

論文の内容の要旨

氏名：呉 迪

博士の専攻分野の名称：博士（工学）

論文題名：複素周波数領域有限差分法の開発とプラズモニックデバイス設計に関する研究

近年、集積回路のさらなる高速化、小型化及び省電力化を目指して光回路の研究が精力的に進められている。従来の光回路に用いられる光導波路と集光素子は誘電体材料で作られるものが一般的であるが、光閉じ込め効果には回折限界が存在する。そのため、光の回折限界を超えた小型化には困難が生じる。そこで、金属ナノ構造体における表面プラズモンを利用したプラズモニックデバイスが 1990 年代から検討されてきた。表面プラズモンは光と結合した自由電子の集団振動であり、金属ナノ構造体と誘電体の界面に光を閉じ込められ、波長より狭い領域での集光が可能である。このため、回折限界を超えた光デバイスの小型化を実現する要素技術として、プラズモニックデバイスが様々な分野で注目されている。

このようなプラズモニックデバイスの設計及びその特性解析に必須となる電磁界数値解析には、これまで多くの手法が開発・検討されている。時間領域有限差分法 (Finite-Difference Time-Domain: FDTD) は、電磁界時間応答解析の代表的な手法として商用シミュレータにも搭載され、近年広く利用される手法の一つである。しかしながら、空間刻みに依存する数値的な安定条件が存在するため、プラズモニック導波路のような、ナノメートルの断面構造に対し長さがミリメートルからセンチメートルとなるマルチスケールの構造を解析する際は、計算コストが膨大になる。無条件安定な陰的な FDTD も開発されているが、計算速度の向上を実現できる一方で、時間間隔を大きくするにつれて計算精度の低下が生ずる。そのため、プラズモニックデバイスの設計における数値解析を高速かつ高精度に行うには、新規手法の開発は極めて重要である。

周波数領域差分法 (Finite-Difference Frequency-Domain: FDFD) は薄膜構造や導波路などに対して周波数応答を効率的に求められる手法として知られる。解析空間は Yee 格子で離散化しているため、解析モデルの作成が容易であり、他の差分法とのモデル共有が可能などの利点がある。また、Subpixel Smoothing などの手法を用いることによって、曲面構造を高精度にモデル化でき、定式化の改良による異方性や非線形媒質の解析も比較的容易に実現できる。

本研究では、FDFD を複素周波数領域 (Complex-Frequency-Domain: CFD) に拡張する、複素周波数領域有限差分法 (Finite-Difference Complex-Frequency-Domain: FDCFD) を開発した。また、FDCFD を高速逆 Laplace 変換 (Fast Inverse Laplace Transform: FILT) と併用し、電磁界の時間応答を求める FDCFD-FILT を開発した。FDCFD-FILT は電磁界の数波数応答と時間応答のいずれも効率よく解析できる。さらに、任意時刻における応答波形を独立に計算できるため、計算精度が時間間隔に依存しない特徴を有し、並列計算に適している。

本論文は 5 章から構成されている。以下に各章の概要を説明する。

「第 1 章 序論」では、研究の背景と目的、本論文で用いる記号について述べた。

「第 2 章 複素周波数領域有限差分法の開発」では、FDCFD の理論と定式化について述べた。FDCFD では、複素周波数領域の Maxwell 方程式を空間について差分近似してから、線形方程式を立てて解くことによって未知電磁界を求める。差分近似する際は電磁界が交互に配置される Yee セルが用いられた。また、反復法で線形方程式を解くときの収束性を向上させるために、電界と磁界の波動方程式を用いる定式化の導入と実装方法について述べた。有限の解析領域境界から電磁波の反射を防ぐために、性能が最も優れる吸収境界条件である複素周波数シフト PML (Perfectly Matched Layer) を FDCFD に実装した。複素周波数シフト PML は拡張した座標系で定式化したものであり、低周波成分を持つ電磁波とエバネッセント波を吸収することができる。また、表面プラズモンを正確に評価するために、ナノスケールにおける電子運動の非局所効果を考慮した Hydrodynamic Drude モデルを分散性評価のため FDCFD に実装した。

FDCFD の信頼性を検証するために、ナノ金属柱の電磁界散乱解析を行い、従来法と比較した。波長応答解析の結果は厳密解との相対誤差が 1% 以下であり、FILT と組み合わせた時間応答解析は FDTD

と比べた際の相対誤差が 0.1%以下であることを確認した。また、時間応答解析の時間間隔を 30 倍に広げても、解析結果が完全に一致することを明らかにした。

「第 3 章 時間応答解析の高速化及び並列計算」では、FDCFD と FILT の高速化及び並列化について述べた。この章では FDCFD における大規模線形方程式を高速に解くための直接解法を提案した。本直接解法はマルチレベル領域分割法で未知電磁界の成分を複数のサブドメインに分割してから Schur 補行列で線形方程式を縮小し、順次求解する。このプロセスにおける行列演算はすべて直接法で容易に行うことができる。従来の FILT では、比較的遅い観測時間での応答波形を求める際、数値誤差の収束が遅い問題点が存在するため、高速化アルゴリズムを提案し、複素平面で処理する特異点を最適化した。計算する特異点を入射波の帯域に合わせて選択することにより、従来の FILT に比べて 5 倍程度の高速化を実現した。また、時間応答解析を行う際の負荷分散方法を議論し、複素周波数領域分割と時間領域分割の並列化効率及び計算負荷の最大分散数を明らかにした。ここで、時間・複素周波数領域分割を用いることにより、最大 900 倍の高速化を実現した。

「第 4 章 プラズモニックデバイスの設計」では、FDCFD-FILT を用いて以下のプラズモニックデバイスを設計し、その応答特性を検証した。

- ・光直接磁気記録用のアパーチャー型アンテナ

アパーチャー型アンテナは高密度の光直接磁気記録を実現するための集光器であり、局所的に高強度の円偏光を生成する装置として設計した。本研究ではアンテナにおける表面プラズモンの解析を行い、外部入射が開始する約 50 fs 後にアンテナ開口中心のみに局所的な円偏光が生成されることを明らかにした。

- ・誘電体装荷グレーティングを用いたプラズモニック導波路

誘電体装荷グレーティングを用いたプラズモニック導波路は光ファイバ間の通信を効率的に行うデバイスとして設計した。ここでは、誘電体装荷グレーティングカプラーとプラズモニック導波路の設計を行い、導波路の伝搬効率、光ファイバとの結合率を議論した。グレーティング部の光結合率は最大 26%であり、50 μm 離れた出力側では 12.8%の入出力比が得られた。また、設計した導波路の伝搬損失は -2.5dB/100 μm であることを確認した。

- ・量子ウォーク実現に向けた金属ストリップ型プラズモニック導波路アレイ

量子ウォークは量子力学的な粒子ランダムウォークであり、その原理検証は量子情報処理への応用を目指して 2010 年頃から世界各国で精力的に研究が行われている。ここでは、金属ストリップ型プラズモニック導波路アレイの電磁界分布を古典的に計算し、表面プラズモンがストリップ間に遷移する挙動を解析した。導波路アレイにおいて、プラズモンの弾道的な広がりとは非 Gaussian 分布が確認され、量子ウォーク応用への実用性を明らかにした。

「第 5 章 結言」には、本研究で得られた成果と各章の内容をまとめた上、本研究に残された課題と問題点について述べた。

本研究では複素周波数領域有限差分法 (FDCFD) と高速逆 Laplace 変換 (FILT) を組み合わせた FDCFD-FILT を開発し、プラズモニックデバイスの設計を行うことを目的として研究を行った。開発した FDCFD-FILT はナノスケールにおける電磁界の時間応答解析手法として有力であることを明らかにし、プラズモニックデバイスの高精度かつ高速な設計法を提示した。

また、本研究には以下の課題が残される。

- ・多様な物理現象を考慮したマルチスケール混合物理解析

近年、磁気記録分野や光マグノニクス分野で熱・磁性を考慮したプラズモニックデバイスが提案されている。Landau-Lifshitz-Gilbert 方程式, Thomason 方程式, レート方程式などの支配方程式を Maxwell 方程式と連立的に解くことにより、複数の物理現象を同時に考慮する混合物理解析を行うことが可能である。さらに、本手法は無条件安定を実現できるため、時間スケールが異なる物理現象の解析には適性の良いことが予想される。

- ・プラズモニックデバイスの最適化設計

表面プラズモンの応答特性はデバイスの微細形状に強く依存するため、プラズモニックデバイス設計では、最適化設計が重要となる。Deep Learning などを用いる最適化手法を複素周波数領域有限差分法と併用し、プラズモニックデバイスの最適化設計を行うことが望ましい。