ で、式(5)の x 成分では位置 $(i, k + \frac{1}{2})$ 、時刻 n で、 z 成分では位置 $(i + \frac{1}{2}, k)$ 、時刻 n に関して微分を差分に置き換えると、以下のようなFDTD法の基本式が得られる。

$$E_y^{n+1}(i, k) = A(i, k)E_y^n(i, k) + B(i, k) \times \left[\frac{H_x^{n+\frac{1}{2}}(i, k + \frac{1}{2}) - H_x^{n+\frac{1}{2}}(i, k - \frac{1}{2})}{\Delta z} - \frac{H_z^{n+\frac{1}{2}}(i + \frac{1}{2}, k) - H_z^{n+\frac{1}{2}}(i - \frac{1}{2}, k)}{\Delta x} \right] \quad (6)$$

$$H_x^{n+\frac{1}{2}}(i, k + \frac{1}{2}) = H_x^{n-\frac{1}{2}}(i, k + \frac{1}{2}) + \frac{\Delta t}{\mu_x(i, k + \frac{1}{2})} \frac{E_y^n(i, k + 1) - E_y^n(i, k)}{\Delta z} \quad (7)$$

$$H_z^{n+\frac{1}{2}}(i + \frac{1}{2}, k) = H_z^{n-\frac{1}{2}}(i + \frac{1}{2}, k) - \frac{\Delta t}{\mu_z(i + \frac{1}{2}, k)} \frac{E_y^n(i + 1, k) - E_y^n(i, k)}{\Delta x} \quad (8)$$

$$A(i, k) = \frac{1 - \sigma_y(i, k)\Delta t/2\varepsilon_y(i, k)}{1 + \sigma_y(i, k)\Delta t/2\varepsilon_y(i, k)} \quad (9)$$

$$B(i, k) = \frac{\Delta t/\varepsilon_y(i, k)}{1 + \sigma_y(i, k)\Delta t/2\varepsilon_y(i, k)} \quad (10)$$

ε_y 、 μ_x 、 μ_z は添え字で示された方向に振動する電磁場に関する量でありそれぞれ E_y 、 H_x 、 H_z と同じ位置で評価する。すなわち、たとえば、 $\varepsilon_y(i, k)$ は位置 (i, k) を中心として x 、 z 方向の幅がそれぞれ Δx 、 Δz の矩形領域における ε_y の平均値であり、 $E_y(i, k)$ はその矩形領域内の電場 E_y を代表していると理解すれば良い。光学における大半の応

用では非磁性体を扱うため、その場合の透磁率は真空中の値となる。

3.2 安定化条件

解析領域における最も速い光速を $v_{\max}$ とすると、式(6)-(8)において、

$$v_{\max} \Delta t \leq [(\Delta x)^{-2} + (\Delta z)^{-2}]^{-1/2} \quad (11)$$

が満たされない場合、式(6)-(8)の計算値はたちまち不安定になり発散してしまう。

3.3 初期条件

計算の初期条件は実験室における光源に相当する。その原理は、想定した光源から出射した光の波面を実現するべく、ある面上での電磁場を時間的に変化させることである。

3.3.1 点光源

一番、単純な形式である点光源は、光源位置 (i_s, k_s) の電場 $E_y^n(i_s, k_s)$ を時間的に正弦的に振動させることで実現できる。

3.3.2 平面波

$k = k_s$ の直線上の電場を

$$E_y^n(i, k_s) = \sin \left\{ 2\pi \frac{c}{\lambda} \left[n\Delta t - \frac{\sqrt{\epsilon_r}}{c} (i-1)\Delta x \sin \theta \right] \right\} \quad (12)$$

のように与えれば、 z 軸に対して θ の角度で伝搬する平面波を生成することが出来る。ここで、 c は真空中の光速、 λ は真空中の波長、 ϵ_r は媒質の比誘電率である。

3.3.3 ガウスビーム

原点から距離 ρ 、角度 ϕ の位置にビームウエストの中心を持つガウスビーム (Fig. 2) は、 pq 座標系で

$$U(p, q, t) = A \sqrt{\frac{w_0}{w(q)}} \exp \left[-\frac{p^2}{w^2(q)} \right] \sin \left[\frac{c}{\lambda} t - \frac{2\pi\sqrt{\epsilon_r}}{\lambda} q - \frac{\pi\sqrt{\epsilon_r}}{\lambda} \frac{p^2}{R(q)} + \frac{\zeta(q)}{2} \right] \quad (13)$$

Fig. 2 Gaussian beam having a beam waist at $q=0$.

$$w(q) = w_0 \left[1 + (q/q_0)^2 \right]^{1/2} \quad (14)$$

$$R(q) = q \left[1 + (q_0/q)^2 \right] \quad (15)$$

$$\zeta(q) = \tan^{-1}(q/q_0) \quad (16)$$

と表される¹⁵⁾。ここで、 A はビームウエスト中心の振幅、 w_0 はビームウエスト半径、 q_0 はRayleigh rangeである。なお、この式(13)は2次元平面のガウスビームである。もし、通常の教科書に載っている3次元空間のガウスビームの式を2次元のFDTD法で用いた場合には、エネルギー保存則が満たされないことに注意する必要がある。このように定義された式(13)に

$$p = i\Delta x \cos \phi - k_s \Delta z \sin \phi \quad (17)$$

$$q = i\Delta x \sin \phi + k_s \Delta z \cos \phi + \rho \quad (18)$$

を施すことで、 $k = k_s$ 上の電場 $E_y^n(i, k_s)$ を得ることが出来る。

3.3.4 初期条件の与え方

上述の平面波やガウスビームの電場の振動を光源面 $k=k_s$ で実行するだけの光源をハードソースと呼び、一般には正しい計算は行われない。なぜなら、その光源面は、周囲の電磁場の変動には無関係に式(12)などで指定された振動をするだけの、現実には存在しない数値的な壁となり、物体に散乱されてそこに戻ってきた光波を反射してしまうためである。

これをさけるための方法が幾つか提案されている。たとえば平面波の場合、ソフトソースと呼ばれる手法の一種として、式(12)の代わりに

$$E_y^{n+1}(i, k_s) = E_{y, \text{pro}}^{n+1}(i, k_s) + E_{y, \text{inc}}^n(i, k_s) \quad (19)$$

とすることで、戻ってきた反射光はそのまま光源面を通り抜けて行く。ここで、右辺第1項は式(6)の通常の式であり、右辺第2項は式(12)で与えられる初期条件である。

このほかに、少々複雑だが、安定した動作をするtotal field/scattered field⁵⁾と呼ばれる優れた方法がある。これは、解析領域を、入射波と散乱体による散乱波の双方が存在する全電磁場領域と、それを取り囲み散乱波だけが存在する散乱場領域の2つに分け、その境界面上で所望の入射波を全電磁場領域に向かって発生させる方法である。

3.4 境界条件

FDTD法の特徴は、式(6)-(8)から分かるように、周囲の磁(電)場の値を用いてある位置の電(磁)場を求めるところにある。実際の計算で無限に広い領域を扱うことは無論不可能なため、どこかで境界を設けて空間的な制限をする必要がある。その際に何の処置もしなければ、式(6)-(8)に従ってその境界から現実には起こりえない反射波が生じることになる。これを防ぐための処置が境界条

件である。

境界に入射した光波が反射することなく境界で吸収されるように、解析領域の外枠たる境界に設定される吸収境界条件は、FDTD法を使用する上で一番重要な鍵と言っても差し支えない。ここでは、適用の容易なMurの境界条件¹⁶⁾と最も優れた性能で最も良く利用されているperfectly matched layer (PML)¹⁷⁾を紹介する。ただし、この吸収境界条件はどのようなものであっても境界に対する入射角が大きくなるにつれて性能が劣化し、90°の入射に対しては反射率は100%になってしてしまう。この他に、周期的な問題を解析する際の、周期境界条件にも言及しておく。

3.4.1 Mur の境界条件

境界での反射が0になるように微分方程式を解いて境界面上の電場の値を求める方法である。まず、式(1)、(2)より得られる均質媒質中のTE波の電場に関する波動方程式を以下のように変形する。

$$0 = \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{1}{v} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right) E \\ = \left(\frac{\partial}{\partial z} + \frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial t} \sqrt{1-S^2} \right) \left(\frac{\partial}{\partial z} - \frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial t} \sqrt{1-S^2} \right) E \quad (20)$$

ここで、 $S = v(\partial/\partial x)/(\partial/\partial t)$ 、 v は媒質中の光速であり、第1、第2項はそれぞれ z の正負方向に伝搬する平面波を表している。したがって、解析領域の $z \rightarrow$ 大の側の端の境界($k=K$)で第1項の式

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial z \partial t} + \frac{1}{v} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \frac{v}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) E = 0 \quad (21)$$

を適用すれば、その境界に入射する光波はすべて透過するため反射波は存在しないことになる。この式(21)を差分化すると、2次元におけるMurの境界条件の式

$$E_y^{n+1}(i, K) = -E_y^{n-1}(i, K-1) \\ + \frac{v\Delta t - \Delta z}{v\Delta t + \Delta z} [E_y^{n+1}(i, K-1) + E_y^{n-1}(i, K)] \\ + 2 \frac{\Delta z}{v\Delta t + \Delta z} [E_y^n(i, K) + E_y^n(i, K-1)] \\ + \Delta z \frac{(v\Delta t)^2}{2(v\Delta t + \Delta z)} \frac{1}{(\Delta x)^2} \\ \times [E_y^n(i+1, K) - 2E_y^n(i, K) + E_y^n(i-1, K)] \\ + [E_y^n(i+1, K-1) - 2E_y^n(i, K-1) + E_y^n(i-1, K-1)] \quad (22)$$

が得られる。

3.4.2 Perfectly matched layer (PML)

境界面外側に置かれた仮想的な媒質によって境界への入射波を吸収する方法である。誘電率 ϵ 、透磁率 μ の均質な誘電体から、誘電率 ϵ_p 、透磁率 μ_p の均質な損失性媒体への平面波の入射において、

$$\epsilon_p = \epsilon - i\sigma_p/\omega \quad (23)$$

$$\mu_p = \mu - i\sigma_p^*/\omega \quad (24)$$

$$\sigma_p/\epsilon = \sigma_p^*/\mu \quad (25)$$

であるならば、両媒質間のインピーダンス整合により、入射波の角周波数 ω に無関係に境界におけるフレネル反射は0になることが容易に示される。ここで、 σ_p 、 σ_p^* はそれぞれ導電率、導磁率である。すなわちここで用いる損失性媒体は電場と磁場の双方を吸収する性質を持つ仮想的な媒質であり、これをperfectly matched layer (PML)と呼ぶ。

そのポイントは、PML中の導電率と導磁率を x 、 z 成分に分け、さらに電場成分も $E_y = E_{yx} + E_{yz}$ のように成分に分けることで境界に斜めに入射した波に対応する点にある (Fig. 3)。このときマクスウェルの方程式は以下のようになる。

$$\frac{\partial H_x}{\partial z} = \epsilon \frac{\partial E_{yz}}{\partial t} + \sigma_{pz} E_{yz} \quad (26)$$

$$-\frac{\partial H_z}{\partial x} = \epsilon \frac{\partial E_{yx}}{\partial t} + \sigma_{px} E_{yx} \quad (27)$$

$$\frac{\partial (E_{yx} + E_{yz})}{\partial z} = \mu \frac{\partial H_x}{\partial t} + \sigma_{px}^* H_x \quad (28)$$

$$-\frac{\partial (E_{yx} + E_{yz})}{\partial x} = \mu \frac{\partial H_z}{\partial t} + \sigma_{pz}^* H_z \quad (29)$$

たとえば、 z 軸に垂直な境界において

$$\sigma_{px} = \sigma_{px}^* = 0 \quad (30)$$

$$\frac{\sigma_{pz}}{\epsilon} = \frac{\sigma_{pz}^*}{\mu_0} \quad (31)$$

とすれば、 z 方向に伝搬する成分は吸収されて減衰する一方、 x 方向に伝搬する成分には減衰はない。しかし、

Fig. 3 Key concept of the PML. E_{yz} component is absorbed in propagating in the z direction.

Fig. 3に示すように、角の部分で x , z 方向いずれの成分も吸収することが出来る。

PMLにおいても Fig. 4に示すようにサンプル点の配置は同じであり、ただ E_y の位置で E_{yx} , E_{yz} の双方を個別に評価するだけである。式(26)-(29)を差分化すると以下のようなPML中の式が得られる。

$$E_{yz}^{n+1}(i, k) = a(i, k)E_{yz}^n(i, k) + b(i, k)\left[H_x^{n+\frac{1}{2}}(i, k+\frac{1}{2}) - H_x^{n+\frac{1}{2}}(i, k-\frac{1}{2})\right] \quad (32)$$

$$E_{yx}^{n+1}(i, k) = E_{yx}^n(i, k) - \frac{\Delta t}{\epsilon_y(i, k)\Delta x}\left[H_z^{n+\frac{1}{2}}(i+\frac{1}{2}, k) - H_z^{n+\frac{1}{2}}(i-\frac{1}{2}, k)\right] \quad (33)$$

$$H_x^{n+\frac{1}{2}}(i, k+\frac{1}{2}) = a^*(i, k+\frac{1}{2})H_x^{n-\frac{1}{2}}(i, k+\frac{1}{2}) + b^*(i, k+\frac{1}{2}) \times [E_{yx}^n(i, k+1) + E_{yz}^n(i, k+1) - E_{yx}^n(i, k) - E_{yz}^n(i, k)] \quad (34)$$

$$H_z^{n+\frac{1}{2}}(i+\frac{1}{2}, k) = H_z^{n-\frac{1}{2}}(i+\frac{1}{2}, k) - \frac{\Delta t}{\mu_z\Delta x} \times [E_{yx}^n(i+1, k) + E_{yz}^n(i+1, k) - E_{yx}^n(i, k) - E_{yz}^n(i, k)] \quad (35)$$

ただし、

$$a(i, k) = \exp[-\sigma_{pc}(i, k)\Delta t/\epsilon_y(i, k)] \quad (36)$$

$$b(i, k) = [\Delta t/\epsilon_y(i, k)]\exp[-\sigma_{pc}(i, k)\Delta t/2\epsilon_y(i, k)] \quad (37)$$

$$a^*(i, k+\frac{1}{2}) = \exp[-\sigma_{pc}^*(i, k+\frac{1}{2})\Delta t/\mu_x] \quad (38)$$

$$b^*(i, k+\frac{1}{2}) = (\Delta t/\mu_x)\exp[-\sigma_{pc}^*(i, k+\frac{1}{2})\Delta t/2\mu_x] \quad (39)$$

PMLの外側を完全導体で取り囲むと、PMLに入射した波はPML層内を往復しながら減衰して解析領域に戻ってくる。PMLの導電率分布は境界での値を0として

Fig. 4 Sample points in the PML. Analyzed area inside the dotted line is surrounded by the hypothetical absorbing medium shown with gradation. Symbol convention is the same as in Fig. 1.

$$\sigma(\rho) = \sigma_m(\rho/\rho_m)^M \quad (40)$$

の形に定める。ここで、 ρ はPML内の境界からその垂直方向の距離であり、 ρ_m はPMLの厚さ、 σ_m はPML終端での導電率である。 M には通常2~4の値を用いる。このとき、垂直入射した光波がPML層を往復した後の電場の反射率は

$$R = \exp\left(-\frac{2}{M+1} \frac{\sigma_m \rho_m}{\sqrt{\epsilon_y/\mu}}\right) \quad (41)$$

で与えられる。 R と M を指定すれば式(41)から σ_m が求まり、式(40)により各位置の導電率が決まる。導磁率も同様にして与えられる。

3.4.3 周期境界条件

例として、 x 方向に周期的な構造に対して z 方向に伝搬する平面波が垂直入射する場合を考える。この場合は散乱波の電磁場も構造と同じ周期を有するため、1周期分だけの計算を実行すればよい。周期が $I\Delta x$ である場合 (Fig. 5), $i=1$ と $i=I+1$ の位置での電磁場は等価であるから、FDTD法の基本式において、式(6), (8)をそれぞれ

$$E_y^{n+1}(1, k) = A(1, k)E_y^n(1, k) + B(1, k) \times \left[\frac{H_x^{n+\frac{1}{2}}(1, k+\frac{1}{2}) - H_x^{n+\frac{1}{2}}(1, k-\frac{1}{2})}{\Delta z} - \frac{H_z^{n+\frac{1}{2}}(\frac{3}{2}, k) - H_z^{n+\frac{1}{2}}(I+\frac{1}{2}, k)}{\Delta x} \right] \quad (42)$$

$$H_z^{n+\frac{1}{2}}(I+\frac{1}{2}, k) = H_z^{n-\frac{1}{2}}(I+\frac{1}{2}, k) - \frac{\Delta t}{\mu_z(i+\frac{1}{2}, k)} \frac{E_y^n(1, k) - E_y^n(I, k)}{\Delta x} \quad (43)$$

とすることで、 x 方向に無限に続く周期構造に対処できることになる。

3.5 応用に際して

本稿で紹介してきた内容は、光波の発生、伝搬、解析領域終端の処理など、FDTD法を使用する上で必要不可欠な要素のみであるため、解析する問題に応じてこれに加

Fig. 5 Periodic boundary condition.

えてさらに色々な要素を付け加えて行くことになる。ここで、電磁波伝搬の問題を複雑にする要因は、不均質性、分散性、非線形性、異方性など媒質の性質であることに注意したい。

FDTD法においては、誘電率などの媒質定数は電磁場のサンプル点ごとに指定できるため、媒質の不均質性に対しては特別な処理をする必要がない。

解析対象に分散性媒質を含む場合は、その誘電率 $\epsilon(\mathbf{r}, \omega)$ を介した電場と電束密度の関係

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}, \omega) = \epsilon(\mathbf{r}, \omega)\mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) \quad (44)$$

をフーリエ逆変換によって時間領域で表現した式¹⁸⁾

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}, t) = \epsilon_0\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) + \epsilon_0 \int_{-\infty}^{\infty} G(\tau)\mathbf{E}(\mathbf{r}, t - \tau)d\tau \quad (45)$$

を、FDTD法の基本式の中に組み込まなくてはならない。ここで、 ϵ_0 は真空中の誘電率、 $G(\tau)$ は ϵ の分散性を時間領域に変換したものである。なお、金属は、光の周波数域においてその誘電率が $\epsilon(\omega) = \epsilon_R - i\sigma/\omega$ のように周波数依存性を示すことになるため、分散性媒質として扱う必要が生じる。

非線形媒質では、式(44)は非線形分極 $\mathbf{P}_{NL}$ を用いて

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}, \omega) = \epsilon(\mathbf{r}, \omega)\mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) + \mathbf{P}_{NL}(\mathbf{r}, \omega) \quad (46)$$

となるため、分散性媒質と同様な扱いをすることになる。

異方性媒質において、もし誘電率テンソルの対角成分以外は0になるように主軸方向を選ぶことが出来れば、FDTD法の基本式をそのまま使用すれば良い。しかし、電気光学効果などが出現する場合には、基本式に加えて非対角項を含む式が必要になる^{19,20)}。

なお、構造は周期的だが電磁場が非周期的な場合、周期境界における位相差のため、前述のような単純な周期境界条件は使用できず、非常に複雑な処理²¹⁾が必要になる。これには、たとえば、回折格子に平面波が斜め入射する問題などが相当する。この問題には、ある程度の数の周期を計算することで簡単に対処できるが、当然、計算機への負荷は大きくなる。

4. 周波数領域の手法との比較

周波数領域の解析手法には様々なものがあり、光学における電磁波伝搬問題に関してもそれぞれに得手不得手があるため、解決したい問題に応じて適切な選択をすることが大切である。たとえば、回折光学素子のような微細構造を有する光学素子に関する問題の場合、一番良く利用されるのがフーリエモード法^{22,23)}である。これは、非周期的構造への拡張に関する報告^{24,25)}もあるが、基本的に回折格子のような無限に続く周期的構造のための解析手法で、特に矩形や階段状構造に威力を発揮する。FDTD法とフーリエモード法で同じ問題を計算した場合、必要なRAMの量、計算速度、計算結果の精度のいずれをとってもFDTD法に勝ち目は無い^{11,13)}。したがって、周期構造の線形問題を扱う限り、FDTD法を使用する理由はないのではないか。一方、計算時間の長さやハードウエ

アへの負担の大きさという短所はあるものの、原理的にFDTD法で解けない問題は無いと言って良い。これこそが、FDTD法の最大の魅力であり、多くの研究者・技術者に支持される理由であろう。なお、周波数領域の手法の詳細に関しては、本特集の他の解説記事を参照していただきたい。

5. おわりに

FDTD法はその発祥の分野、アンテナ・電波伝搬は言うに及ばず、今や光の分野でも電磁場解析の主流になったと言って差し支えないであろう。その最大の理由は、解析できる問題を選ばない柔軟性にあると言える。市販のソフトウェアも増えてきたとはいえ、FDTD法のプログラムを自作したいとの要望も多い。本稿はその手助けとなるべく、FDTD法の必要最低限の要素を基本から解説したものであり、解析対象が誘電体のみの2次元問題でTE偏光の場合は本稿に出てくる数式だけで十分である。ただし、計算によって得られた結果(各位置における電磁場の値の時間変化)の処理については述べていない。また、さらに複雑な問題に対しては、文献を参照していただきたい。

前項で述べたように、どんな問題にもFDTD法を使用することは得策ではない。しかし、ひとつプログラムを作っておけば、多少の手直しで他の多くの問題に適用することが可能なため、長い目で見れば便利である。また、FDTD法の利用に際しては、実際の実験室での現象を忠実に計算モデルに反映させる必要があるため、むしろ実験家にとってとつき易いのではないかと感じている。

参考文献

- 1) M. Born and E. Wolf: *Principles of Optics* (Cambridge University Press, Cambridge, 1999) p.11.
- 2) J. W. Goodman: *Introduction to Fourier Optics* (Roberts & Company, Greenwood Village, 2005) p.35.
- 3) 電気学会: 計算電磁気学 (培風館, 2003).
- 4) K. S. Yee: IEEE Trans. Antennas Propag. **AP-14** (1966) 302.
- 5) A. Taflov and S. C. Hagness: *Computational Electrodynamics: the Finite-difference Time-domain Method* (Artech House, Norwood, 2000).
- 6) A. Taflov (ed): *Advances in Computational Electrodynamics: the Finite-difference Time-domain Method* (Artech House, Norwood, 1998).
- 7) 宇野 亨: FDTD法による電磁界およびアンテナ解析 (コロナ社, 1998).
- 8) 橋本 修: 実践FDTD時間領域差分法 (森北出版, 2006).
- 9) 市川 裕之: 光学 **27** (1998) 647.
- 10) 市川 裕之: 最新回折光学素子技術全集 (技術情報協会, 2004) p.25.
- 11) 市川 裕之: 増補改訂版 回折光学素子入門 (オプトロニクス社, 2006) p.82.
- 12) 市川 裕之: 光学 **35** (2006) 340.
- 13) 市川 裕之: 光アライアンス **18** (2007) 6.
- 14) 光学系設計ソフト機能ガイド: 光アライアンス **18** (2007) 17.
- 15) H. Ichikawa and Y. Sugimoto: Opt. Commun. **234** (2004) 71.
- 16) G. Mur: IEEE Trans. Electromagn. Compat. **EMC-23** (1981) 377.
- 17) J. -P. Berenger: J. Comput. Phys. **114** (1994) 185.
- 18) J. D. Jackson: *Classical Electrodynamics* (John Wiley & Sons, New York, 1999) p.330.

- 19) S. G. García, T. M. Hung-Bao, R. G. Martin, and B. G. Olmedo: IEEE Trans. Microwave Theory Tech. **44** (1996) 2195.
- 20) H. Ichikawa and H. Kikuta: J. Opt. Soc. Am. A **22** (2005) 1311.
- 21) J. A. Roden, S. D. Gedney, M. P. Kesler, J. G. Maloney, and P. H. Harms: IEEE Trans. Microwave Theory Tech. **46** (1998) 420.
- 22) J. Turunen: ed. H. P. Herzig, *Micro-optics* (Taylor & Francis, 1997) p.31.
- 23) 市川 裕之: “フーリエモード法”, 最新回折光学素子技術全集, (技術情報協会, 2004) p.25.
- 24) Ph. Lalanne and E. Silberstein: Opt. Lett. **25** (2000) 1092.
- 25) B. Guizal, D. Barchiesi, and D. Felbacq: J. Opt. Soc. Am. A **20** (2003) 2274.

レーザーワード

フーリエモード法 (Fourier modal method)

回折格子のような無限周期構造による回折波の電磁場を求めるもので、マクスウェルの方程式の周波数領域における数値解法といえる。格子層内の電磁場に関する固有地問題と格子層境界での境界値問題を解くことで、全空間領域での電磁場の値が得られる。フーリエ級数展開の操作を含むため、現実の計算では有限個のモードしか含むことが出来ないが、収束性を確認することで、実用上、十分な精度を持つ厳密な回折の計算とみなされている。

る。特に、格子深さ方向に階段状の構造に対して威力を発揮するため、共鳴領域やサブ波長領域の回折格子の効率の計算では最も頻繁に使用されている。その一方で、滑らかな表面凹凸構造を有する金属格子のTM波に関しては使用できないことが知られている。なお、RCWAとして知られる厳密結合波解析はフーリエモード法の一つである。

(市川 裕之)